

5.^a edición

FÍSICA CUÁNTICA



Carlos Sánchez del Río
(Coord.)

PIRÁMIDE

5.^a edición

FÍSICA CUÁNTICA

Coordinador
CARLOS SÁNCHEZ DEL RÍO
PROFESOR EMÉRITO. FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
DE LA UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

5.^a edición

FÍSICA CUÁNTICA

EDICIONES PIRÁMIDE

Edición en versión digital

Está prohibida la reproducción total o parcial de este libro electrónico, su transmisión, su descarga, su descompilación, su tratamiento informático, su almacenamiento o introducción en cualquier sistema de repositorio y recuperación, en cualquier forma o por cualquier medio, ya sea electrónico, mecánico, conocido o por inventar, sin el permiso expreso escrito de los titulares del copyright.

© Carlos Sánchez del Río (Coord.), 2015

© Primera edición electrónica publicada por Ediciones Pirámide (Grupo Anaya, S. A.), 2015

Para cualquier información pueden dirigirse a piramide_legal@anaya.es

Juan Ignacio Luca de Tena, 15. 28027 Madrid

Teléfono: 91 393 89 89

www.edicionespiramide.es

ISBN digital: 978-84-368-3305-8

Relación de autores

Carlos Sánchez del Río (coord.)

Profesor Emérito. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

Ramón Fernández Álvarez-Estrada

Profesor Emérito de Física Teórica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

José Luis Escudero Soto

Profesor titular de Óptica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

Luis García Gonzalo

Catedrático de Física Aplicada. Escuela Politécnica Superior. Universidad Carlos III de Madrid.

José Manuel Guerra Pérez

Catedrático de Óptica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

Pedro M. Mejías Arias

Catedrático de Óptica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

Antonio Muñoz Sodupe

Catedrático de Física Teórica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

Marina Ramón Medrano

Profesora Emérito de Física Teórica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

José Luis Vicent López

Catedrático de Física de la Materia Condensada. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

Índice

Prólogo.....	23
--------------	----

PARTE PRIMERA Orígenes de la física cuántica

1. Radiación del cuerpo negro	29
1.1. Introducción.....	29
1.2. Radiación térmica: ley de Kirchhoff. Concepto de cuerpo negro.....	29
1.3. Modelos experimentales de cuerpo negro	33
1.4. Leyes de radiación del cuerpo negro.....	35
1.5. Fórmula de Rayleigh-Jeans	37
1.6. Fórmula de Planck.....	43
1.7. Teoría de Planck del cuerpo negro: deducción de la fórmula de Planck.....	45
1.8. Aplicación en termometría: pirómetro óptico.....	50
Ejercicios.....	51
2. Comportamiento corpuscular de la radiación.....	53
2.1. Introducción.....	53
2.2. Efecto fotoeléctrico	53
2.3. Emisión de rayos X.....	59
2.4. Efecto Compton.....	62
2.5. Descripción corpuscular de otros fenómenos ópticos.....	71
Ejercicios.....	74
3. Dualidad onda-corpúsculo. Relaciones de indeterminación.....	77
3.1. Introducción.....	77
3.2. Dualidad onda-corpúsculo de la radiación.....	77
3.3. Postulado de De Broglie. Dualidad onda-corpúsculo de la materia.....	82
3.4. Confirmación experimental del postulado de De Broglie.....	86
3.5. Principio de indeterminación	92
3.6. Complementariedad	98
Ejercicios.....	101

4. Modelos atómicos. Series espectrales	103
4.1. Introducción	103
4.2. Modelo atómico de Thomson	103
4.3. Modelo atómico de Rutherford.....	109
4.4. Sección eficaz	116
4.5. Series espectrales. Principio de combinación	121
4.6. Insuficiencia del modelo atómico de Rutherford	125
Ejercicios.....	127
5. Teoría de Bohr	129
5.1. Introducción.....	129
5.2. Postulados de Bohr	129
5.3. Confirmación experimental de la teoría de Bohr.....	137
5.4. Reglas de cuantificación de Sommerfeld-Wilson-Ishiwara.....	143
5.5. Principio de correspondencia	152
5.6. Insuficiencia de la teoría cuántica antigua.....	155
Ejercicios.....	156
Soluciones a los ejercicios (capítulos 1 a 5)	159

PARTE SEGUNDA
Mecánica cuántica

6. Ecuación de Schrödinger e introducción a la interpretación probabilística	169
6.1. Fenómenos ondulatorios y ecuaciones de ondas en física clásica.....	169
6.2. Función de onda y ecuación de ondas de Schrödinger.....	171
6.3. Principio de superposición para ondas de materia	174
6.4. Partícula en potencial exterior: ecuación de Schrödinger	175
6.5. Evolución de un paquete de ondas libre.....	178
6.6. Interpretación probabilística de la función de onda	182
6.7. Imagen hidrodinámica: corriente de probabilidad y ecuación de continuidad	185
6.8. Normalización de la función de onda.....	188
6.9. Probabilidad de encontrar la partícula: explicación mediante copias idénticas del sistema.....	189
Ejercicios.....	191
7. Desarrollo de la interpretación probabilística	193
7.1. Partícula macroscópica en mecánica clásica: revisión de algunas propiedades generales.....	193
7.2. Valores medios de la posición	194
7.3. El momento en mecánica cuántica.....	195
7.4. Consistencia de la interpretación	197
7.5. La energía en mecánica cuántica	198
7.6. Interpretación probabilística en el espacio de momentos	200
7.7. Reglas de conmutación de posiciones y momentos	201

7.8.	Incertidumbres y relaciones de incertidumbre para posiciones y momentos	202
7.9.	Incertidumbre en la energía y relación de incertidumbre energía-tiempo	205
7.10.	Estados estacionarios y propiedades	206
7.11.	Partícula microscópica cargada en campo electromagnético exterior	210
7.12.	Sistema con dos o más partículas microscópicas diferentes	211
7.13.	Operadores autoadjuntos conmutantes	216
	Cuestiones complementarias	218
	Ejercicios	224
8.	Estados ligados en una dimensión	227
8.1.	Introducción	227
8.2.	Pozo de paredes infinitas	228
8.3.	Pozo cuadrado	232
8.4.	El oscilador armónico unidimensional	237
	Ejercicios	243
9.	Coefficientes de reflexión y transmisión	245
9.1.	Introducción	245
9.2.	Escalón de potencial	245
9.3.	Barrera de potencial	248
9.4.	Colisión de paquetes de ondas	252
9.5.	Evolución libre de un paquete gaussiano	254
	Ejercicios	256
10.	Sistemas tridimensionales	259
10.1.	Introducción	259
10.2.	Pozo infinito en tres dimensiones	260
10.3.	El oscilador armónico tridimensional	263
10.4.	Partícula cargada en un campo magnético uniforme	265
	Ejercicios	270
11.	Momento angular	273
11.1.	El problema de dos cuerpos	273
11.2.	Potenciales centrales	274
11.3.	Momento angular orbital	276
11.4.	Autovalores y autofunciones: armónicos esféricos	278
11.5.	Reglas de conmutación	285
11.6.	Momento angular en general. Propiedades y espectro	287
11.7.	Autoestados	289
	Cuestiones complementarias	292
	Ejercicios	293
12.	Potenciales centrales	295
12.1.	Introducción	295
12.2.	Pozo esférico. Solución de la ecuación radial	297

12.3.	Potencial coulombiano: átomo de hidrógeno.....	303
12.4.	Oscilador armónico isótropo.....	314
	Ejercicios.....	317
13.	Espín.....	321
13.1.	Interacción de un átomo con un campo magnético.....	321
13.2.	Descripción del experimento.....	324
13.3.	Discusión de los resultados del experimento.....	324
13.4.	Función de onda e interpretación probabilística.....	325
13.5.	Composición de espines.....	328
	Ejercicios.....	331
14.	Métodos de aproximación.....	333
14.1.	Introducción.....	333
14.2.	Teoría de perturbaciones estacionarias. Niveles no degenerados.....	334
14.3.	Teoría de perturbaciones. Niveles degenerados.....	338
14.4.	Método variacional.....	339
14.5.	Perturbaciones dependientes del tiempo.....	342
	Ejercicios.....	346
15.	Partículas idénticas. Fotones.....	349
15.1.	Partículas idénticas en mecánica clásica y cuántica.....	349
15.2.	Dos partículas microscópicas idénticas: función de onda.....	351
15.3.	Ejemplo: dos partículas microscópicas libres.....	352
15.4.	$N(> 2)$ partículas microscópicas idénticas (I): función de onda.....	354
15.5.	$N(> 2)$ partículas microscópicas idénticas (II): algunas propiedades generales....	355
15.6.	$N > 2$ fermiones en potencial exterior.....	357
15.7.	Introducción a la mecánica cuántica de un fotón.....	358
15.8.	Sistemas con $N \geq 2$ fotones.....	363
	Ejercicios.....	364
16.	Introducción a la Mecánica Estadística Cuántica.....	367
16.1.	Aspectos generales.....	367
16.2.	Estadística clásica de Boltzmann con degeneración: revisión detallada.....	370
16.3.	Estadística cuántica de Fermi-Dirac.....	373
16.4.	Estadística cuántica de Bose-Einstein.....	376
16.5.	Algunas propiedades generales.....	379
16.6.	Estadísticas cuánticas: reinterpretación e inclusión de interacciones entre consti- tuyentes.....	380
	Cuestiones complementarias.....	384
	Ejercicios.....	388
17.	Aplicaciones de las estadísticas cuánticas.....	391
17.1.	Gas ideal clásico monoatómico.....	391
17.2.	Gas de fotones de equilibrio termodinámico dentro de una cavidad.....	392

17.3. Gas de fonones: calor específico de un sólido cristalino.....	395
17.4. Gas ideal de Fermi.....	398
17.5. Gas ideal de Bose. Condensación de Bose-Einstein.....	407
Cuestiones complementarias.....	414
Ejercicios.....	416
18. Introducción a la teoría cuántica de la dispersión.....	419
18.1. Aplicación de la interpretación probabilística: dispersión de una partícula por un potencial.....	419
18.2. Justificación de [18.1.3] y una representación para $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$	423
18.3. Aproximación de Born para $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$: aplicación a los potenciales de Yukawa y Coulomb.....	426
18.4. Dispersión por un potencial cristalino: una discusión elemental.....	428
18.5. Distribución de la corriente de probabilidad: el teorema óptico.....	430
18.6. Dispersión por potenciales centrales: (I) Defasajes.....	438
18.7. Dispersión por potenciales centrales: (II) Resonancias.....	442
Cuestiones complementarias.....	446
Ejercicios.....	449
Soluciones a los ejercicios (capítulos 6 a 18).....	453

PARTE TERCERA Átomos

19. El átomo de hidrógeno.....	507
19.1. Introducción.....	507
19.2. Función de ondas del átomo de hidrógeno.....	508
19.3. Corrección relativista al átomo de hidrógeno.....	509
19.4. La corrección relativista y el término de Darwin.....	514
19.5. El acoplo espín-órbita y la estructura fina en los átomos hidrogenoides.....	518
19.6. Otras correcciones.....	522
Ejercicios.....	522
20. Átomos en campos externos constantes.....	525
20.1. Introducción.....	525
20.2. El efecto Zeeman.....	525
20.3. El efecto Stark.....	532
Ejercicios.....	536
21. Absorción y emisión de luz por los átomos.....	537
21.1. Introducción.....	537
21.2. Resumen de la teoría clásica de la interacción radiación-materia.....	538
21.3. Teoría semiclásica de la interacción radiación-materia.....	544
21.4. Osciladores clásicos y cuánticos.....	552
21.5. Las reglas de selección.....	553
Ejercicios.....	556

22. El átomo de helio	559
22.1. Introducción	559
22.2. El espectro del átomo de helio	561
22.3. Partículas idénticas. El átomo de helio.....	563
22.4. Complemento 1: resolución aproximada de la ecuación del átomo de helio	572
Ejercicios.....	574
23. Átomos multielectrónicos	577
23.1. Introducción	577
23.2. Aproximación de un electrón	577
23.3. Método de Hartree.....	580
23.4. Clasificación de los orbitales atómicos.....	582
23.5. Configuración electrónica. Tabla periódica	584
23.6. Acoplos residuales	586
23.7. Acoplo Russell-Saunders	589
23.8. Acoplo JJ.....	595
23.9. Estructura hiperfina.....	597
23.10. Complemento 1: espectros de rayos X. Ley de Moseley	599
Ejercicios.....	602
Soluciones a los ejercicios (capítulos 19 a 23)	603

PARTE CUARTA
Moléculas

24. Niveles electrónicos de las moléculas diatómicas	611
24.1. Introducción	611
24.2. Estructura molecular	611
24.3. Descripción cuántica de las moléculas	616
24.4. Moléculas diatómicas. Aproximación de Born-Oppenheimer	616
24.5. Términos electrónicos de la molécula H_2^+	621
Ejercicios.....	627
25. Términos moleculares	629
25.1. Introducción	629
25.2. Clasificación de los términos moleculares en aproximación de un electrón.....	630
25.3. Términos moleculares y atómicos. Acoplamiento de momentos.....	632
25.4. Términos degenerados.....	634
25.5. Ejemplos	638
Ejercicios.....	640
26. Interpretación física del enlace químico	641
26.1. Introducción	641
26.2. Teorías precuánticas del enlace químico	642

26.3.	El estado fundamental y la valencia	644
26.4.	Geometría de los enlaces en moléculas poliatómicas	649
26.5.	Momentos dipolares. Fuerzas intermoleculares	652
	Ejercicios.....	654
27.	El movimiento de los núcleos.....	655
27.1.	Introducción	655
27.2.	Las rotaciones y vibraciones moleculares	656
27.3.	Calor específico de los gases moleculares	659
27.4.	La ecuación nuclear en las moléculas diatómicas	661
27.5.	Limitaciones al concepto de molécula	667
	Ejercicios.....	671
28.	Espectroscopía molecular	673
28.1.	Introducción.....	673
28.2.	Espectros moleculares.....	674
28.3.	Fenómenos de dispersión. Efecto Raman	680
28.4.	Instrumentación espectroscópica.....	682
	Ejercicios.....	685
	Soluciones a los ejercicios (capítulos 24 a 28)	687

PARTE QUINTA
Sólidos

29.	La estructura cristalina del estado sólido.....	697
29.1.	Planteamiento general	697
29.2.	La red cristalina	699
29.3.	El efecto de la temperatura: fonones.....	701
29.4.	Difracción en una red cristalina.....	708
	Ejercicios.....	718
30.	Electrones en sólidos	721
30.1.	Electrones en la red cristalina: teorema de Bloch y teoría de bandas.....	721
30.2.	Algunos conceptos básicos: superficies de Fermi, masas efectivas y huecos	729
30.3.	Semiconductores.....	734
	Ejercicios.....	739
31.	Algunos efectos cuánticos en sólidos	741
31.1.	Introducción.....	741
31.2.	Conducción en metales.....	742
31.3.	Electrones «calientes» en semiconductores.....	748
31.4.	Resonancias magnéticas	752
31.5.	Niveles de Landau.....	755
	Ejercicios.....	760

32. Orden magnético espontáneo en sólidos.....	761
32.1. Fenomenología del orden magnético.....	761
32.2. Teorías de canje.....	765
32.3. Magnetismo de los elementos de transición y de las tierras raras	772
Ejercicios.....	778
33. Superconductividad	779
33.1. Fenomenología de la superconductividad	779
33.2. La teoría BCS	780
33.3. Efectos cuánticos macroscópicos en superconductor: cuantización del flujo magnético y efecto Josephson	789
Ejercicios.....	794
Soluciones a los ejercicios (capítulos 29 a 33)	801

PARTE SEXTA
Núcleos atómicos

34. Núcleos atómicos y procesos nucleares	817
34.1. El núcleo atómico: generalidades	817
34.2. Probabilidad de las reacciones nucleares.....	820
34.3. Probabilidad de las desintegraciones nucleares	823
34.4. Cinemática de los procesos nucleares.....	826
34.5. Desintegraciones y reacciones nucleares.....	828
34.6. Reacciones en el sistema del centro de masas	830
Ejercicios.....	833
35. Interacción de radiaciones ionizantes con la materia.....	835
35.1. Radiaciones ionizantes	835
35.2. Interacción de partículas cargadas con la materia	835
35.3. Penetración de partículas cargadas en la materia	839
35.4. Interacción de fotones con la materia	841
35.5. Penetración de fotones en la materia	846
35.6. Detección de radiaciones ionizantes.....	848
Ejercicios.....	849
36. Estructura de los núcleos atómicos.....	851
36.1. El núcleo como sistema cuántico	851
36.2. Masa, tamaño y forma de los núcleos	852
36.3. Magnetismo nuclear	854
36.4. Fuerzas nucleares	857
36.5. Modelo nuclear de la gota líquida	861
36.6. Modelo nuclear de capas.....	864
36.7. Modelo nuclear colectivo	866
Ejercicios.....	866

37. Radioactividad	869
37.1. Radioactividad natural y artificial.....	869
37.2. Fenomenología de la emisión gamma	870
37.3. Absorción resonante.....	872
37.4. Reglas de selección en la emisión gamma	874
37.5. Fenomenología de la desintegración alfa	876
37.6. Emisión alfa y efecto túnel.....	878
37.7. Fenomenología de la emisión beta	879
37.8. Teoría elemental de la emisión beta	882
Ejercicios.....	884
38. Reacciones nucleares	885
38.1. Reacciones nucleares: generalidades	885
38.2. Reacciones producidas por neutrones	886
38.3. Reacciones producidas por partículas cargadas	887
38.4. Reacciones producidas por fotones	888
38.5. Principios de conservación en las reacciones nucleares.....	888
38.6. Principio del balance detallado	890
38.7. Sistemática de las reacciones nucleares.....	891
38.8. Reacciones que ocurren mediante el núcleo compuesto.....	893
38.9. Secciones eficaces para partículas lentas	894
38.10. Fórmula de Breit-Wigner.....	895
Ejercicios.....	896
Soluciones a los ejercicios (capítulos 34 a 38)	899

PARTE SÉPTIMA
Partículas elementales

39. Aspectos generales de las partículas elementales	909
39.1. Partícula elemental	909
39.2. Masa y carga. Unidades naturales	909
39.3. Primeros ejemplos: protón, neutrón, electrón y fotón.....	911
39.4. Rayos cósmicos: nuevas partículas. Antipartículas.....	913
39.5. Clasificación de partículas.....	915
40. Interacciones entre partículas elementales	919
40.1. Interacciones fundamentales.....	919
40.2. Interacción electromagnética	920
40.3. Interacciones fuertes (resonancias; partículas extrañas).....	921
40.4. Interacciones débiles: partículas W^{\pm} , Z^0	923
40.5. Hadrones (bariones y mesones) y leptones.....	925
40.6. Interacción gravitatoria	926

41. Leyes de conservación	927
41.1. Simetrías y leyes de conservación: absolutas y relativas.....	927
41.2. Leyes de conservación espacio-temporales	928
41.3. Conservación de la carga eléctrica	929
41.4. Isospín	929
41.5. Números cuánticos internos aditivos.....	931
41.6. Relación de Gell-Mann y Nishijima.....	935
41.7. Inversión espacial (P: Paridad).....	936
41.8. Conjugación de carga (C).....	938
41.9. Simetría CP	938
41.10. Inversión temporal (T)	940
41.11. Simetría CTP.....	941
41.12. Resumen	941
42. Estructura de las partículas: las familias	943
42.1. Las tres familias leptónicas: el leptón pesado (τ)	943
42.2. Estructura de los hadrones: los quarks	944
42.3. El tercer quark: s («strange»: extraño).....	948
42.4. El cuarto quark: c («charm»: encanto).....	949
42.5. El quinto quark: B («beauty»: belleza).....	950
42.6. El sexto quark: t («truth»: verdad).....	951
42.7. El color.....	952
42.8. El confinamiento: los gluones	953
42.9. Modelo estándar.....	955
42.10. Supersimetría: nexos entre bosones y fermiones.....	956
Ejercicios.....	957
Soluciones a los ejercicios (capítulos 39 a 42)	961
Tablas de partículas.....	971

APÉNDICE

A. Unidades y cálculos en física cuántica.....	977
A.1. Unidades especiales	977
A.2. Constantes fundamentales.....	978
A.3. Unidades de Gauss.....	979
A.4. Cálculos	980
A.5. Otros sistemas de unidades.....	981
B. Formalismo matemático en mecánica cuántica.....	985
C. Funciones especiales y tablas	991
C.1. Función gamma.....	991
C.2. Función zeta de Riemann	992

C.3.	Polinomios de Hermite	992
C.4.	Funciones esféricas de Bessel.....	994
C.5.	Polinomios generalizados de Laguerre	995
C.6.	Polinomios de Legendre	997
C.7.	Funciones asociadas de Legendre.....	998
C.8.	Armónicos esféricos.....	999
C.9.	Desarrollos en armónicos esféricos.....	999
C.10.	Coefficientes de Clebsch Gordan.....	1000
D.	Cinemática relativista	1003
D.1.	Introducción	1003
D.2.	Relaciones entre variables en el sistema de laboratorio y en el centro de masas..	1006
E.	Interferencia de un fotón consigo mismo	1011
E.1.	Experimentos anteriores a 1970	1011
E.2.	Otros experimentos.....	1013
	Bibliografía	1015
F.	Interferencia y difracción de neutrones	1017
F.1.	Aspectos generales.....	1017
F.2.	Cambio de signo de la función de onda neutrónica debido a una rotación de 360° o a un campo magnético.....	1021
F.3.	Efectos de la gravedad sobre los neutrones térmicos	1022
F.4.	Otros efectos con neutrones térmicos.....	1024
F.5.	Neutrones fríos	1025
F.6.	Neutrones ultrafríos.....	1026
F.7.	Copias idénticas de un sistema y sistema individual	1026
	Nota adicional.....	1029
	Bibliografía	1030
G.	Teorías de variables ocultas. Resultados experimentales.....	1033
G.1.	Mecánica cuántica y teorías de variables ocultas: algunas generalidades	1033
G.2.	Emisión de fotones en cascada.....	1036
G.3.	Aniquilación electrón-positrón en dos fotones	1038
G.4.	Dispersión elástica protón-protón a baja energía.....	1040
G.5.	Mediciones sucesivas en un sistema mecano-cuántico.....	1042
G.6.	Relación de incertidumbre posición-momento: experimentos	1042
G.7.	Conclusión.....	1044
	Bibliografía	1045
H.	Bandas en una dimensión: modelo de Krönig-Penney	1049
I.	Superconductores de alta temperatura crítica.....	1053
J.	Efecto Hall cuántico	1055
K.	El láser	1061

L.	La energía nuclear de fisión	1067
M.	La energía nuclear de fusión	1071
N.	Fuentes. Aceleradores. Detectores.....	1077
	N.1. Fuentes	1077
	N.2. Aceleradores.....	1078
	N.2.1. Introducción.....	1078
	N.2.2. LEP	1080
	N.3. LHC (Large Hadron Collider)	1082
	N.4. Detectores	1083
O.	Unidades radiológicas y efectos biológicos de las radiaciones ionizantes..	1085
	O.1. Unidades	1085
	O.2. Efectos biológicos.....	1086
	O.3. Dosis admisibles	1087
P.	Solución numérica de la ecuación de Schrödinger.....	1089
	P.1. Introducción	1089
	P.2. Integración de la ecuación de Schrödinger: función de onda	1090
	P.3. Cálculo de la energía	1093
	P.4. Otros métodos.....	1100
	P.5. Dispersión cuántica en una dimensión	1103
Q.	La oscilación de los neutrinos.....	1105
	Q.1. Fuentes de neutrinos.....	1105
	Q.2. Neutrinos solares y atmosféricos.....	1106
	Q.3. Oscilación de neutrinos	1107
	Q.4. Neutrinos cósmicos	1110
	Q.5. Neutrinos estériles y materia oscura	1111
	Bibliografía	1112
R.	Información cuántica: una introducción elemental.....	1113
	R.1. Qubits.....	1113
	R.2. Estados entrelazados o enredados (<i>entangled states</i>)	1115
	R.2.1. Estados EPR (Einstein, Podolsky y Rosen) o de Bell.....	1115
	R.2.2. Fotones entrelazados: estados de polarización y modos espaciales.....	1116
	R.2.3. Fotones en un divisor de haces (<i>beam splitter</i>)	1118
	R.2.4. Generación experimental de estados entrelazados de dos fotones.....	1120
	R.3. Puertas lógicas cuánticas.....	1123
	R.3.1. Puertas lógicas clásicas.....	1123
	R.3.2. Puertas lógicas cuánticas.....	1124
	R.3.3. El teorema de no-clonación	1125
	R.3.4. Puertas lógicas cuánticas experimentales	1126
	R.4. Teleportación cuántica	1128
	R.4.1. La propuesta teórica de la teleportación	1128

R.4.2. Realización experimental de la teleportación cuántica	1131
R.5. Algoritmos cuánticos	1136
R.5.1. Un ejemplo sencillo.....	1136
R.5.2. Algoritmo cuántico (Shor).....	1137
R.6. Otros desarrollos	1139
Agradecimientos	1139
Bibliografía	1140
S. Nanoestructuras y física cuántica	1141
Bibliografía	1144
T. Atrapamiento y manipulación de iones, átomos y fotones individuales	1145
T.1. Trampas de iones y partículas neutras.....	1145
T.2. Enfriamiento láser.....	1147
T.3. Cavidades, átomos de Rydberg e interacción fotón-átomo aproximada	1151
T.3.1. Átomos y radiación en cavidades.....	1151
T.3.2. Átomos en estados de Rydberg.....	1151
T.3.3. Un modelo aproximado para la interacción fotón-átomo	1153
T.4. Interpretación estadística. Medición. Decoherencia.....	1154
T.4.1. Revisitando el experimento de la doble rendija	1154
T.4.2. Medición e interpretación de Copenhague	1155
T.4.3. Medición y decoherencia: la influencia del medio ambiente (<i>MA</i>)	1157
T.4.4. Decoherencia: otros aspectos	1160
T.4.5. Modelos para una <i>MA</i> cuántico y su interacción con un sistema cuántico <i>S</i>	1161
T.5. El gato de Schrödinger.....	1163
T.5.1. La paradoja.....	1163
T.5.2. Decoherencia debida al <i>MA</i> como solución a la paradoja del gato de Schrödinger	1164
T.6. Experimentos reales con sistemas individuales	1164
T.6.1. Manipulación de iones individuales atrapados	1165
T.6.2. Manipulación de fotones individuales en cavidades	1167
T.7. Tests experimentales de la decoherencia cuántica	1169
T.7.1. Tests manipulando iones atrapados mediante radiación.....	1170
T.7.2. Tests manipulando fotones en cavidades mediante haces atómicos	1170
Bibliografía	1171
Índice analítico	1173

Prólogo

La Física Cuántica es la física de nuestro siglo. Su conocimiento es imprescindible para cualquier físico y muy necesario para otros profesionales (químicos, ingenieros, etc.). Por otra parte, los conceptos cuánticos son tan ajenos a nuestra intuición que su estudio debe interesar también a los pensadores que no se conformen con una visión incompleta de nuestra cultura

A pesar de un interés tan general, el presente libro es consecuencia de una necesidad muy concreta: proporcionar un texto para la materia troncal de Física Cuántica en la carrera de Ciencias Físicas. Los libros que existen con un título análogo al que presentamos son, en general, demasiado elementales. Cuando nuestros estudiantes cursan la Física Cuántica tienen una preparación matemática y un conocimiento de física clásica suficientes para que se les pueda ofrecer un curso de física cuántica de nivel intermedio. Ése es el nivel con el que se ha concebido este libro.

El texto consta de siete partes. Los primeros capítulos son una introducción a los fenómenos cuánticos y a las primeras teorías que se formularon para describirlos. La segunda parte es la más larga y constituye una mecánica cuántica elemental bastante completa. Las otras cinco partes muestran la fertilidad de los conceptos cuánticos en el estudio de los átomos, las moléculas, los sólidos, los núcleos atómicos y las partículas subnucleares. Además, una serie de apéndices complementan o amplían el texto principal.

Como puede verse, el libro es bastante completo y conviene advertir que su contenido total no puede ser asimilado por un alumno normal en un curso. La razón de que se haya decidido presentar una temática tan amplia es doble. Por una parte, ello permite que cada profesor seleccione aquellos capítulos que le parezcan más adecuados al curso que desea impartir. En segundo lugar, hay estudiantes para quienes este curso de física cuántica es terminal por la especialización que eligen para completar sus estudios de grado; parece conveniente que, en el futuro, estos alumnos puedan consultar cuestiones no estudiadas sin recurrir a monografías de un nivel más alto. Finalmente, se ha pensado también que un texto razonablemente completo sería de mayor utilidad para estudiantes de otras carreras a los que nos hemos referido más arriba.

El libro ha sido escrito por nueve autores, todos profesores con amplia experiencia en la materia. Se ha procedido así por dos motivos. El primero es de carácter práctico; un libro de esta envergadura es tarea que requeriría dedicación completa durante mucho tiempo si hubiera de ser escrito por un solo autor. El segundo motivo es que la multiplicidad de autores permite que cada parte sea obra de un especialista, y ello garantiza el rigor.

Evidentemente, la redacción de un libro de texto por muchos autores tiene también sus inconvenientes. Es imposible asegurar la homogeneidad, por mucho esfuerzo de coordinación que los autores acepten. Ante esta imposibilidad hemos creído preferible aceptar el hecho con el convencimiento de que la inevitable variedad tiene también una ventaja. Cuando los alumnos dejan de serlo y pasan a una vida profesional se ven obligados a enfrentarse a escritos muy variados, y no es malo que se vayan acostumbrando al mundo real que encontrarán una vez terminados sus estudios.

Con objeto de no omitir nada que fuera importante, hemos preferido caer, en ocasiones, en el defecto contrario, y por eso no hemos evitado siempre las redundancias; un mismo concepto o una misma cuestión puede aparecer en varios capítulos si de ese modo se consigue que cada tema sea comprensible sin necesidad de recurrir continuamente a otras partes del libro.

En cuanto a las unidades, son varios los sistemas que se utilizan en Física Cuántica, y el estudiante debe acostumbrarse a usar todos. Se supone que el lector está familiarizado con el Sistema Internacional (SI), que es el sistema legal de unidades. Los demás sistemas se exponen en un apéndice.

Los autores agradecen a las señoritas V. Berral, J. Cereceda, R. Flores y M. A. Iglesias su colaboración en la preparación del original.

CARLOS SÁNCHEZ DEL RÍO

Notación

Las cifras decimales que aparecen en el texto se han escrito con un punto en vez de una coma, como es usual en las tablas de datos físicos.

PARTE PRIMERA

Orígenes de la física cuántica

- Radiación del cuerpo negro.
- Comportamiento corpuscular de la radiación.
- Dualidad onda-corpúsculo. Relaciones de indeterminación.
- Modelos atómicos. Series espectrales.
- Teoría de Bohr.

BIBLIOGRAFÍA

Chpolski, E. (1977). *Physique Atomique*, 2 vols. Moscú: MIR.

Este libro presenta un análisis claro y minucioso de los fenómenos cuánticos, proporcionando, asimismo, una visión amplia y pormenorizada de sus aspectos experimentales.

Cropper, W. H. (1970). *The Quantum Physicists*. Londres: Oxford University Press.

De lectura muy amena, en este libro son acertadamente analizados conceptos y fenómenos cuánticos enmarcados en su contexto histórico.

Eisberg, R. M. (1973). *Fundamentos de Física Moderna*. México: Limusa.

Libro de texto en el que, a lo largo de cinco de sus capítulos, se exponen de manera sencilla y con cierto detalle los orígenes de la física cuántica.

Eisberg, R. M. y Resnick, R. (1978). *Física Cuántica*. México: Limusa.

Versión algo más elemental y menos detallada del libro anterior. Contiene numerosos ejercicios ilustrativos y cuenta con buen número de cuestiones y problemas propuestos.

Galindo, A. y Pascual, P. (1985). *Mecánica Cuántica*. Madrid: UNED.

Esencialmente es un libro de ejercicios y problemas resueltos, bien seleccionados y con nivel y temática equiparables a los de este libro. Los comentarios y acotaciones al comienzo de cada capítulo proporcionan una acertada guía conceptual en el estudio de esta materia.

Galindo, A. y Pascual, P. (1989). *Problemas de Mecánica Cuántica*. Madrid: Eudema.

Es un libro de ejercicios y problemas resueltos, claramente explicados y clasificados según tres niveles, de los cuales el más elemental y también el más abundante se corresponde con el nivel de este libro.

Wichmann, E. H. (1971). *Quantum Physics*, vol. 4 (Berkeley Physics Course). Nueva York: McGraw-Hill.

Aunque estructurado de forma diferente a este libro, constituye una extensa introducción a las principales ideas cuánticas, analizadas con claridad y sencillez.

1

Radiación del cuerpo negro

Pedro M. Mejías

1.1. INTRODUCCIÓN

A finales del siglo pasado, tras el establecimiento de la teoría electromagnética de la luz y su posterior aplicación al estudio de la emisión de radiación por los átomos, la física clásica podía proporcionar explicaciones satisfactorias, confirmadas por los experimentos, de casi la totalidad de los fenómenos observados hasta entonces. Existían, no obstante, algunos desajustes importantes entre las previsiones teóricas clásicas y la experiencia, entre las que podíamos mencionar, por ejemplo, los relativos a los espectros de línea en el rango de las longitudes de onda visibles o la disminución con la temperatura del calor molar de los sólidos¹. A estos fenómenos es preciso añadir el que históricamente puso en cuestión los conceptos tradicionales de la física clásica, introduciendo una profunda revisión del formalismo de la mecánica y de la electrodinámica. Nos estamos refiriendo a la emisión de radiación por determinados cuerpos en equilibrio térmico. De su estudio surgió en primer lugar la idea crucial de discretización (cuantificación) de la energía, la cual, posteriormente, se amplió a otras magnitudes y sistemas físicos, generándose así un cambio trascendental en nuestra concepción del mundo físico. El análisis de la radiación térmica emitida por tales cuerpos y de las primeras y fundamentales consecuencias que de él se derivaron constituye el contenido del presente capítulo.

1.2. RADIACIÓN TÉRMICA: LEY DE KIRCHHOFF. CONCEPTO DE CUERPO NEGRO

Nuestra experiencia habitual nos muestra que los cuerpos sólidos calentados a temperaturas suficientemente elevadas se vuelven incandescentes, es decir, emiten radiación en el rango de frecuencias correspondiente al espectro visible. Por ejemplo, en un horno, conforme se va calentando una barra de hierro, su color pasa de ser rojo oscuro a amarillo claro, e incluso, a muy altas temperaturas, presenta un tono blanco azulado. Esto no

¹ Se denomina calor molar de una sustancia a la cantidad de calor que es necesario comunicar a un mol de dicha sustancia para elevar 1 K su temperatura. Para temperaturas altas el calor molar de los sólidos se comportaba experimentalmente según las leyes de la mecánica estadística clásica, pero ésta no era capaz de explicar su disminución con la temperatura.

significa que a temperaturas ordinarias (300 K) los cuerpos no radian, sino que en realidad lo hacen principalmente con frecuencias más allá del infrarrojo. De hecho, incluso a temperaturas elevadas (>1000 K), la mayor parte de la radiación emitida por un cuerpo resulta invisible para el hombre. Es importante señalar que los cuerpos no incandescentes (los que observamos comúnmente en nuestra vida diaria) pueden verse no por la luz que emiten, sino por la que reflejan: basta recordar que en una habitación totalmente a oscuras no es posible ver ningún objeto a menos que se le caliente. Así, si en un cuarto sin luz encendemos una estufa, al poco tiempo la resistencia alcanzará el tono rojizo característico, haciéndose visible ella misma e iluminando además el resto de la habitación, en este caso por reflexión de la radiación emitida en los diversos objetos y paredes. A esta energía electromagnética emitida por los cuerpos como consecuencia de su temperatura la denominaremos radiación térmica. Dicha radiación presenta una distribución espectral continua, cuya forma concreta depende de la temperatura establecida.

Consideremos ahora una cavidad vacía cuya superficie interior es perfectamente reflectante, en la cual colocamos un cuerpo aislado térmicamente de las paredes de dicha cavidad (podemos imaginar, por ejemplo, que se encuentra suspendido de un alambre muy delgado no conductor, como en la figura 1.1). Admitamos además que las paredes de la cavidad se mantienen a temperatura constante, emitiendo la correspondiente radiación térmica.

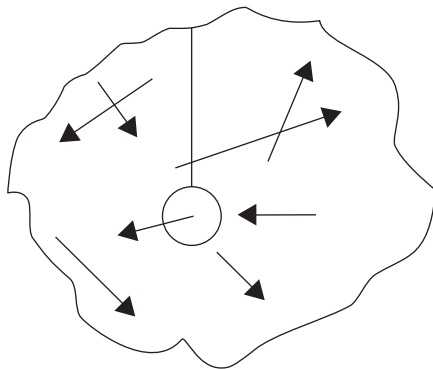


Figura 1.1. Esquema ilustrativo del intercambio energético entre un cuerpo y las paredes de una cavidad.

Si sobre el cuerpo incide radiación, parte de ésta será reflejada, mientras que el resto penetrará en su interior. De esta última una fracción volverá al exterior mediante transmisión simple o tras múltiples reflexiones internas, y otra parte será absorbida y transformada en calor. Este calentamiento hace que el cuerpo a su vez emita radiación, que se distribuirá por la cavidad y se reflejará sobre las paredes. Se establece, por tanto, un intercambio energético entre el cuerpo y la cavidad exclusivamente por radiación, ya que no pueden tener lugar procesos de conducción o convección al no existir sustrato material entre el cuerpo y las paredes del recinto. Finalmente se alcanzará el equilibrio térmico cuando el cuerpo emita la misma cantidad de energía que absorbe. En tal caso, la temperatura del cuerpo será igual a la temperatura de las paredes de la cavidad.

Definamos la irradiancia espectral I_ν , como la potencia de la radiación térmica incidente sobre el cuerpo, por unidad de área y unidad de intervalo de frecuencias. Denotemos por a_ν la fracción de I_ν que el cuerpo absorbe, que llamaremos poder absorbente, y designemos por R_ν la emitancia espectral, esto es, la potencia de la radiación térmica que el cuerpo emite por unidad de área y unidad de intervalo de frecuencias². En el equilibrio se cumplirá

$$R_\nu = a_\nu I_\nu \quad [1.2.1]$$

En la expresión anterior a_ν no debe confundirse con el coeficiente óptico de absorción, que mide la atenuación por unidad de longitud de un haz plano de radiación.

Supongamos ahora que en lugar de un único cuerpo tenemos un cierto número de ellos, cada uno con diferente poder absorbente. Cuando se alcance el equilibrio, aplicando la ecuación [1.2.1] a cada uno de ellos y teniendo en cuenta que el valor de I_ν es el mismo para todos los cuerpos, ya que se trata de la radiación contenida en la cavidad, nos quedará

$$I_\nu = \frac{R_{1\nu}}{a_{1\nu}} = \frac{R_{2\nu}}{a_{2\nu}} = \dots \quad [1.2.2]$$

donde los subíndices 1, 2, ..., designan los diferentes cuerpos. La ecuación [1.2.2], conocida como ley de Kirchhoff, nos indica, por tanto, que para cada frecuencia el cociente entre la potencia emitida por unidad de área y el poder absorbente es, en el equilibrio, el mismo para todos los cuerpos, e igual a la irradiancia de la radiación térmica dentro de la cavidad. Naturalmente, I_ν varía con la temperatura, pero la relación [1.2.2] es válida siempre. La ley de Kirchhoff implica que un buen absorbente es también un buen emisor, y a la inversa. Recíprocamente, un buen reflector será un mal absorbente. Ésta es la razón por la que las paredes interiores de los termos se construyen espejadas.

A los absorbentes perfectos ($a_\nu = 1$) se les denomina *cuerpos negros*. Para ellos, R_ν alcanza su máximo valor posible

$$R_\nu = I_\nu \quad [1.2.3]$$

Un cuerpo negro será, por tanto, un emisor perfecto, lo que implica a su vez que tales cuerpos no reflejan luz. Un ejemplo aproximado de cuerpo negro será cualquier objeto pintado con una capa mate de negro de humo. Sin embargo, desde un punto de vista práctico, un cuerpo negro puede construirse practicando un pequeño orificio en una cavidad cerrada (véase figura 1.2) mantenida a temperatura constante. La radiación que, procedente del exterior, incida sobre dicho orificio penetrará en la cavidad, siendo absorbida por las paredes de ésta tras sucesivas reflexiones internas. Si el tamaño del agujero es mucho más pequeño que el área total de dichas paredes, la probabilidad de que esta radiación vuelva a salir al exterior podrá considerarse despreciable. *El orificio* se comportará, por tanto, como absorbente perfecto. De esta forma, la radiación térmica emergente

² En otros textos de Física Cuántica y de Óptica no se sigue la nomenclatura empleada aquí para designar las magnitudes radiométricas. Así, por ejemplo, R_ν se denomina en algunos casos radiancia espectral y en otros poder emisivo. En el presente capítulo se ha utilizado la nomenclatura más habitual empleada en la literatura.

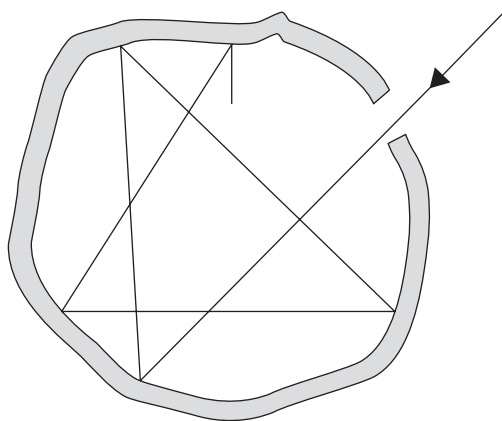


Figura 1.2. Esquema ideal de cuerpo negro. Cualquier radiación incidente sobre el pequeño orificio es absorbida finalmente por la cavidad.

hacia el exterior procedente de dicho agujero será espectralmente idéntica a la de un cuerpo negro. Más adelante veremos algunos modelos experimentales concretos de cuerpo negro. En lo que sigue, sin embargo, vamos a mostrar la relación simple que existe entre la emitancia $R_\nu(T)$ de la radiación térmica emitida por el orificio y la densidad espectral de energía electromagnética, $\rho_\nu(T)$, contenida en la cavidad, a temperatura absoluta T . Supongamos un agujero de área unidad. Obsérvese que la radiación emergente hacia el exterior lo hará con la velocidad c de la luz en cualquier dirección. Teniendo esto en cuenta, si calculamos la energía radiante que atraviesa en la unidad de tiempo el orificio en todas las direcciones posibles dentro de un ángulo sólido de 2π , es decir, hacia un hemisferio, obtenemos para cada frecuencia (véase ejercicio 1.1)

$$R_\nu(T) = \frac{c}{4} \rho_\nu(T) \quad [1.2.4]$$

ya que dicha energía no es sino la potencia emitida por nuestro agujero de área unidad, es decir, la emitancia espectral de nuestro cuerpo negro. La relación [1.2.4] se cumple, además, para *cualquier* cuerpo negro en equilibrio térmico. De hecho, la densidad espectral de energía ρ_ν de la radiación térmica en el interior de una cavidad que contiene diversos cuerpos es totalmente independiente de las propiedades y de la forma de dichos cuerpos (entre los que deben incluirse las propias paredes del recinto). Por ello, el espectro de radiación emitida por un cuerpo negro en equilibrio térmico posee características universales. La razón de esta, en principio, sorprendente independencia se apoya en el segundo principio de la termodinámica. En efecto, supongamos que, por el contrario, ρ_ν en el equilibrio depende de la naturaleza de los cuerpos que se encuentran en el interior de la cavidad. Entonces, si disponemos de dos sistemas en equilibrio a la misma temperatura y los hacemos comunicar entre sí, romperíamos dicho equilibrio. Se introduciría así entre los dos sistemas una diferencia de temperaturas que podría ser empleada en la construcción

de un móvil perpetuo de segunda especie, lo cual, como sabemos, es imposible³. Las magnitudes R_ν y ρ_ν son, por tanto, funciones universales, dependientes únicamente de la frecuencia y de la temperatura absoluta.

Finalmente, si integramos la ecuación [1.2.4] para todas las frecuencias, tendremos

$$R(T) = \int_0^\infty R_\nu(T) d\nu = \frac{c}{4} \int_0^\infty \rho_\nu(T) d\nu = \frac{c}{4} \rho(T) \quad [1.2.5]$$

que expresa la relación de proporcionalidad extremadamente simple que existe entre la emitancia total $R(T)$ emitida por una cavidad que se comporta como cuerpo negro y la densidad de energía electromagnética $\rho(T)$ en su interior.

1.3. MODELOS EXPERIMENTALES DE CUERPO NEGRO

Aunque a finales del siglo pasado, en 1899, aún no se conocía la expresión analítica exacta de $R_\nu(T)$, sin embargo, las medidas precisas de O. Lummer y E. Pringsheim mostraron la forma de esta función. En la figura 1.3 se ha representado la emitancia espectral de un cuerpo negro en función de la frecuencia para diferentes valores de la temperatura.

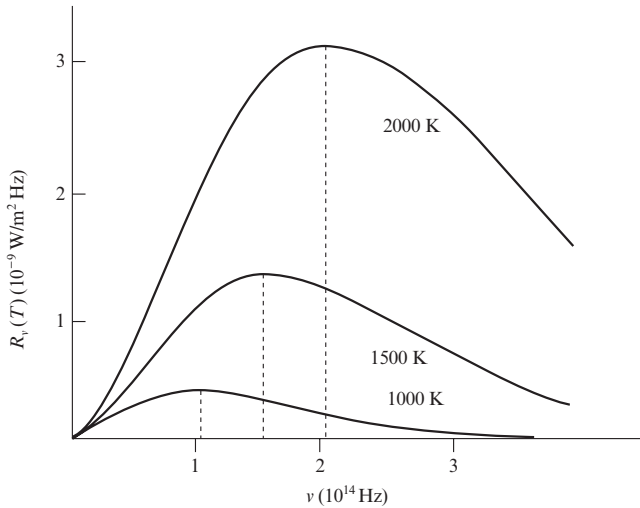


Figura 1.3. Emitancia espectral del cuerpo negro. Obsérvese que los máximos de radiación se desplazan hacia las altas frecuencias conforme aumentamos la temperatura. Al mismo tiempo, la radiancia total (área bajo las curvas) aumenta muy rápidamente con T .

³ En 1850, Clausius enunció el segundo principio de la termodinámica en la siguiente forma: es imposible construir una máquina que transporte calor de una temperatura baja a otra alta sin consumir trabajo exterior. Una máquina de funcionamiento periódico que hiciera esto suele denominarse móvil perpetuo de segunda especie: su existencia violaría el segundo principio.

El modelo de cuerpo negro utilizado por Lummer y Pringsheim está esquematizado en la figura 1.4. Esencialmente, está formado por un recipiente metálico de dobles paredes. El espacio entre las paredes sirve para mantener una temperatura uniforme prefijada mediante el tránsito de vapor de agua o, para bajas temperaturas, llenándolo, por ejemplo, con aire líquido.

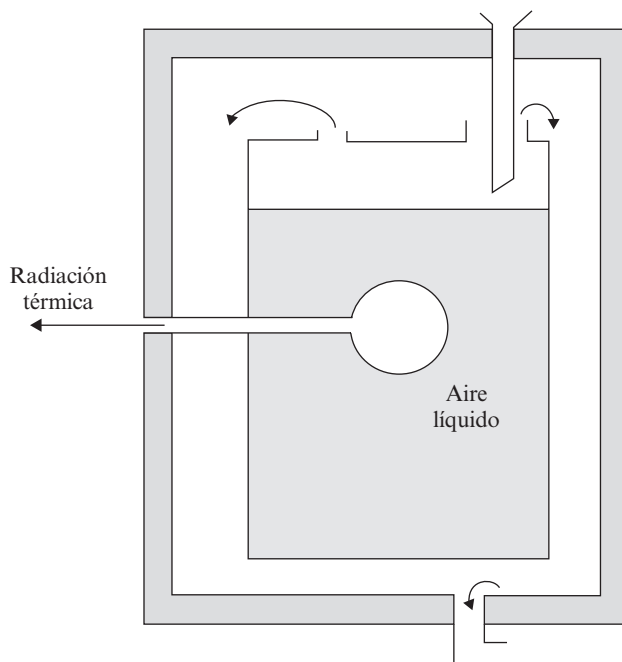


Figura 1.4. Esquema simplificado del modelo experimental de cuerpo negro empleado por Lummer y Pringsheim. Las flechas indican la circulación del aire gaseoso.

Precisamente la consecución de una temperatura estable y uniforme es una de las principales dificultades de tipo práctico con que nos enfrentamos al tratar de diseñar un modelo experimental de cuerpo negro. Ello exige emplear diferentes modelos dependiendo del rango de temperaturas considerado. Como ejemplo, la figura 1.5 muestra un posible esquema de cuerpo negro utilizado en el estudio de la radiación térmica emitida a temperaturas altas. El cilindro interior de porcelana se calienta de forma estable haciendo pasar una corriente eléctrica a través del cilindro exterior de platino. La temperatura se mide mediante un termopar P y los diafragmas d_1, d_2, d_3, \dots , sirven para evitar el enfriamiento debido al aire que penetra desde el exterior.

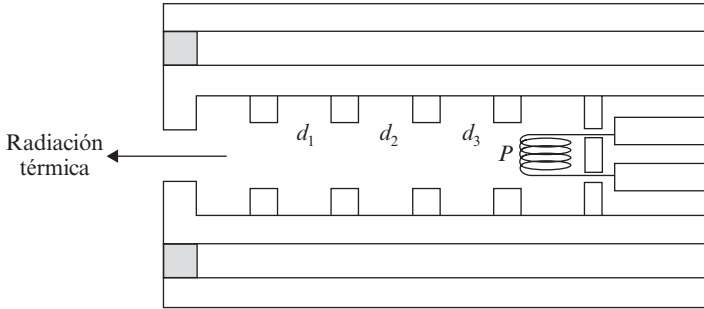


Figura 1.5. Esquema simplificado de un modelo experimental de cuerpo negro empleado para temperaturas elevadas.

1.4. LEYES DE RADIACIÓN DEL CUERPO NEGRO

De la ley de Kirchhoff y de la relación [1.2.4] se desprendía que la densidad espectral de energía, ρ_ν , era una cierta función universal de la frecuencia y de la temperatura. Sin embargo, hasta ahora nada hemos dicho acerca de la forma concreta de dicha función. Por este motivo, encontrar la expresión correcta de ρ_ν a finales del siglo pasado se convirtió en uno de los más importantes problemas no resueltos. En 1893, W. Wien había probado, empleando argumentos termodinámicos rigurosos, que ρ_ν debería poder escribirse en la forma

$$\rho_\nu(T) \equiv \rho(\nu, T) = \nu^3 f(\nu/T) \quad [1.4.1]$$

donde, desgraciadamente, la función $f(\nu/T)$ no se deducía explícitamente. No obstante, a pesar de este serio inconveniente, la fórmula de Wien permite establecer algunas consecuencias fundamentales.

Si se dispone (por ejemplo, experimentalmente) de la densidad de energía para una cierta temperatura T_1 , mediante la fórmula de Wien podemos determinar la función $\rho(\nu, T)$ para cualquier otra temperatura. Se obtiene (véase ejercicio 1.2)

$$\rho(\nu_2, T_2) = \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^3 \rho(\nu_1, T_1) \quad [1.4.2]$$

con $\nu_2 = T_2 \nu_1 / T_1$. En otras palabras, basta multiplicar por el factor $(T_2/T_1)^3$ para hallar la densidad espectral correspondiente a la nueva temperatura T_2 .

Por otro lado, integrando en frecuencias la relación [1.4.1] se tiene

$$\rho(T) = \int_0^\infty \rho(\nu, T) d\nu = \int_0^\infty \nu^3 f(\nu/T) d\nu \quad [1.4.3]$$

que se convierte, haciendo uso del cambio de variables $\alpha = \nu/T$, en

$$\rho(T) = T^4 \int_0^{\infty} \alpha^3 f(\alpha) d\alpha \quad [1.4.4]$$

La integral que aparece en [1.4.4] es un número que designaremos por a , con lo que obtendremos finalmente

$$R(T) = \frac{c}{4} \rho(T) = \sigma T^4 \quad , \quad \sigma = ac/4 \quad [1.4.5]$$

que es la bien conocida *ley de Stefan-Boltzmann*, enunciada por primera vez en 1879. La constante σ es la denominada constante de Stefan-Boltzmann, y su valor resulta ser

$$\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4 \quad [1.4.6]$$

La ecuación [1.4.5] nos indica que la cantidad total de energía radiada por un cuerpo negro en equilibrio térmico aumenta con la cuarta potencia de su temperatura absoluta.

En determinadas ocasiones resulta cómodo expresar la densidad espectral en función de la longitud de onda λ de la radiación, en lugar de hacerlo como hasta ahora en función de la frecuencia ν . Pero para ello es necesario tener presente que la densidad de energía en el intervalo de frecuencias ν , $\nu + d\nu$ vale $\rho(\nu, T)d\nu$ [y no simplemente $\rho(\nu, T)$], por lo que esa misma energía en el intervalo de longitudes de onda equivalente se escribirá $\tilde{\rho}(\lambda, T)d\lambda$, es decir,

$$\rho(\nu, T)d\nu = \tilde{\rho}(\lambda, T)d\lambda \quad [1.4.7]$$

Como $\nu = c/\lambda$, se tendrá

$$|d\nu| = \frac{c}{\lambda^2} d\lambda \quad [1.4.8]$$

y aplicando la fórmula de Wien se llega a la expresión

$$\tilde{\rho}(\lambda, T)d\lambda = \rho(\nu, T)d\nu = \nu^3 f(\nu/T)d\nu = \frac{c^4}{\lambda^5} f(c/\lambda T)d\lambda \quad [1.4.9]$$

El máximo de dicha distribución se alcanzará en el punto $\lambda_{\text{máx}}$ para el cual se cumple $d\tilde{\rho}(\lambda, T)/d\lambda = 0$. Imponiendo esta condición a la ecuación [1.4.9] y haciendo el cambio de variables $c/\lambda T \equiv \beta$, se obtiene para $\lambda_{\text{máx}}$

$$\beta f'(\beta) + 5f(\beta) = 0 \quad [1.4.10]$$

donde la prima indica derivación respecto de la nueva variable. La hipotética resolución de esta ecuación permitiría determinar un cierto valor numérico de β que la satisface. Designándole por β_0 y deshaciendo el cambio de variables, nos queda

$$\frac{c}{\lambda_{\text{máx}} T} = \beta_0 \quad [1.4.11]$$

lo que implica

$$\lambda_{\text{máx}} T = \text{constante} \quad [1.4.12]$$

que expresa la conocida *ley de desplazamiento de Wien*. En la figura 1.3 se comprueba que el máximo de las curvas se desplaza hacia las longitudes de onda más cortas (mayores frecuencias) conforme T aumenta. El valor determinado experimentalmente para la constante que aparece en [1.4.12], que llamaremos constante de Wien, es 2.898×10^{-3} m K. A la búsqueda de la función explícita $f(\nu/T)$ que nos proporcionará la expresión analítica exacta de $\rho(\nu/T)$ le fueron dedicados muchos esfuerzos en las postrimerías del pasado siglo. Y aunque, hasta llegar a Planck, el acuerdo con los datos experimentales fue sólo parcial o incluso mostraba fuertes discrepancias, esta búsqueda desempeñó un papel crucial en el posterior establecimiento de la teoría cuántica. Vamos, por ello, a analizar estos pasos con cierto detalle.

1.5. FÓRMULA DE RAYLEIGH-JEANS

La teoría cinética clásica considera la temperatura de un gas como una medida de la energía promedio de las moléculas que lo integran. Esto se desprende del llamado teorema de equipartición de la energía, el cual asigna a cada grado de libertad de una molécula una energía cinética promedio igual a $1/2 k_B T$, donde k_B es la llamada constante de Boltzmann⁴ ($k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ julios/K). Este resultado se justifica en mecánica estadística y es válido para sistemas en equilibrio termodinámico. Aunque acabamos de enunciarlo para moléculas de gas, este teorema clásico es también aplicable a un sistema de entes idénticos en equilibrio.

Fue precisamente Rayleigh el primero en usar el teorema de equipartición en el cálculo de la densidad de energía electromagnética en el interior de una cavidad cerrada. Téngase en cuenta al respecto que, como consecuencia de su temperatura, las paredes de la cavidad emitirán radiación térmica, la cual se reflejará sobre las mismas. Según veremos en breve, el campo electromagnético dentro de la cavidad puede descomponerse formalmente en ondas estacionarias de diferentes frecuencia, dirección y polarización. Son precisamente tales ondas los entes a que hacíamos alusión más arriba. Cuando se alcanza el equilibrio térmico entre la radiación y las paredes de la cavidad, la aplicación del teorema de equipartición nos da para la energía media asociada a cada una de las ondas estacionarias (modos de radiación) un valor igual a $k_B T$, que resulta de la suma de las energías promedio correspondientes a los campos eléctrico y magnético, cada una de ellas igual a $1/2 k_B T$. Recuérdese en este sentido que la energía promedio de un oscilador armónico

⁴ La constante k_B está relacionada con la constante R de los gases perfectos y con el número de Avogrado N_A mediante la relación $k_B = R/N_A$.

(igual a $k_B T$) es la suma de la energía cinética media ($1/2 k_B T$) y la energía potencial media ($1/2 k_B T$) de dicho oscilador.

La densidad espectral de energía $\rho(\nu, T)$ de la radiación se obtendrá, por tanto, multiplicando la cantidad $k_B T$ por el número de modos por unidad de volumen, N_ν , en el intervalo de frecuencias $\nu, \nu + d\nu$ contenidos en la cavidad. Este cálculo fue finalizado por Jeans a partir del procedimiento señalado por Rayleigh, por eso la expresión resultante se denominó fórmula de Rayleigh-Jeans. Vamos, pues, a determinar el número de modos de la radiación.

Como, según vimos, la función $\rho(\nu, T)$ es independiente de la forma y naturaleza de las paredes de la cavidad, por comodidad elegiremos una cavidad con forma de paralelepípedo de paredes metálicas perfectamente conductoras (véase figura 1.6).

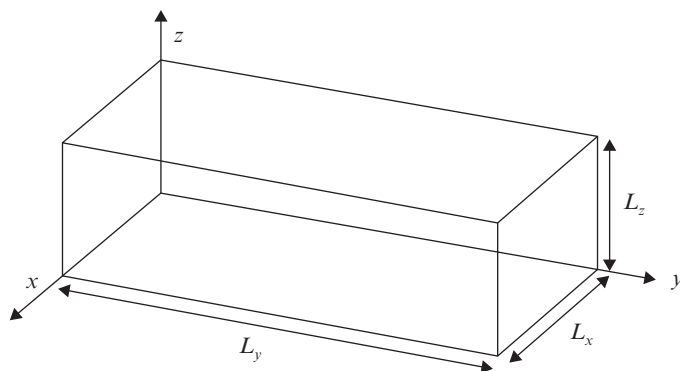


Figura 1.6. Diagrama ilustrativo de la cavidad elegida para el cálculo del número de modos de radiación. Las paredes son paralelas a los ejes de coordenadas, y sobre ellas las ondas se anulan.

El vector campo eléctrico E dentro de dicha cavidad verificará la ecuación de ondas en el vacío. Si consideramos, por ejemplo, su componente según el eje x , podremos escribir, por tanto,

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2} \quad [1.5.1]$$

siendo c la velocidad de la luz en el vacío.

Para resolver [1.5.1] haremos uso del método de separación de variables, ensayando una solución de la forma

$$E_x = X(x)Y(y)Z(z)T(t) \quad [1.5.2]$$

Sustituyendo [1.5.2] en [1.5.1], y dividiendo entre E_x , nos queda

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} + \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = \frac{1}{c^2 T} \frac{d^2 T}{dt^2} \quad [1.5.3]$$

en donde se han escrito derivadas totales en lugar de parciales debido a que cada una de las funciones X , Y , Z y T depende de una sola variable. Ahora bien, el miembro de la izquierda en [1.5.3] depende de variables espaciales, mientras que el de la derecha es función solamente del tiempo. La única forma de hacer compatible ambas situaciones es igualar ambos miembros a una constante, que designaremos por conveniencia $-k^2$. La expresión [1.5.3] se dividirá, pues, en las dos ecuaciones siguientes:

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = -k^2 - \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} \quad [1.5.4.a]$$

$$\frac{1}{c^2 T} \frac{d^2 T}{dt^2} = -k^2 \quad [1.5.4.b]$$

Si observamos ahora la ecuación [1.5.4.a], vemos que de nuevo el miembro de la izquierda depende de variables distintas que el de la derecha, por lo que podemos repetir el mismo razonamiento que antes, y así sucesivamente hasta obtener el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = -k_x^2 \quad [1.5.5.a]$$

$$\frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = -k_y^2 \quad [1.5.5.b]$$

$$\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -k_z^2 \quad [1.5.5.c]$$

$$\frac{1}{c^2 T} \frac{d^2 T}{dt^2} = -k^2 \quad [1.5.5.d]$$

donde k_x , k_y y k_z son constantes ligadas por la condición

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \quad [1.5.6]$$

La resolución de [1.5.5.d] proporciona la dependencia temporal de E_x ⁵:

$$T(t) = A \text{ sen } (kct) = A \text{ sen } \omega t \quad [1.5.7]$$

donde hemos hecho $\omega = ck$ y A es un número arbitrario. A la vista de [1.5.7] se deduce que la constante ω representa la frecuencia angular de la onda solución de [1.5.5.d], y, por tan-

⁵ También podíamos haber tomado como solución de [1.5.5.d] una de tipo cosenoidal $T = A \cos \omega t$. Tal elección es irrelevante con respecto a la dependencia temporal, pero no ocurre así si se considera la dependencia espacial, como se pondrá de manifiesto a continuación.

to, del vector campo eléctrico \mathbf{E} , ya que la ecuación [1.5.5.d] es la misma para las otras dos componentes E_y y E_z . La constante k representará el número de onda asociado, verificándose las relaciones bien conocidas $\omega = 2\pi\nu$ y $k = 2\pi/\lambda$, donde ν y λ denotan, respectivamente, la frecuencia y la longitud de onda del modo de radiación que estamos considerando.

Por otro lado, cuando un campo eléctrico incide sobre una pared metálica vibrando paralelamente a su superficie, se genera un movimiento de cargas que lo neutraliza, anulándolo. Esto equivale a decir que, en todo instante, sobre los planos $y = 0$, $y = L_y$, $z = 0$ y $z = L_z$, el campo E_x debe valer cero. Esta restricción obliga a que, de entre las dos soluciones en principio posibles (senoidal o cosenoidal) de las ecuaciones [1.5.5.b] y [1.5.5.c], podamos aceptar únicamente las de tipo senoidal. Un razonamiento similar puede aplicarse a las otras dos componentes E_y y E_z . Por otra parte, dado que el interior de la cavidad es una región libre de corrientes y cargas, el campo eléctrico \mathbf{E} deberá satisfacer la ecuación⁶:

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \quad [1.5.8]$$

Haciendo uso de la ecuación anterior y teniendo en cuenta la anulación sobre las paredes de la cavidad de las correspondientes componentes tangenciales, se obtienen, finalmente, las siguientes expresiones para las *ondas estacionarias* que representan los *modos de radiación*:

$$E_x = E_{0x} \cos k_x x \sin k_y y \sin k_z z \sin \omega t \quad [1.5.9.a]$$

$$E_y = E_{0y} \sin k_x x \cos k_y y \sin k_z z \sin \omega t \quad [1.5.9.b]$$

$$E_z = E_{0z} \sin k_x x \sin k_y y \cos k_z z \sin \omega t \quad [1.5.9.c]$$

cumpliéndose además (según se desprende de las condiciones de anulación)

$$k_x = \frac{n_x \pi}{L_x} ; \quad k_y = \frac{n_y \pi}{L_y} ; \quad k_z = \frac{n_z \pi}{L_z} \quad [1.5.10]$$

donde n_x , n_y y n_z son números enteros no negativos. En las ecuaciones [1.5.9] E_{0x} , E_{0y} y E_{0z} son constantes que satisfacen, según se desprende de [1.5.8], la condición de transversalidad $\mathbf{E}_0 \times \mathbf{k} = 0$, siendo $\mathbf{E}_0 = (E_{0x}, E_{0y}, E_{0z})$ y $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$. El vector \mathbf{E}_0 expresa, de hecho, una de las características fundamentales de la radiación electromagnética como es la *polarización*.

De todo lo anterior se deriva una consecuencia fundamental: cada uno de los modos de radiación existentes en la cavidad lleva asociado una triada n_x, n_y, n_z . Por otra parte, la relación [1.5.6] puede escribirse en la forma

$$\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} = \frac{4}{\lambda^2} = \frac{4\nu^2}{c^2} \quad [1.5.11]$$

⁶ Se trata de una de las ecuaciones fundamentales del electromagnetismo, conocidas universalmente como ecuaciones de Maxwell, en honor al físico británico que las estableció.

En otras palabras, las frecuencias permitidas de los modos de radiación son aquellas que obedecen la igualdad anterior. Volviendo a nuestro problema de recuento, tendremos que determinar el número de modos *diferentes* que existen en la cavidad en el intervalo de frecuencias ν , $\nu + d\nu$. Tal número deberá obtenerse de las ecuaciones [1.5.9] teniendo en cuenta las posibles combinaciones de los números n_x , n_y y n_z compatibles con [1.5.11], así como las diferentes polarizaciones del campo (expresadas por E_{0x} , E_{0y} y E_{0z}). Ahora bien, es un hecho conocido en Óptica que a cada dirección de propagación únicamente pueden asociarse *dos* polarizaciones *independientes* (ortogonales). Consideremos entonces la figura 1.7, en la cual hemos representado la ecuación [1.5.11] tomando los valores de n_x , n_y y n_z como coordenadas de cada modo según tres ejes cartesianos. Fijado ν , la ecuación [1.5.11] es la ecuación de un elipsoide con semiejes $2\nu L_x/c$, $2\nu L_y/c$ y $2\nu L_z/c$. El volumen de un octante de dicho elipsoide (correspondiente a los valores no negativos de n_x , n_y y n_z) valdrá, en consecuencia,

$$\frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2\nu L_x}{c} \right) \left(\frac{2\nu L_y}{c} \right) \left(\frac{2\nu L_z}{c} \right) = \frac{4\pi\nu^3}{3c^3} V \quad [1.5.12]$$

siendo V el volumen total de la cavidad. Pero el volumen dado por [1.5.12] (a falta de un factor 2 que tenga en cuenta las dos polarizaciones independientes asociadas a cada triada n_x , n_y y n_z del interior del elipsoide) nos proporciona justamente el número de modos de la cavidad con frecuencias menores que la ν dada, ya que a cada cubo de lado unidad le corresponde precisamente un modo. En consecuencia, el número total de ondas estacionarias con frecuencias inferiores a ν será el doble que el dado por [1.5.12], es decir,

$$\frac{8\pi\nu^3}{3c^3} V \quad [1.5.13]$$

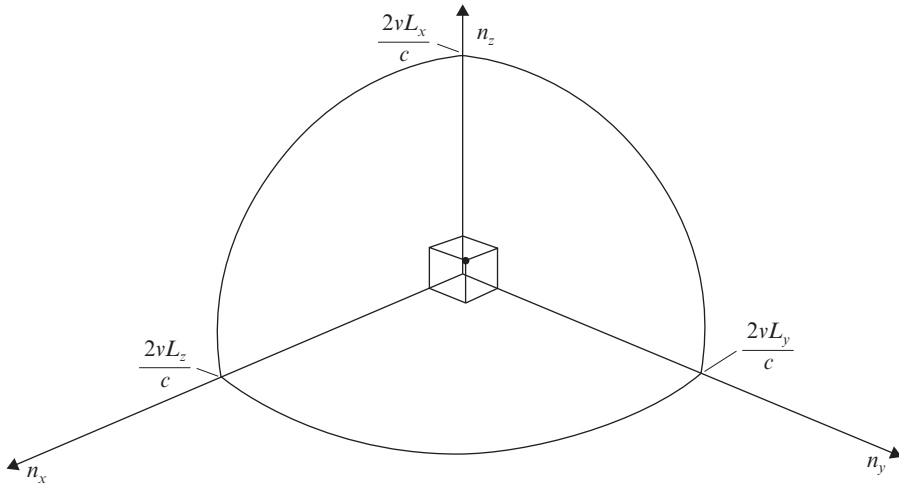


Figura 1.7. Representación de un octante del elipsoide dado por [1.5.11]. El punto señalado en el vértice del cubo de lado unidad tiene de coordenadas $n_x = n_y = n_z = 1$.

Como estamos interesados en determinar cuántos modos por unidad de volumen se encuentran en el intervalo de frecuencias ν , $\nu + d\nu$, bastará diferenciar [1.5.13] respecto de ν y dividir entre el volumen total V , obteniéndose para N_ν

$$N_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{3c^3} \quad [1.5.14]$$

Por tanto, la densidad espectral de energía $\rho(\nu, T)$ de la radiación en equilibrio térmico con las paredes de una cavidad valdrá

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T \quad [1.5.15]$$

que constituye la *fórmula de Rayleigh-Jeans* para la distribución espectral de energía del cuerpo negro. Aunque a bajas frecuencias dicha expresión guarda un buen acuerdo con los experimentos, sin embargo, la dependencia cuadrática con la frecuencia predice una cada vez mayor cantidad de energía radiada conforme aumentamos la frecuencia. Esto comportaría, por ejemplo, que seríamos abrasados por la radiación de rayos X emitida por cualquier horno o pedazo de hierro incandescente, lo cual, evidentemente, no ocurre (véase figura 1.8). El anterior resultado, en flagrante contradicción con lo observado, fue denominado por uno de los padres de la teoría cuántica, P. S. Ehrenfest, la «catástrofe ultravioleta» de la teoría clásica de la radiación, en alusión a la enorme divergencia entre las curvas de la figura 1.8 para frecuencias en el rango del ultravioleta y superiores. La física clásica, por tanto, resultó incapaz de proporcionar una explicación rigurosa o incluso cualitativa del espectro de radiación del cuerpo negro, y la determinación de la forma explícita de la función $f(\nu/T)$ de la ley de Wien siguió siendo un problema abierto. Es interesante señalar, finalmente, que la fórmula de Rayleigh-Jeans puede también obtenerse, salvo constante de proporcionalidad, mediante análisis dimensional (véase ejercicio 1.3).

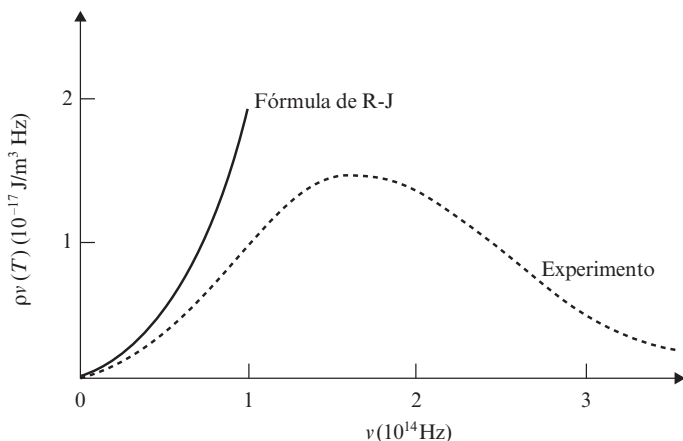


Figura 1.8. Comparación de las predicciones de la fórmula de Rayleigh-Jeans con los resultados experimentales: catástrofe ultravioleta.

1.6. FÓRMULA DE PLANCK

En 1896, Wien propuso una expresión de tipo exponencial para la función $f(\nu/T)$:

$$f(\nu/T) = \alpha e^{-\beta\nu/T} \quad [1.6.1]$$

donde α y β eran constantes independientes de ν a ajustar con los datos experimentales. La ecuación [1.6.1] fue deducida por Wien admitiendo que la distribución espectral de la radiación del cuerpo negro era análoga a la distribución de Maxwell para las velocidades de las moléculas de un gas. Aunque la concordancia de [1.6.1] con los experimentos era buena para frecuencias elevadas, sin embargo, las discrepancias se hacían evidentes en el resto del espectro. Fue Planck quien, en 1900, dio el paso decisivo en la obtención de la fórmula correcta de $f(\nu/T)$.

En su modelo de cuerpo negro, Planck asimiló los átomos que constituían las paredes de la cavidad a cargas moviéndose como osciladores lineales, los cuales interactuaban intercambiando energía con la radiación térmica existente en el interior de dicha cavidad. Esto encajaba perfectamente con la electrodinámica clásica y la teoría de la emisión y absorción de radiación por dipolos oscilantes desarrollada por Hertz. De hecho, igualando las tasas de emisión y absorción de los osciladores elementales de Planck, éste dedujo la siguiente expresión para $\rho(\nu, T)$:

$$\rho(\nu/T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} E(\nu, T) \quad [1.6.2]$$

donde $E(\nu, T)$ representa la energía promedio de tales osciladores. Es importante señalar aquí que, en la situación que estamos considerando de equilibrio térmico entre la radiación y las paredes de la cavidad que la contiene, la frecuencia que aparece en [1.6.2] posee un doble significado físico: por un lado, puede interpretarse como la frecuencia de vibración de los osciladores de la pared, y por otro como la frecuencia correspondiente a uno de los modos de radiación. En este sentido téngase en cuenta que *el concepto generalizado de oscilador (monodimensional) se refiere a cualquier sistema físico cuya coordenada generalizada sea una función sinusoidal del tiempo*⁷.

Obsérvese también que el coeficiente que multiplica a $E(\nu, T)$ en [1.6.2] es el mismo que el deducido por Rayleigh-Jeans para el número de modos N_ν (véase [1.5.14]), el cual fue obtenido mediante argumentos generales de tipo geométrico. Esto refuerza, por tanto, la impresión de que el valor obtenido para dicho recuento es el correcto.

Basándose en ecuaciones fundamentales de la Termodinámica, y haciendo uso de la fórmula [1.6.1], Planck comprobó que se cumplían las siguientes relaciones en los casos límites de las altas y bajas frecuencias:

⁷ Por coordenada generalizada se entiende cualquier magnitud capaz de describir la situación instantánea del oscilador. Así, la distancia a la posición de equilibrio en el caso de un muelle, el ángulo de giro si se trata de un péndulo, o la amplitud del campo eléctrico en el caso de un modo de radiación, son ejemplos de coordenadas generalizadas correspondientes a sistemas equivalentes oscilatorio-armónicos.

$$\frac{d^2S}{dE^2} \propto 1/E \quad , \quad (\text{altas frecuencias}) \quad [1.6.3.a]$$

$$\frac{d^2S}{dE^2} \propto 1/E^2 \quad , \quad (\text{bajas frecuencias}) \quad [1.6.3.b]$$

donde el símbolo \propto significa proporcionalidad, y S denota la entropía de los supuestos osciladores.

El concepto de entropía fue introducido por Clausius en 1865. Se trata de una magnitud característica del estado del sistema cuyo valor depende de las variables que especifican dicho estado (presión, volumen, composición, etc.). En Termodinámica de los procesos reversibles se define en forma infinitesimal como $dS = dQ/T$, donde dQ denota la variación de calor involucrada en el proceso. En una transformación irreversible, sin embargo, siempre se cumple $dS > dQ/T$. Una consecuencia fundamental de esta desigualdad se deduce al considerar sistemas aislados térmicamente. En ellos $dQ = 0$, lo que implica $dS > 0$, es decir, la entropía aumenta por el mero hecho de haberse efectuado la transformación. La entropía representa, pues, el «contenido de transformación» de un cuerpo. De hecho, del segundo principio de la termodinámica se desprende que las transformaciones en la naturaleza (irreversibles) comportan siempre un aumento de entropía. Dicho aumento puede servir como medida de la pérdida global de orden (o aumento de desorden) que acompaña a los procesos naturales. No profundizaremos más aquí sobre este punto ya que será retomado más adelante.

La idea capital de Planck fue interpolar las fórmulas [1.6.3] reuniéndolas en una sola que resultara aplicable a ambos rangos espectrales a la vez. La expresión propuesta fue

$$\frac{d^2S}{dE^2} = -\frac{1}{E(a + E)} \quad [1.6.4]$$

donde a es una constante independiente de T , pero dependiente de la frecuencia. Imponiendo ahora la compatibilidad de [1.6.4] con el comportamiento de E a bajas frecuencias, en el límite $T \rightarrow \infty$, se llega, tras algunos cálculos, a la expresión

$$E = \frac{a}{e^{a/T} - 1} \quad [1.6.5]$$

y la densidad espectral de energía valdrá

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{a\nu^2}{e^{a/T} - 1} \quad [1.6.6]$$

Finalmente, imponiendo la ley de Wien [1.4.1], se encuentra que a debe depender linealmente de la frecuencia, es decir, $a = A\nu$, con lo que tendremos para la función $f(\nu, T)$ buscada

$$f(\nu, T) = \frac{1}{e^{A\nu/T} - 1} \quad [1.6.7]$$

El acuerdo de esta fórmula⁸, con los precisos datos experimentales obtenidos en 1900 por Rubens y Kurlbaum, fue completo. Desde entonces, todas las comprobaciones experimentales posteriores confirmaron la extraordinaria bondad de la ecuación [1.6.7]. Sin embargo, no por ello dejaba de ser una fórmula empírica, determinada mediante tanteo. Era preciso, pues, encontrar los fundamentos teóricos que permitieran su deducción rigurosa. De ello nos ocuparemos a continuación.

1.7. TEORÍA DE PLANCK DEL CUERPO NEGRO: DEDUCCIÓN DE LA FÓRMULA DE PLANCK

En su deducción de la función $\rho(\nu, T)$ Planck abandonó la termodinámica y se apoyó en la interpretación estadística del concepto de entropía, que había sido introducida por Boltzmann años atrás. Su argumentación puede resumirse como sigue (para más detalles, el lector interesado puede consultar, por ejemplo, el libro de Cropper citado en la bibliografía).

Supongamos que las paredes de la cavidad que conforma el cuerpo negro contienen N osciladores cuyas energía promedio y entropía promedio son, respectivamente, E y S . En tal caso, la energía y la entropía totales, E_T y S_T , del conjunto de osciladores, esto es, de las paredes de la cavidad, valdrán⁹

$$E_T = NE \quad [1.7.1.a]$$

$$S_T = NS \quad [1.7.1.b]$$

Por otro lado, de acuerdo con el formalismo estadístico de Boltzmann, S_T puede escribirse como¹⁰

$$S_T = k_B \ln W \quad [1.7.2]$$

donde W es una cierta función probabilística que mide el número de formas en que la energía total del sistema de osciladores, supuesta fija, puede distribuirse energéticamente entre los osciladores individuales.

Conviene distinguir entre estado macroscópico y estado microscópico de un cuerpo o sistema. El primero está determinado por variables termodinámicas como son su temperatura, volumen, energía interna, etc. Tales parámetros caracterizan al sistema de forma global, macroscópica. El estado microscópico se refiere al conjunto de situaciones dinámicas de cada uno de los elementos que integran el cuerpo (átomo, molécula, iones, etc.). A un mismo estado macros-

⁸ Para un valor concreto de A obtenido por ajuste.

⁹ Recuérdese que la entropía, al igual que la energía, la masa o la carga eléctrica, entre otras, es una variable extensiva, es decir, es aditiva respecto de las partes de un sistema. Otras magnitudes como la temperatura o la densidad no gozan de esta propiedad, y suelen denominarse intensivas.

¹⁰ El símbolo «ln» significa logaritmo neperiano.

cópico le puede corresponder, evidentemente, un gran número de situaciones microscópicas diferentes. A este número le hemos designado por W en la ecuación [1.7.2]. Si admitimos entonces que todos los estados microscópicos asociados a un cierto estado macroscópico son igualmente probables, entonces la cantidad adimensional W es un índice de la probabilidad relativa de ocurrencia del mencionado estado macroscópico respecto del resto de estados macroscópicos posibles. En otras palabras, cuanto mayor sea el número de combinaciones de estados microscópicos que dan lugar a un cierto estado macroscópico, tanto más probable será éste.

Basándonos en lo anterior, puede enunciarse la hipótesis fundamental de la mecánica estadística, a saber, que todo sistema evoluciona espontáneamente hacia el estado en el cual W es máxima. A partir de este principio no es difícil inferir que la W máxima se alcanza en los estados macroscópicos correspondientes al equilibrio. Por otro lado, es bien conocido en termodinámica que la entropía siempre aumenta en las transformaciones naturales, siendo máxima en la situación de equilibrio. De ambos hechos parece desprenderse la consecuencia de que la entropía S y la probabilidad W deben guardar una estrecha relación. A fin de establecer esta conexión consideremos dos sistemas con entropías, S_1 y S_2 . Recordando que S es una magnitud extensiva, la entropía del conjunto será entonces $S_1 + S_2$. Al mismo tiempo, es bien sabido que la probabilidad de ocurrencia conjunta W de dos sucesos independientes viene dada por el producto de las probabilidades de ocurrencia de cada uno de ellos por separado W_1 y W_2 . Esto equivale en nuestro caso a afirmar que $W = W_1 W_2$. Si escribimos $S = f(W)$, la función f deberá satisfacer la ecuación $f(W_1 W_2) = f(W_1) + f(W_2)$; por tanto, debe ser de tipo logarítmico en W . Fue Boltzmann quien, en 1877, planteó esta relación entre la entropía y la función de probabilidad en la forma mostrada en la ecuación [1.7.2]. Un aumento de ambas magnitudes indicará, por tanto, un mayor grado de desorden. Es importante señalar, finalmente, que la ecuación [1.7.2] constituye de hecho el nexo de unión entre los sistemas macroscópicos y el mundo atómico subyacente. Una consecuencia fundamental de esto se halla en la deducción de la fórmula de Planck que habíamos comenzado a analizar.

Para distribuir de forma fácilmente evaluable la energía total entre los osciladores, supondremos, al menos en principio, que E_T es un múltiplo de una cantidad *discreta* de energía que designaremos por ε . Una vez efectuado el recuento de las posibles distribuciones, tomaremos el límite cuando ε tiende a cero. Escribiremos, pues,

$$E_T = n\varepsilon \tag{1.7.3}$$

Como el número de osciladores es N , el cálculo de W es equivalente a la determinación del número de formas de distribuir n unidades indivisibles de energía entre los N osciladores. Podemos representar simbólicamente esta situación asociando los osciladores a compartimentos, cada uno de los cuales ocupado por un cierto número de unidades de energía. En la figura 1.9 se muestra a modo de ejemplo el caso $N = 4$, $n = 10$. En ella la separación entre los distintos compartimentos se representa mediante barras verticales. Para $N = 4$ el número de tales barras será $N - 1 = 3$.



Figura 1.9. Representación simbólica de una de las distribuciones posibles de 10 unidades de energía (pequeños círculos) en 4 osciladores (compartimentos separados por barras verticales).

A la vista de la figura 1.9 se infiere que, fijada E_T , y por tanto n , el número de formas de distribuir n círculos en los N compartimentos será justamente igual al número total de permutaciones de los $(N - 1) + n$ objetos (barras + círculos), es decir,

$$(N + n - 1)! \quad [1.7.4]$$

Ahora bien, los círculos que simbolizan las unidades de energía son idénticos entre sí, al igual que ocurre con las barras, por lo que, de acuerdo con la teoría de probabilidades, el número dado por [1.7.4] habrá que dividirlo entre el número de permutaciones de los círculos entre sí, multiplicado por el número de permutaciones de las barras, y nos quedará

$$\frac{(N + n - 1)!}{n!(N - 1)!} \quad [1.7.5]$$

que nos dará la función W buscada. Dado que los números N y n son enormemente grandes, podemos sustituir la expresión anterior por la ecuación

$$W = \frac{(N + n)!}{n! N!} \quad [1.7.6]$$

y teniendo en cuenta la fórmula de Stirling¹¹

$$\ln(x!) \approx x \ln x - x \quad [1.7.7]$$

válida para $x \gg 1$, obtenemos para S_T , a partir de [1.7.2]:

$$\begin{aligned} S_T &= k_B \ln W = k_B [(N + n) \ln(N + n) - n \ln(n) - N \ln N] = \\ &= Nk_B \left\{ \left(1 + \frac{n}{N}\right) \ln \left[N \left(1 + \frac{n}{N}\right) \right] - \left(\frac{n}{N}\right) \ln(n) - \ln N \right\} = \\ &= Nk_B \left[\left(1 + \frac{n}{N}\right) \ln \left(1 + \frac{n}{N}\right) - \left(\frac{n}{N}\right) \ln \left(\frac{n}{N}\right) \right] = \\ &= Nk_B \left[\left(1 + \frac{E}{\varepsilon}\right) \ln \left(1 + \frac{E}{\varepsilon}\right) - \left(\frac{E}{\varepsilon}\right) \ln \left(\frac{E}{\varepsilon}\right) \right] \end{aligned} \quad [1.7.8]$$

¹¹ Un desarrollo asintótico de $\ln(x!)$ es

$$\ln x! = x \ln x - x + \ln \sqrt{2\pi x} + \ln \left(1 + \frac{1}{12x} + \frac{1}{288x^2} - \dots\right)$$

Cuando $x \gg 1$, nos queda la fórmula de Stirling.

En la última igualdad de [1.7.8] hemos hecho uso de la relación

$$E_T = NE = n\varepsilon \quad [1.7.9]$$

deducida igualando [1.7.1.a] y [1.7.3]. De [1.7.1.b] se tendrá para la entropía promedio de un oscilador

$$S = k_B \left[\left(1 + \frac{E}{\varepsilon} \right) \ln \left(1 + \frac{E}{\varepsilon} \right) - \left(\frac{E}{\varepsilon} \right) \ln \left(\frac{E}{\varepsilon} \right) \right] \quad [1.7.10]$$

Ahora bien, en el equilibrio se cumple la ecuación termodinámica fundamental (a volumen constante)¹²

$$\frac{dS}{dE} = \frac{1}{T} \quad [1.7.11]$$

que aplicada a [1.7.10] nos da¹³

$$\frac{dS}{dE} = \left(\frac{k_B}{\varepsilon} \right) \ln \left[\left(1 + \frac{E}{\varepsilon} \right) / \left(\frac{E}{\varepsilon} \right) \right] = \frac{1}{T} \quad [1.7.12]$$

Despejando la energía promedio E de la expresión anterior nos queda

$$E(v, T) = \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/k_B T} - 1} \quad [1.7.13]$$

Conviene hacer notar aquí que, aunque la ecuación [1.7.13] se ha deducido en la hipótesis de que las paredes de la cavidad están constituidas por osciladores armónicos, sin embargo, recordando el argumento termodinámico de Kirchhoff, el valor de la energía promedio E que obtengamos finalmente será correcto con carácter general.

La ecuación [1.7.13] debe ser compatible con la ley de Wien [1.4.1] y con la expresión general [1.6.2], es decir, la energía E debe ser de la forma

$$E(v, T) = \frac{c^3}{8\pi} v f(v/T) \quad [1.7.14]$$

Comparando [1.7.13] y [1.7.14], se infiere

$$\varepsilon \propto v \quad [1.7.15]$$

¹² Volveremos sobre esta ecuación en el capítulo 16.

¹³ Obsérvese que T designa, como siempre, la temperatura de la cavidad, no una temperatura asociada a cada oscilador individual.

que escribiremos en la forma

$$\varepsilon = h\nu \quad [1.7.16]$$

donde h es la llamada constante de Planck, cuyo valor resulta ser $6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$. La expresión anterior constituye la ecuación fundamental que marca el inicio del desarrollo de la teoría cuántica. En ella se pone de manifiesto de forma evidente el carácter discreto de la energía de un sistema físico oscilatorio armónico: En efecto, fijada ν , ε es una cantidad *finita*, y no puede hacerse tender a cero como suponíamos en nuestro planteamiento inicial. En consecuencia, de acuerdo con [1.7.3], cada uno de los osciladores elementales podrá tener a la sumo n unidades indivisibles de energía (*cuantos de energía*) y como mínimo cero. Los valores de la energía que puede poseer un oscilador elemental serán, por tanto,

$$nh\nu \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [1.7.17]$$

Esta cuantificación de la energía de un sistema oscilatorio armónico es igualmente aplicable a cualquier sistema oscilatorio armónico lineal generalizado, es decir, a cualquier sistema físico cuya única coordenada generalizada sea una función sinusoidal del tiempo.

Volviendo a la ecuación [1.7.13], la expresión de la energía promedio $E(\nu, T)$ queda, por tanto, como sigue:

$$E(\nu, T) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad [1.7.18]$$

y la densidad espectral de energía del cuerpo negro toma, finalmente, la forma (recuérdese [1.6.2]):

$$\rho(\nu, T) = \left(\frac{8\pi\nu^2}{c^3} \right) \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad [1.7.19]$$

que es precisamente la fórmula semiempírica obtenida anteriormente por Planck. Naturalmente, su comportamiento a bajas frecuencias sigue la fórmula propuesta por Rayleigh-Jeans (véase ejercicio 1.4). Asimismo, integrando $\rho(\nu, T)$ para todas las frecuencias, resulta la ley de Stefan-Boltzmann, en la cual la constante σ queda expresada ahora en términos de k_B y h (véase ejercicio 1.5). Por otro lado, hallando el máximo de la función $\rho(\nu, T)$, se encuentra la ley de desplazamiento de Wien, cuya constante puede obtenerse explícitamente a partir de los valores de h y k_B (véase ejercicio 1.6).

Es interesante hacer notar que, en el límite $h \rightarrow 0$, la ecuación [1.7.19] se convierte en la ecuación [1.5.15], correcta únicamente para ν bajas, y deducida de acuerdo con el formalismo clásico plasmado en el teorema de equipartición de la energía. La finitud de h conlleva, pues, la inaplicabilidad de dicho teorema (obsérvese que la energía promedio depende de ν), y conduce, como hemos visto, a la discretización (cuantificación) de la energía para cualquier sistema oscilatorio armónico. Ningún oscilador puede, por tanto, absorber

ni emitir energía en un rango continuo, sino únicamente de manera discontinua mediante incrementos de valor $h\nu$, siendo ν la frecuencia de oscilación. Es fácil comprender que esto choca completamente con las ideas tradicionales de la física clásica e incluso con nuestra concepción intuitiva del intercambio energético. La razón de este aparente desacuerdo con el mundo observado estriba en la pequeñez de la constante de Planck en comparación con otras cantidades macroscópicas. Dicho en otras palabras, los efectos de la cuantificación de la energía se harán más evidentes cuando se consideren situaciones físicas que involucren cantidades de energía del orden de $h\nu$. Esto ocurrirá cuando la energía del sistema sea muy pequeña o nos encontremos en el rango de las altas frecuencias, como sucede con el cuerpo negro. En los siguientes capítulos tendremos ocasión de analizar muchos otros ejemplos. No debemos olvidar, no obstante, que el postulado de Planck acerca de la cuantificación de la energía es de validez universal, incluso en situaciones perfectamente macroscópicas. Es especialmente ilustrativo en este sentido el ejercicio 1.7.

Señalemos, para terminar, que el valor concreto de la constante de Planck, h , fue determinado por él mismo a partir de las medidas experimentales de la constante de Stefan-Boltzmann y de la de Wien (véanse ecuaciones [1.4.6] y [1.4.11]). Asimismo, y teniendo en cuenta el valor de la constante R de los gases perfectos, calculó el número de Avogadro ($N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$), e incluso, del valor conocido de la constante de Faraday¹⁴, fue capaz de estimar la carga eléctrica elemental del electrón.

1.8. APLICACIÓN EN TERMOMETRÍA: PIRÓMETRO ÓPTICO

El carácter universal de la distribución espectral de energía radiada por un cuerpo negro hace de éste un buen patrón de referencia en la medida de temperaturas en termometría. La idea básica de un pirómetro óptico consiste en comparar el color de la radiación emitida por un cuerpo negro a temperatura conocida y variable a voluntad con el de otro cuerpo negro cuya temperatura desconocemos. Cuando se produzca la *igualación de colores* podrá concluirse que ambos cuerpos negros se encuentran a la misma temperatura. Este procedimiento, en apariencia muy simple, presenta, no obstante, ciertas dificultades que es necesario tener en cuenta: en la mayoría de los pirómetros ópticos se emplea el ojo humano como detector. Esto restringe su utilización a temperaturas lo bastante elevadas como para emitir dentro del rango visible con suficiente intensidad. Por otro lado, igualdad de colores no implica igualdad de composición espectral, ya que el color está estrechamente relacionado con una sensación visual, la cual depende, entre otros factores, del observador, del entorno visual, etc. Por último, no todos los cuerpos de interés en termometría pueden, evidentemente, ser considerados cuerpos negros ideales, lo que hace que deban incluirse las oportunas correcciones en los métodos de calibración y medida.

Pese a estos inconvenientes, los pirómetros ópticos son de utilidad, y resultan especialmente adecuados en la determinación de la temperatura de hornos. El esquema de un pi-

¹⁴ Se denomina constante de Faraday la cantidad de electricidad necesaria para depositar, en una experiencia de electrolisis, un equivalente gramo (un mol dividido entre la valencia) de sustancia. Su valor es 96.485 culombios.

rómetro de uso frecuente, para temperaturas por encima del punto de fusión del oro ($1068\text{ }^{\circ}\text{C}$), está representado en la figura 1.10. En el plano imagen del objetivo de un ante-ojo situamos una lámpara con filamento de wolframio que se calienta mediante una corriente controlada cuidadosamente a través de un potenciómetro de precisión. La temperatura del filamento estará calibrada, por tanto, en función de la tensión aplicada. La temperatura del horno se determina entonces enfocando la radiación emergente de la boca del horno sobre el plano de la lámpara y variando la corriente aplicada al filamento, de manera que éste desaparezca al confundirse su color con el de la imagen de la boca del horno.

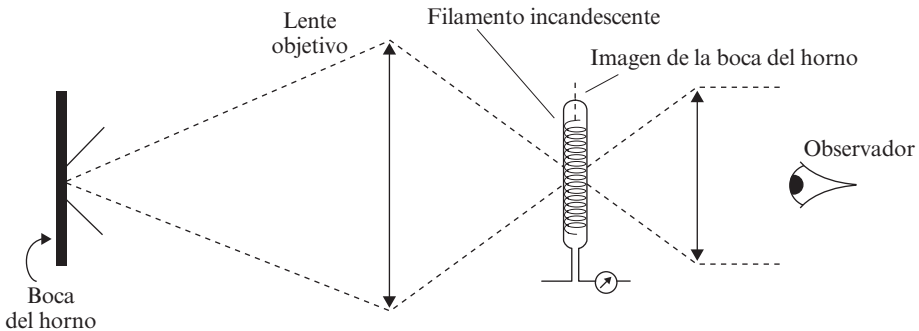


Figura 1.10. Esquema simplificado de un pirómetro óptico.

EJERCICIOS

- 1.1. Hallar la relación entre la emitancia espectral $R_{\nu}(T)$ y la densidad espectral de energía de un cuerpo negro. *Ayuda:* determinar la energía radiada hacia el exterior dentro de un ángulo sólido de 2π (hemisferio) a través de un agujero de área unidad practicado en las paredes de una cavidad en equilibrio térmico.
- 1.2. Supuesta conocida la densidad espectral de energía para una cierta temperatura, determinar, en función de ésta, la densidad espectral para cualquier otra temperatura (ecuación [1.4.2.]).
- 1.3. Obtener la fórmula de Rayleigh-Jeans mediante análisis dimensional. *Ayuda:* considerar que el número de modos dentro de un volumen V en el intervalo de longitudes de onda $\lambda, \lambda + d\lambda$ es proporcional a V y al tamaño de dicho intervalo, $d\lambda$.
- 1.4. Demostrar que la densidad espectral de energía obtenida por Planck (ecuación [1.7.19]) obedece, a bajas frecuencias, la fórmula propuesta por Rayleigh-Jeans.
- 1.5. Obtener el valor de la constante de Stefan-Boltzmann a partir de la fórmula de Planck de la densidad espectral de energía.

1.6. Obtener la ley de desplazamiento de Wien y la constante que en ella aparece a partir de la densidad espectral de energía de Planck.

1.7. Un péndulo constituido por una bola de masa 1 kg suspendida de una cuerda de masa despreciable y 1 m de longitud ejecuta oscilaciones armónicas. Si mediante algún mecanismo (por ejemplo, efectos de fricción) la energía del péndulo se va reduciendo lentamente, ¿cuál es el decrecimiento mínimo que puede sufrir el péndulo en su energía? Compárese con el valor máximo de su energía potencial si el ángulo máximo θ que forma el péndulo con la vertical es $\theta = 10^\circ$.

1.8. Demostrar que si se emplea la ley de Rayleigh-Jeans no puede establecerse una ley equivalente a la de desplazamiento de Wien.

1.9. Suponiendo que el Sol se comportase aproximadamente como un cuerpo negro en equilibrio térmico a una temperatura de 5700 K (supondremos despreciable la pérdida de masa por radiación), determinar la energía total que radia en todas las direcciones anualmente. *Dato:* radio del Sol: $R_S = 6.96 \times 10^8$ m.

1.10. En 1965 se descubrió, mediante un radiotelescopio, que sobre la Tierra, en todas las direcciones y de manera isotrópica, incide un espectro de radiación correspondiente a un cuerpo negro a una temperatura de 2.7 K (esto fue considerado por los astrofísicos como una confirmación indirecta de la teoría de la Gran Explosión). Determinar la longitud de onda para la cual recibimos más energía.

2

Comportamiento corpuscular de la radiación

Pedro M. Mejías

2.1. INTRODUCCIÓN

En el capítulo anterior se introdujo la idea de cuantificación de la energía en relación con sistemas oscilatorio-armónicos. Vimos cómo Planck restringió este concepto al comportamiento de los osciladores materiales. Sin embargo, nada se dijo acerca de la estructura de la propia radiación. En el presente capítulo se examinan algunos de los principales fenómenos cuya interpretación supuso históricamente la extensión del concepto de cuanto de energía a la radiación electromagnética, permitiendo así establecer de forma incuestionable su naturaleza corpuscular en los procesos de emisión y absorción por la materia. Otra importante evidencia experimental del comportamiento corpuscular de la radiación la proporciona el proceso de producción de pares, esto es, la creación de una partícula y su correspondiente antipartícula a partir de la interacción de radiación de alta energía con un núcleo. Puede presentarse, asimismo, el fenómeno inverso, en el cual la energía radiante se crea como resultado de la aniquilación mutua del par. Sin embargo, no vamos a precisar más aquí estos últimos procesos, remitiéndonos a los capítulos finales del libro, en los que serán contemplados más en detalle.

2.2. EFECTO FOTOELÉCTRICO

En 1889, Heinrich Hertz¹ observó que se establecía más fácilmente una descarga eléctrica entre dos electrodos esféricos de cinc si uno de ellos era iluminado con luz ultravioleta. Posteriormente, en 1899, Lenard demostró que la corriente que se producía desde el metal iluminado estaba constituida por electrones, los cuales tomaban energía de la luz incidente y adquirían energía cinética suficiente como para abandonar la superficie del metal, contribuyendo a la corriente y desplazándose hacia el ánodo. A este fenómeno se le conoce universalmente como efecto fotoeléctrico.

¹ Los experimentos de Hertz fueron los primeros que confirmaron la bondad de la teoría electromagnética de Maxwell y el comportamiento de la luz como onda electromagnética. Resulta paradójico, por tanto, que fuera el mismo Hertz el que observase también, aunque no supiese interpretarlo adecuadamente, un efecto que pondría en cuestión algunos años después la propia teoría electromagnética clásica.

Un esquema del dispositivo utilizado para estudiar el efecto fotoeléctrico se muestra en la figura 2.1. Un haz de luz monocromático incide sobre la superficie del metal que hace de cátodo, C, después de atravesar la ventana de cuarzo O (se emplea cuarzo en lugar de vidrio porque éste es opaco a la radiación ultravioleta). Los electrones emitidos desde C (denominados frecuentemente fotoelectrones) alcanzan el ánodo A, estableciéndose así una corriente que se mide con el galvanómetro G. El potencial existente entre A y C se debe en parte a la diferencia de potencial aplicada desde el exterior de forma controlada (pudiendo ser positiva o negativa), y, por otra parte, al potencial de contacto entre los metales². Para valores prefijados de la intensidad de la luz incidente, variando el potencial V se obtienen experimentalmente las curvas mostradas en la figura 2.2, en la que, en ordenadas, hemos representado en unidades arbitrarias la intensidad I_c de la corriente eléctrica generada. Cuando la diferencia de potencial entre A y C es positiva, favoreciéndose así el paso de cargas, se alcanza un cierto valor de saturación para I_c : todos los fotoelectrones que abandonan C, por pequeña que sea su energía cinética, son recogidos por A.

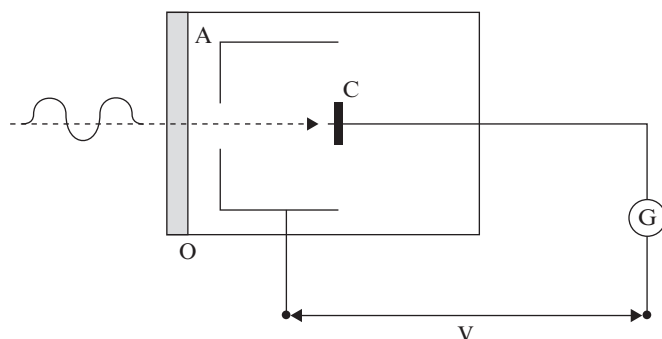


Figura 2.1. Esquema simplificado del montaje empleado en el estudio del efecto fotoeléctrico. Las superficies metálicas A y C están contenidas en un recipiente en el que se ha hecho el vacío.

Obsérvese que el hecho de que los electrones emitidos por C posean energía cinética se deduce también en la figura 2.2: cuando V comienza a tomar valores negativos, la corriente no decae bruscamente a cero, como sucedería si los fotoelectrones se desprendieran del metal con energía cinética nula. Ésta se emplea, de hecho, en avanzar en contra del potencial, de manera que los electrones que alcanzan A y contribuyen a la corriente deben poseer, al ser emitidos desde C, una energía cinética al menos igual a $e|V|$, donde $-e$ representa la carga del electrón. Existe un valor del potencial, V_0 , a partir del cual $I_c = 0$: ningún electrón consigue llegar a A. Este valor, denominado potencial de frenado, resulta

² El potencial de contacto entre dos metales se define como el trabajo necesario para mover una carga unidad desde el interior de un metal al interior del otro cuando no hay ningún potencial externo aplicado. Es preciso tener en cuenta que el potencial de contacto puede ser positivo o negativo (y, por tanto, sumarse o restarse) respecto al potencial externo aplicado.

ser independiente de la intensidad de la radiación incidente (véase figura 2.2), cumpliéndose además

$$e|V_0| = K_{\text{máx}} \quad [2.2.1]$$

donde $K_{\text{máx}}$ denota la energía cinética de los fotoelectrones más rápidos. $K_{\text{máx}}$, por tanto, es también independiente de la intensidad luminosa incidente.

Desde el punto de vista de la teoría ondulatoria clásica, el efecto fotoeléctrico podría intentar explicarse como sigue: la onda electromagnética incidente genera oscilaciones forzadas de los electrones del metal. Cuando la frecuencia propia de oscilación de tales electrones coincida con la frecuencia de la onda incidente (resonancia), la amplitud de las oscilaciones de los electrones alcanzará valores tan elevados que el fotoelectrón podrá desprenderse del metal. Ahora bien, la intensidad de la radiación incidente es proporcional, según el electromagnetismo clásico, al cuadrado del módulo del vector campo eléctrico E . A su vez, la fuerza ejercida por dicho campo sobre un fotoelectrón es proporcional a E . Por tanto, un aumento en la intensidad luminosa incidente, *sin modificar su frecuencia*, traerá consigo un aumento de la fuerza que actúa sobre el electrón, lo que ocasionará el consiguiente aumento en la energía cinética del electrón emitido. Resumiendo, clásicamente debería existir una estrecha relación entre $K_{\text{máx}}$ y la intensidad de la radiación incidente. Esto está, sin embargo, en completa contradicción con lo observado experimentalmente. De hecho, la intensidad luminosa resulta ser estrictamente proporcional al número de fotoelectrones emitidos, pero es completamente *independiente* de sus velocidades.

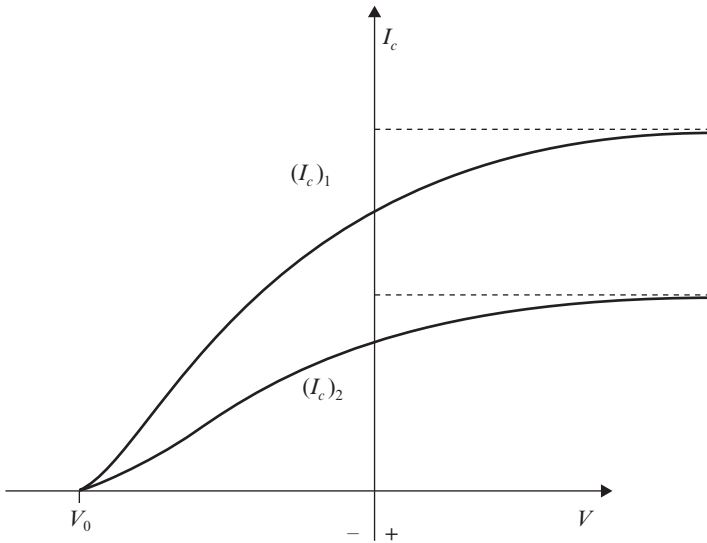


Figura 2.2. Intensidad de corriente fotoeléctrica en función del potencial V para dos valores de la intensidad luminosa incidente. Experimentalmente, se encuentra que $(I_c)_1$ e $(I_c)_2$ son proporcionales a la intensidad de la radiación incidente.

Por otro lado, según la teoría clásica, la energía de una onda electromagnética se encuentra distribuida uniformemente a lo largo del frente de onda. Ahora bien, la energía adquirida por el fotoelectrón es absorbida de la onda luminosa en un pequeño entorno del correspondiente átomo o molécula (área efectiva de absorción $\approx 1 \text{ \AA}^2$). Por ello, si el haz luminoso incidente es suficientemente débil, el fotoelectrón tardará un cierto tiempo en adquirir la energía necesaria para abandonar el metal, existiendo, por tanto, un retraso medible entre el instante en el que comienza a incidir luz y el de emisión del electrón. Lawrence y Beams demostraron experimentalmente en 1928 que tal retardo, de existir alguno, tendría que ser inferior a 3×10^{-9} s, lo que contradice en varios órdenes de magnitud lo esperable mediante la teoría clásica (véase ejercicio 2.1).

En el capítulo anterior habíamos visto cómo Planck introducía la idea de cuantificación de la energía restringiéndola a la que poseían los osciladores elementales que conformaban las paredes de una cavidad de cuerpo negro. Los estados energéticos accesibles de tales osciladores eran múltiplos de la cantidad $h\nu$. Es decir, en un proceso de emisión (o absorción) de radiación, la energía del oscilador se modificaba en una cantidad $nh\nu$. Fue Einstein quien, en 1905, extendió la idea de cuantificación de la energía a la propia radiación, considerándola constituida por un conjunto de cuantos indivisibles de energía que interaccionan con la materia en forma localizada. Según esta teoría, en el proceso de pasar de un estado de energía $nh\nu$ a otro de energía $(n - 1)h\nu$, el oscilador en cuestión emitía una de tales partículas, denominadas posteriormente fotones³, cuya energía era precisamente la diferencia energética $h\nu$. La introducción del concepto de cuanto de radiación permitió resolver simple y elegantemente todas las dificultades e inconsistencias que, según hemos visto, surgían al intentar explicar clásicamente el efecto fotoeléctrico. Siguiendo la argumentación de Einstein, los cuantos de luz penetran a través de la superficie del electrodo que hace de blanco y comunican *toda* su energía a algún electrón con el que interaccionan, transformándola, al menos en parte, en energía cinética. Si el electrón se encuentra en el interior del material, una parte de la energía cinética adquirida se perderá antes de alcanzar la superficie del metal en su camino hacia el ánodo, debido a las colisiones internas y a los campos atractivos de los átomos de superficie⁴. En este sentido no olvidemos que las fuerzas generadas por dichos campos son las que normalmente mantienen a los electrones ligados al metal. Los electrones que abandonarán el material con mayor energía cinética (mayor velocidad) serán aquellos que se encuentren sobre la misma superficie de éste, no sufriendo así pérdidas de energía en desplazamientos interiores. Si uno de tales fotoelectrones ha absorbido un fotón de energía $h\nu$, podremos escribir, por tanto:

$$K_{\text{máx}} = h\nu - w_0 \quad [2.2.2]$$

donde w_0 es la denominada función de trabajo del material, definida como el trabajo mínimo necesario para arrancar un electrón de la superficie del metal. Es, en general, del

³ La palabra «fotón» fue introducida por G. N. Lewis en 1926 en analogía con los términos electrón y protón.

⁴ En un material, en general, habrá una cierta pérdida de energía necesaria para ionizar el átomo, pero al considerar metales y poseer éstos un gran número de electrones libres, tal pérdida puede considerarse despreciable.

orden de algunos electrón-voltios (véase tabla 2.1)⁵. A la vista de [2.2.2] se comprende ahora que $K_{\text{máx}}$ no dependa de la intensidad incidente: cada fotón interactúa con un solo electrón. El hecho de que existan más o menos fotones presentes en la radiación (diferentes intensidades luminosas) no afecta a cada proceso individual. Hemos salvado, por tanto, la primera de las contradicciones en que incurría la teoría clásica.

TABLA 2.1
Funciones de trabajo para diversos metales

Metal	Función de trabajo (eV)	Metal	Función de trabajo (eV)
Litio Li	2.4	Aluminio Al	4.2
Sodio Na	2.1	Wolframio W	4.5
Potasio K	2.0	Platino Pt	6.3

El carácter localizado e indivisible (corpuscular) de la interacción comporta también que la transferencia de energía del fotón al electrón se realice de manera prácticamente instantánea (tiempos inferiores al nanosegundo), ya que no se distribuye a lo largo de un frente de ondas sino que se comunica de una sola vez en «paquetes concentrados» de energía. Queda obviada, por consiguiente, la segunda inconsistencia de la teoría clásica.

Por último, conforme hagamos más negativo V , cada vez habrá menos fotoelectrones que consigan llegar a A y contribuyan a la corriente. En el límite $V = V_0$ (potencial de frenado), sólo los emitidos en dirección perpendicular y desde la superficie del material iluminado alcanzarán A, y ya para valores $V < V_0$ la intensidad de la corriente será cero. Teniendo en cuenta las ecuaciones [2.2.1] y [2.2.2], podremos, por tanto, escribir la siguiente relación fundamental

$$|V_0| = \frac{h\nu}{e} - \frac{w_0}{e} \quad [2.2.3]$$

expresión que sirvió para probar experimentalmente en 1914 (casi diez años después de haber sido anunciada) la bondad de la teoría de Einstein. Obsérvese que V_0 es independiente de la intensidad luminosa, pero depende linealmente de la frecuencia de la radiación. Representando $|V_0|$ en función de ν (véase figura 2.3), se deduce inmediatamente que debe existir, para cada material, una frecuencia de corte característica, ν_0 , por debajo de la cual no se producirá efecto fotoeléctrico alguno, por más que aumentemos la intensidad de la radiación incidente. El valor de ν_0 se obtiene inmediatamente de [2.2.3] haciendo $V_0 = 0$ (para valores inferiores a ν_0 no se generará corriente eléctrica aunque el potencial de frenado sea nulo).

⁵ La función de trabajo aparece también en relación con la emisión de electrones por los cuerpos calientes (emisión termoiónica). Este efecto permite la determinación experimental de w_0 sin recurrir al efecto fotoeléctrico.

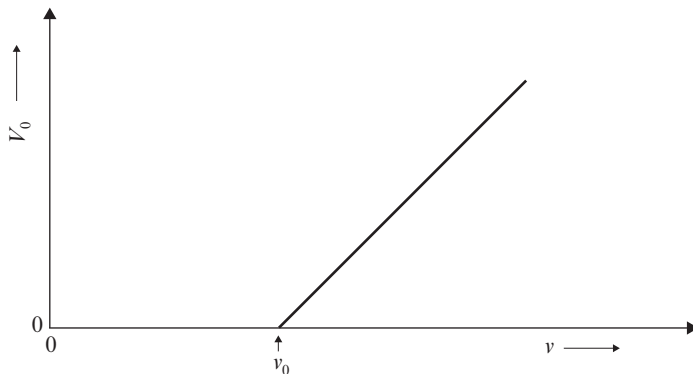


Figura 2.3. Potencial de frenado en función de la frecuencia de la radiación incidente. La intersección de la recta (dada por [2.2.3]) con el eje de abscisas nos da la frecuencia de corte ν_0 .

Fue Millikan quien, durante el período 1912-1917, comprobó, mediante una serie de minuciosos experimentos, la exactitud de la relación [2.2.3]. Además, a partir del valor de la carga del electrón que él también había medido⁶, y de la pendiente de la recta de la figura 2.3 (igual a h/e), dedujo el valor de la constante h , idéntico (salvo un margen del 1 por mil) al resultado obtenido por Planck a partir del cuerpo negro. El respaldo que estos hechos proporcionaron a la teoría de Einstein y, en definitiva, a la idea de cuantificación de la energía fue enorme. En este sentido téngase en cuenta que el efecto fotoeléctrico y la radiación del cuerpo negro son fenómenos físicos completamente independientes, por lo que la coincidencia en los valores de h determinados en las diferentes experiencias constituye una prueba concluyente de la bondad de ambas teorías.

Puede resultar sorprendente que se necesitaran diez años para verificar con suficiente precisión la relación [2.2.3]. La razón estriba esencialmente en la difícil medida del potencial de contacto entre electrodos, así como en la existencia de numerosas fuentes de error en los experimentos. Actualmente, gracias a las técnicas de vacío, es posible llevar a cabo dicha comprobación mucho más fácilmente.

Al igual que cuando considerábamos el cuerpo negro, podemos preguntarnos por qué no observamos habitualmente el carácter discreto de la radiación. La explicación radica ahora, como entonces, en la extraordinaria pequeñez de la cantidad $h\nu$ para frecuencias

⁶ El ingenioso procedimiento seguido por Millikan para determinar la carga del electrón se basaba en la medida directa de la carga de pequeñas gotas de aceite sometidas al campo eléctrico existente entre las placas de un condensador colocado horizontalmente. Las gotas se cargaban eléctricamente al expulsarlas por medio de un pulverizador, pudiendo modificarse su carga a voluntad ionizando el aire entre las armaduras del condensador por medio de, por ejemplo, rayos X. Se demuestra que el cambio en la velocidad Δv con que se desplazan dichas gotas es proporcional a la variación de carga sufrida. Por tanto, si se encuentra experimentalmente que Δv es siempre un múltiplo de una cierta cantidad, se deberá inferir que las correspondientes variaciones de carga no son continuas, sino que se realizan mediante incrementos finitos. La carga será, pues, una suma de unidades discretas (múltiplo de una unidad elemental). Precisamente la medida de tales incrementos proporcionó a Millikan el valor de la carga del electrón.

ordinarias. Por ejemplo, para $\lambda = 5890 \text{ \AA}$ (luz visible amarilla), la energía de cada cuanto es $3.4 \times 10^{-19} \text{ J}$, es decir, 2.1 eV. Las energías involucradas en fenómenos a escala macroscópica son, evidentemente, mucho mayores, por lo que la discretización no será apreciable: téngase en cuenta que un haz de luz amarilla de intensidad relativamente baja (1 Wm^{-2}) contiene aproximadamente 10^{18} fotones (por unidad de área y tiempo), por lo que un incremento de energía igual a $h\nu$ es inobservable. Nótese, sin embargo, que la energía necesaria para arrancar *un* electrón de un metal es del orden de los electrón-voltios, es decir, comparable con la energía de *un* cuanto de luz amarilla.

Conviene señalar que en el efecto fotoeléctrico los fotones son completamente absorbidos, lo cual requiere que los electrones se encuentren ligados al metal (en otros casos, a algún átomo, molécula, etc.). En efecto, puede demostrarse (véase ejercicio 2.2) que un electrón libre no puede absorber (ni emitir) un fotón. Las leyes de conservación de la energía y el momento exigen que exista otra partícula que retroceda además del fotoelectrón. La enorme masa del sistema al cual está ligado el electrón en comparación con la de éste permite a aquél recibir gran parte del momento del fotón incidente sin adquirir una cantidad significativa de su energía, por lo que las relaciones [2.2.2] y [2.2.3] pueden considerarse perfectamente válidas.

2.3. EMISIÓN DE RAYOS X

Cuando un haz de electrones emitidos térmicamente desde un electrodo que hace de cátodo, son acelerados mediante una diferencia de potencial de varias decenas de miles de voltios hasta chocar con el correspondiente ánodo, se observa experimentalmente la emisión de un espectro continuo de radiación electromagnética, predominantemente en el intervalo de longitudes de onda inferiores a 1 \AA ⁷. Este rango corresponde a la radiación de rayos X, denominados así por su descubridor, Röntgen, debido a que por entonces su naturaleza electromagnética era desconocida⁸. El proceso anterior está esquematizado en la figura 2.4. Un electrón incide sobre un núcleo del material que hace de blanco. Al pasar cerca de él se desvía, acelerándose y emitiendo radiación de rayos X⁹. El caso límite es aquel en el cual el electrón pierde completamente toda su energía cinética en el proceso.

Desde el punto de vista de la física clásica, es conocido que toda carga acelerada (o desacelerada) emite radiación. En este caso, además, la magnitud de la desaceleración varía de unos electrones a otros (téngase en cuenta que no pasan todos a la misma distancia del núcleo), por lo que resulta esperable la aparición de un espectro *continuo* de radiación. Sin embargo, lo que no puede explicarse con argumentos basados en la física

⁷ Además de este espectro continuo se observa también un espectro discreto característico del material blanco. Pero por ahora nos interesa estudiar sólo el primer tipo.

⁸ Los rayos X desempeñaron un importante papel en el estudio de la estructura de la materia. Por ejemplo, a partir de datos espectroscópicos de rayos X se pudieron determinar los números atómicos de los elementos y el número de Avogadro, así como la carga del electrón.

⁹ Este efecto se suele denominar *bremsstrahlung*, del alemán *bremsen* (frenar) y *strahlung* (radiación). Dicho proceso se presenta también en cualquier interacción de electrones muy energéticos con la materia.

clásica es la existencia, comprobada experimentalmente, de una longitud de onda mínima, para cada potencial acelerador. Esto se observa claramente en las curvas de la figura 2.5: no se produce emisión de radiación de longitud de onda inferior a esa mínima, llamada de corte.

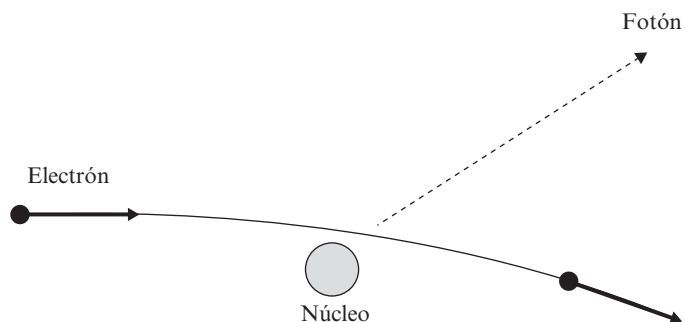


Figura 2.4. Esquema del proceso de emisión de rayos X por desaceleración de un electrón por un núcleo (efecto Bremsstrahlung).

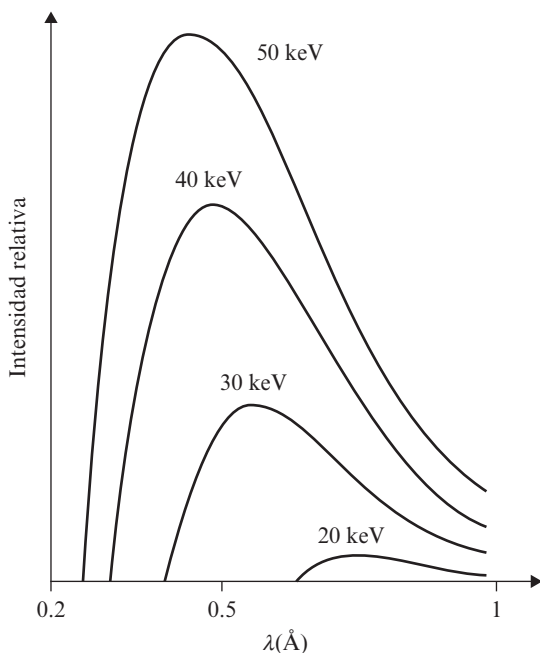


Figura 2.5. Espectro continuo de rayos X emitidos por un blanco de wolframio para diferentes valores de la energía del electrón incidente. Obsérvese que para cada curva existe una longitud de onda de corte.

En principio, este hecho sorprendente puede ser explicado de manera simple considerando que la radiación emitida está constituida por un conjunto de «paquetes» de energía (fotones), de magnitud $h\nu$. Dado que la energía cinética del electrón K_e se adquiere mediante un potencial acelerador V , se tendrá

$$K_e = eV \quad [2.3.1]$$

Por otro lado, como la masa del núcleo es varios órdenes de magnitud superior a la masa del electrón, la energía cinética de retroceso del núcleo, después de la interacción, será despreciable respecto a la del electrón y a la energía del fotón emitido (no así su cantidad de movimiento). Por tanto, si consideramos el caso límite en el cual el electrón es completamente frenado, y por ello toda su energía cinética completamente transferida al fotón emitido, podremos escribir

$$K_e = eV = h\nu_{\text{máx}} \quad [2.3.2]$$

que, teniendo en cuenta $\nu_{\text{máx}} = c/\lambda_{\text{mín}}$, se convierte en

$$\lambda_{\text{mín}}V = hcle = \text{constante} \quad [2.3.3]$$

La expresión anterior nos proporciona la longitud de onda de corte buscada en términos del potencial acelerador y de tres constantes fundamentales. Como comprobación, basta observar en la figura 2.5, obtenida experimentalmente, que la longitud de onda mínima para $V = 40$ keV es la mitad que la correspondiente a $V = 20$ keV, en completo acuerdo con [2.3.3]. Es evidente de todo lo anterior que no pueden emitirse fotones cuyas frecuencias sean superiores a $\nu_{\text{máx}}$, ya que ello violaría el principio de conservación de la energía.

La ecuación [2.3.3] posibilita, además, una determinación más precisa de la constante de Planck, h . En efecto, haciendo uso de las fórmulas de Planck y Wien, se encuentra experimentalmente para la constante h el valor:

$$h = 6.558 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \quad [2.3.4]$$

Mediante el método de Millikan, basado en el efecto fotoeléctrico, se llega a

$$h = 6.547 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \quad [2.3.5]$$

mientras que, a partir de [2.3.3], se establece el valor

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \quad [2.3.6]$$

La mayor precisión de este último procedimiento basado en la determinación de la longitud de onda de corte del espectro de emisión de rayos X proviene de la exactitud con que puede hallarse mediante este método el cociente h/e .

2.4. EFECTO COMPTON

La dispersión de rayos X constituye uno de los fenómenos en los que se pone de manifiesto de forma más evidente la insuficiencia de una teoría puramente ondulatoria de la radiación. Su naturaleza electromagnética les confiere propiedades típicamente ondulatorias (como, por ejemplo, la polarización¹⁰), de forma que su dispersión por la materia podría, en principio, estudiarse considerando las oscilaciones forzadas de un electrón libre bajo la acción de una onda plana electromagnética que incida sobre él. Como consecuencia de esta oscilación el electrón emitiría radiación (haz dispersado). La teoría clásica proporciona expresiones simples de la intensidad de dicho haz en función del ángulo de dispersión (ángulo que forman las direcciones de los haces incidente y dispersado). Sin embargo, de la comparación entre los correspondientes resultados experimentales y teóricos se comprueba que, para las longitudes de onda cortas, la teoría ondulatoria resulta claramente insuficiente, y se hace inaplicable si se analiza la composición espectral de la radiación dispersada. De hecho, para cada ángulo de dispersión se aprecia un máximo acusado de intensidad para una frecuencia distinta a la del haz incidente, lo que no encuentra justificación a partir de un tratamiento clásico, según el cual la frecuencia del haz no debe sufrir ninguna modificación al dispersarse. Hasta el descubrimiento de la espectroscopía de rayos X, estos cambios en la frecuencia, aunque observados, eran de difícil medida, y se atribuían a factores experimentales. Fue Compton quien, en 1923, pudo precisar este fenómeno y su posterior interpretación, dada por él mismo, e independientemente por Debye, proporcionando un apoyo incuestionable a la concepción corpuscular de la radiación.

El montaje experimental utilizado por Compton está esquematizado en la figura 2.6: un haz monocromático (de longitud de onda bien definida) de rayos X, incide sobre un

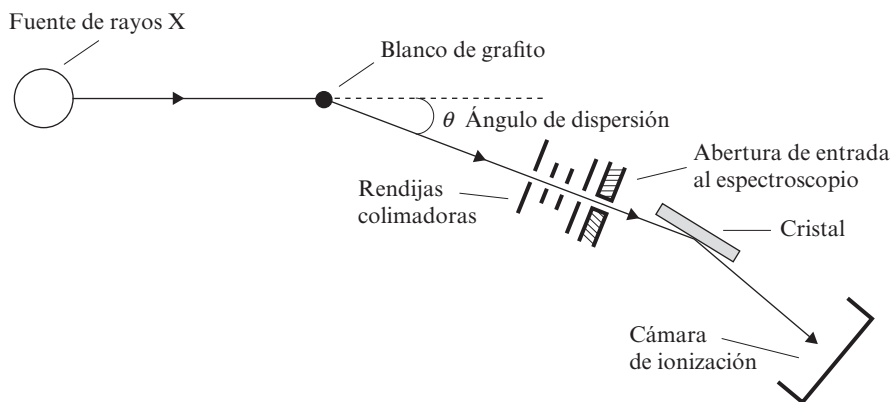


Figura 2.6. Esquema del montaje experimental utilizado por Compton.

¹⁰ La polarización de los rayos X puede probarse mediante un montaje esencialmente análogo al empleado en la célebre experiencia de los espejos de Norrenberg (pueden consultarse al efecto los textos generales de Óptica). El papel de los espejos lo desempeñan en este caso dos placas de carbón o parafina que actúan sobre la polarización del haz.

blanco de material dispersor, por ejemplo, grafito. La radiación dispersada según un cierto ángulo atraviesa sucesivamente una serie de rendijas de plomo que sirven para fijar su dirección, y posteriormente penetra en un espectroscopio. La distribución espectral de intensidades se mide mediante una cámara de ionización (la intensidad de la corriente de ionización generada por la radiación sirve como medida de la intensidad de esta última).

La idea central en la que se basa un espectroscopio de rayos X puede resumirse como sigue: el haz de radiación incide sobre un sólido cristalino cuyos átomos pueden agruparse formalmente a lo largo de planos atómicos (véase figura 2.7). Se crea así una estructura similar a una red tridimensional con una separación entre puntos homólogos igual a la distancia interplanar, que designaremos por d . Cuando el haz penetra en el interior del cristal los átomos actuarán como centros dispersores de radiación. Puede demostrarse que la onda envolvente de las ondas elementales emitidas por los átomos de cada plano se comporta como si se tratase de la onda reflejada sobre dicho plano en dirección especular con respecto a la dirección del haz incidente (véase figura 2.7). El haz experimenta así, al propagarse a través del medio cristalino, sucesivas reflexiones parciales cada vez que encuentra uno de tales planos de simetría. El haz reflejado global se obtendrá, por tanto, de la superposición (interferencia) de los haces reflejados en las diferentes capas. En general, para un ángulo de incidencia arbitrario, la interferencia resultante es prácticamente destructiva y la intensidad del haz dispersado se anula. Sin embargo, existen determinadas direcciones para las cuales todos los haces elementales reflejados interfieren constructivamente, dando lugar a un máximo de intensidad. La relación que las define (condición de Bragg) se expresa en la forma

$$n\lambda = 2d \sin \varphi \quad [2.4.1]$$

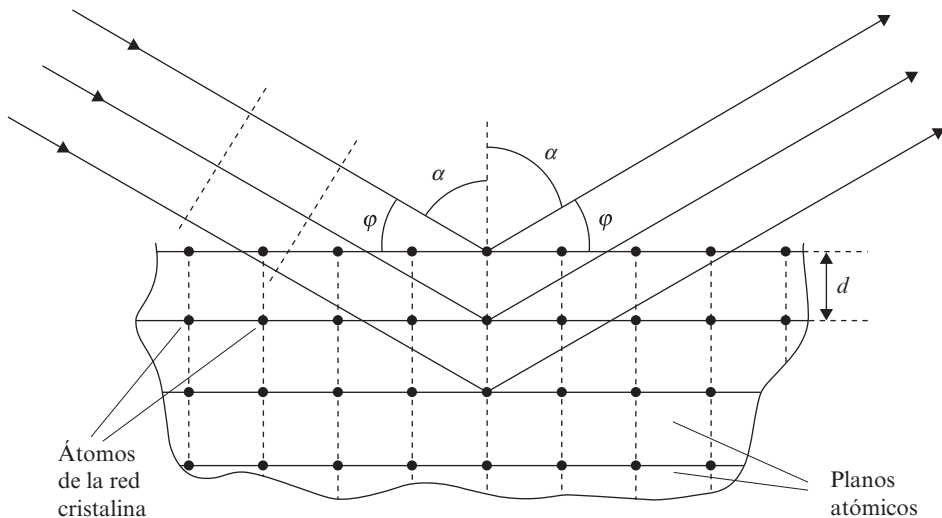


Figura 2.7. Reflexión de Bragg en un cristal. Para simplificar el esquema no se ha considerado la refracción del haz de radiación en la cara de entrada al medio cristalino. En la figura, $\varphi + \alpha = \pi/2$.

donde n es un entero positivo, y φ está representado en la figura 2.7. Conviene señalar que la ecuación [2.4.1] se obtiene imponiendo que la diferencia de camino entre los haces reflejados en planos sucesivos sea un múltiplo de la longitud de onda λ . Fijada una dirección φ , obtendremos intensidad apreciable solamente para aquella radiación cuya longitud de onda satisfaga la relación [2.4.1]. Por tanto, midiendo la intensidad de la radiación reflejada según cada ángulo φ , realmente estaremos obteniendo la distribución *espectral* de intensidades del haz de rayos X incidente. El lector puede preguntarse por qué no se utilizan estructuras o retículos de tamaño macroscópico, como se hace cuando se emplea radiación visible. La razón estriba en la pequeñez de λ para el rango de los rayos X: la ecuación [2.4.1] obliga a tomar valores de d comparables a λ si queremos que los ángulos φ sean apreciables (téngase en cuenta que el pico más intenso de intensidad se alcanza para $n = 1$ o, en su defecto, para valores de n bajos).

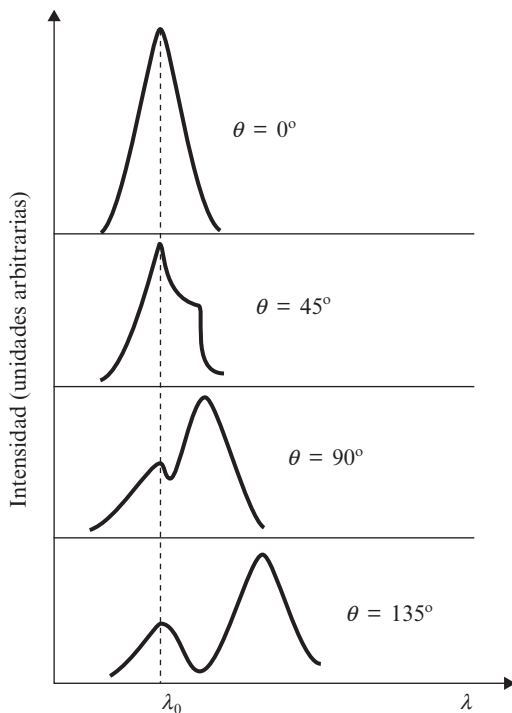


Figura 2.8. Efecto Compton para un haz de rayos X de longitud de onda $\lambda_0 = 0.7126 \text{ \AA}$ incidente sobre un blanco de grafito. En la figura, θ designa el ángulo de dispersión que se considera en cada caso. En ordenadas representamos la intensidad relativa de los picos de dispersión.

Algunos resultados experimentales de Compton se muestran en la figura 2.8. Pueden señalarse las siguientes características generales:

- a) Para ángulos superiores a 90° se aprecian claramente dos máximos, uno de los cuales corresponde siempre a la longitud de onda del haz incidente, estando el otro desplazado hacia las longitudes de onda superiores.

- b) La magnitud del desplazamiento depende del ángulo de dispersión, θ , aumentando conforme éste crece.
- c) La intensidad asociada al máximo no desplazado disminuye al aumentar el ángulo θ , sucediendo lo contrario para el pico desplazado.

Conviene, además, comparar las distribuciones espectrales correspondientes a diferentes materiales actuando como blanco dispersor para un mismo valor de θ (véase figura 2.9). Se observan las siguientes propiedades:

- a) La magnitud del desplazamiento es independiente del material empleado.
- b) La intensidad del máximo no desplazado crece conforme aumenta el número atómico del elemento dispersor. Lo opuesto sucede para el máximo desplazado.

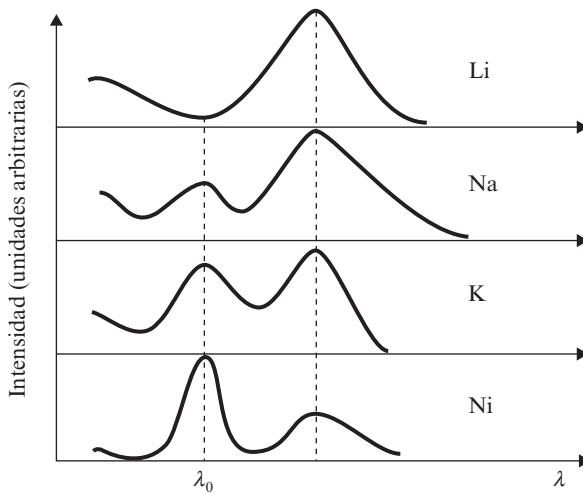


Figura 2.9. Resultados de Compton y Wu para distintos materiales utilizados como blanco. El ángulo de dispersión y la longitud de onda λ_0 del haz de rayos X incidente son los mismos en todos los casos.

Como ya se apuntó al comienzo de esta sección, la teoría ondulatoria clásica no proporciona ninguna explicación satisfactoria, incluso a nivel cualitativo, de las particularidades que acabamos de reseñar. Compton, sin embargo, recogiendo las ideas de Einstein acerca de la naturaleza corpuscular de la radiación, fue capaz de explicar de manera simple las características anteriores: supuso que la radiación estaba constituida por un conjunto de corpúsculos (fotones), cada uno con energía $E = h\nu$, de tal forma que su interacción con los electrones podía considerarse como un choque elástico entre partículas, satisfaciéndose las leyes de conservación de la energía y el momento lineal. Según este modelo, el fotón y el electrón colisionan como bolas de billar, transfiriendo el primero parte de su energía y momento al segundo. El fotón después del choque constituye, por tanto, la radiación dispersada que deseamos analizar.

Antes de plantear las ecuaciones de conservación correspondientes, conviene precisar algunas características fundamentales del fotón. Dado que esta partícula se desplaza a la velocidad de la luz, será necesario emplear expresiones relativistas. La energía total relativista E de una partícula de masa en reposo m_0 que se mueve con velocidad v , viene dada por

$$E = mc^2 = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad [2.4.2]$$

donde m es la denominada masa relativista, cuyo valor es $m = m_0(1 - v^2/c^2)^{-1/2}$.

Ahora bien, si la velocidad del fotón es c , para que la energía total permanezca finita (e igual a $h\nu$) es preciso que m_0 para el fotón sea cero, ya que en caso contrario el denominador de [2.4.2] se anularía y $E \rightarrow \infty$, en contradicción con lo postulado. Por otro lado, la relación entre la energía E y el momento relativista p de una partícula es

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \quad [2.4.3]$$

Si hacemos $m_0 = 0$ en [2.4.3], se obtiene para el fotón

$$E = pc \quad [2.4.4]$$

lo que implica

$$p = E/c = h\nu/c \quad [2.4.5]$$

que, recordando $v = c/\lambda$, se transforma en

$$p = h/\lambda \quad [2.4.6]$$

relación que nos proporciona el momento lineal asociado al fotón en términos de la longitud de onda de la radiación. A modo de resumen, la tabla 2.2 representa en escala logarítmica la frecuencia, la longitud de onda y la energía de los fotones pertenecientes a diferentes regiones del espectro electromagnético.

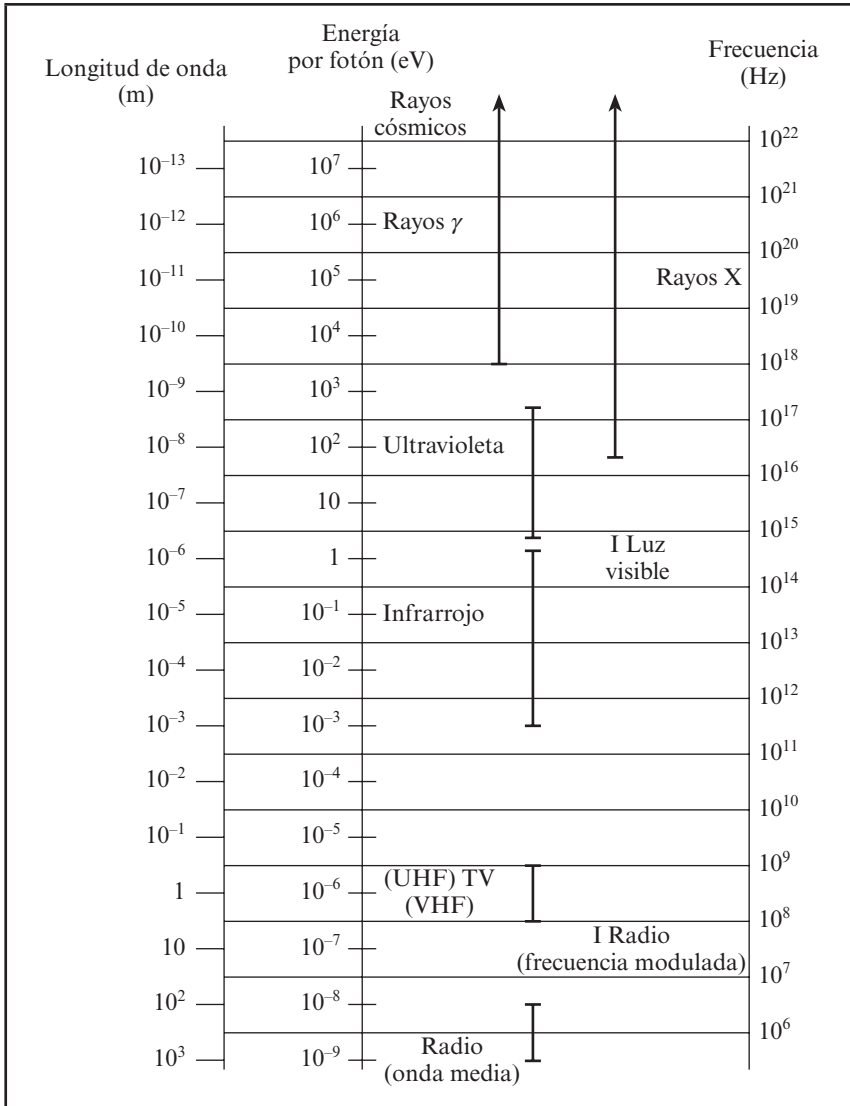
A la vista de la relación [2.4.2] podemos formalmente asociar al fotón una masa relativista $m = E/c^2 = h\nu/c^2$. Este comportamiento inercial de los cuantos de radiación fue confirmado experimentalmente por Pound y Rebka en 1960, observando que fotones de rayos γ , muy energéticos, sufrían un cambio en su frecuencia (corrimiento gravitacional hacia el rojo) cuando se alejaban verticalmente de la superficie terrestre. Pound y Rebka fueron capaces de medir este corrimiento espectral en una torre de la Universidad de Harvard mediante técnicas extraordinariamente sensibles relacionadas con el efecto Mössbauer. Encontraron un cambio relativo en la frecuencia, $\Delta\nu/\nu$ del orden de 10^{-15} . Este mismo efecto lo experimenta también la radiación que escapa de la atracción gravitacional ejercida por determinados cuerpos celestes, y es especialmente notable en las estrellas denominadas enanas blancas. En el caso del Sol, y para el

Comportamiento corpuscular de la radiación

rango visible, el corrimiento gravitacional, expresado en longitudes de onda, es del orden de 0.01 \AA .

El comportamiento corpuscular de los fotones ha sido, asimismo, corroborado en relación con la deflexión (desviación de su trayectoria rectilínea) de un haz de luz procedente de alguna estrella al pasar cerca de un cuerpo muy masivo como es el Sol. Dicha deflexión es del orden del minuto de arco.

TABLA 2.2
Espectro electromagnético



Es importante observar que las ecuaciones $E = h\nu$ y $p = h/\lambda$ establecen de forma simple el nexo de unión entre las propiedades corpusculares y ondulatorias de la radiación. En efecto, los primeros miembros de dichas ecuaciones contienen magnitudes características de las partículas, como son la energía y el momento lineal, mientras que los segundos miembros muestran aspectos típicamente ondulatorios, a saber, la frecuencia y la longitud de onda. Más aún, para probar el comportamiento corpuscular de la radiación se utilizó un dispositivo (espectroscopio) cuyo funcionamiento se basaba en consideraciones ondulatorias de la radiación (interferencias). Aplazaremos por el momento el análisis de esta dualidad formal remitiéndonos al siguiente capítulo, donde será discutida en detalle.

Estudiemos, pues, siguiendo las idas de Compton, la colisión entre un fotón y un electrón libre que, por simplicidad, supondremos inicialmente en reposo. Podemos, sin perder generalidad, plantear el problema bidimensionalmente designando por p_0 y p_1 los módulos de los momentos del fotón antes y después del choque, respectivamente, y por p el módulo del momento del electrón de retroceso. La conservación del vector momento impone dos ecuaciones de conservación según cada eje cartesiano (véase figura 2.10):

$$p_0 = p_1 \cos \theta + p \cos \varphi \tag{2.4.7}$$

$$p_1 \sin \theta = p \sin \varphi \tag{2.4.8}$$

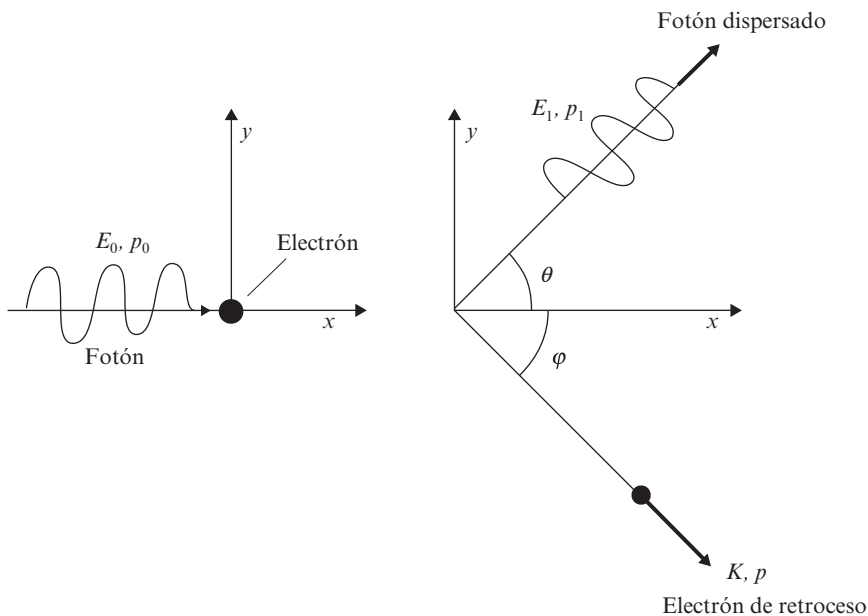


Figura 2.10. Diagrama ilustrativo de la notación empleada en el estudio de la colisión entre un fotón y un electrón.

en donde se ha supuesto, por sencillez, que el fotón incidente viajaba a lo largo del eje x . Elevando al cuadrado ambas ecuaciones y sumándolas, se obtiene

$$p^2 = p_0^2 + p_1^2 - 2p_0p_1 \cos \theta \quad [2.4.9]$$

Por otro lado, la conservación de la energía exige

$$E_0 + m_e c^2 = E_1 + K + m_e c^2 \quad [2.4.10]$$

donde hemos denotado por E_0 y E_1 las energías del fotón incidente y dispersado, respectivamente, K la energía cinética del electrón de retroceso y m_e su masa en reposo. Recordando que

$$E_0 = p_0 c \quad [2.4.11]$$

y

$$E_1 = p_1 c \quad [2.4.12]$$

la ecuación [2.4.10] se convierte en

$$c(p_0 - p_1) = K \quad [2.4.13]$$

La ecuación [2.4.3] también puede escribirse en la forma

$$(K + m_e c^2)^2 = p^2 c^2 + m_e^2 c^4 \quad [2.4.14]$$

es decir,

$$K^2/c^2 + 2Km_e = p^2 \quad [2.4.15]$$

Sustituyendo entonces en [2.4.15] los valores de p^2 y K dados por [2.4.9] y [2.4.13], respectivamente, nos queda finalmente

$$m_e c(p_0 - p_1) = p_0 p_1 (1 - \cos \theta) \quad [2.4.16]$$

que también puede expresarse como sigue:

$$\frac{1}{p_1} - \frac{1}{p_0} = \frac{1}{m_e c} (1 - \cos \theta) \quad [2.4.17]$$

Si tenemos en cuenta (véase ecuación [2.4.6]) que $p_0 = h/\lambda_0$ y $p_1 = h/\lambda_1$, la relación anterior se transforma en la bien conocida ecuación de Compton:

$$\lambda_1 - \lambda_0 \equiv \Delta\lambda = \lambda_c (1 - \cos \theta) \quad [2.4.18]$$

donde

$$\lambda_c \equiv h/m_e c = 0.02426 \text{ \AA} \quad [2.4.19]$$

es la denominada longitud de onda de Compton. Se encontró que la expresión [2.4.18] proporcionaba con exactitud la longitud de onda λ_1 del pico de dispersión desplazado en función del ángulo de dispersión. Dado que habíamos supuesto que la colisión se producía con un electrón libre, es esperable que $\Delta\lambda$ no dependa del material blanco. Sin embargo, este resultado es igualmente válido si la interacción se produce con electrones cuya energía de ionización es una parte pequeña con respecto a la energía cinética adquirida como consecuencia del choque. El electrón se comportaría así energéticamente como si fuera un electrón libre. En esas circunstancias $\Delta\lambda$ es prácticamente independiente de la clase de núcleo al que el electrón estuviera originalmente ligado. Asimismo, la magnitud del desplazamiento aumenta con θ , alcanzando su máximo valor para $\theta = 180^\circ$ (colisión frontal). En tal caso el fotón regresa en la misma dirección incidente y $\lambda_1 - \lambda_0 \equiv \Delta\lambda = 2\lambda_c$. Por otro lado, la cantidad $\Delta\lambda$ es independiente de la longitud de onda del haz inicial, λ_0 . Por ello, si empleásemos luz visible, el desplazamiento espectral del haz dispersado sería inferior a la cienmilésima parte de la longitud de onda de la radiación incidente. Por el contrario, para rayos X de $\lambda \approx 0.5 \text{ \AA}$ ese porcentaje alcanzará el 10 % y sería perfectamente observable.

Queda, no obstante, por aclarar todavía un punto: la existencia de un pico de dispersión no desplazado, centrado en la longitud de onda del haz incidente. La teoría que acabamos de desarrollar no puede dar cuenta de esto, ya que suponía que la colisión se producía con un electrón libre. Aunque esta suposición es correcta para átomos con número atómico bajo y electrones alejados del núcleo (débilmente ligados), no es cierta, sin embargo, si la interacción se produce con los electrones más internos de átomos pesados. En estos casos el fotón choca con el átomo en bloque. Ahora bien, como la masa del átomo es comparativamente muy grande, la transferencia de energía al mismo es prácticamente despreciable (el átomo se comporta como un «frontón» en el que rebotan los fotones), y el fotón dispersado no modifica su energía ni, por tanto, su frecuencia. Este resultado no debe sorprendernos, ya que es el que predice la teoría clásica, desarrollada por Thomson en 1900. Por ello suele denominarse este proceso *dispersión Thomson*, para distinguirlo de la *dispersión Compton*, que implica un cambio de frecuencia.

Lo anterior permite explicar fácilmente el comportamiento mostrado en la figura 2.9. En los átomos ligeros todos los electrones están débilmente ligados al núcleo, mientras que en átomos pesados sólo lo están los más externos. Por tanto, en idénticas condiciones de observación, será más probable que se produzca un proceso de dispersión Compton en átomos de número atómico bajo en detrimento de la dispersión Thomson. Ello implica mayor intensidad relativa del pico desplazado respecto del que no lo está. Lo contrario sucede en átomos con Z alto, en completo acuerdo con lo observado experimentalmente en la figura 2.9.

Naturalmente, si el haz incidente fuera menos energético (rango visible), las energías de ionización electrónicas, incluso para átomos ligeros, serían comparables o superiores a las energías del fotón incidente, por lo que el efecto Compton en esta parte del espectro no podrá observarse.

Como en otras ocasiones en la historia de la Física, la revolución que realmente suponía la interpretación corpuscular de la radiación no fue aceptada de manera inmediata y sin reticencias. De hecho, en 1923, Bohr, Kramers y Slater trataron de salvar la teoría ondulatoria consi-

derando que las leyes de conservación de la energía y el momento eran válidos únicamente desde un punto de vista estadístico, en promedio sobre largos intervalos de tiempo, y no eran aplicables a los procesos individuales. Por tanto, según esta teoría, la dispersión de la radiación (que se efectuaría de forma continua) y la emisión de electrones de retroceso serían procesos independientes, tan sólo conectados por leyes estadísticas. Por más que pueda sorprender semejante concepción, no debe el lector considerar absurda sin más esta teoría. Para refutarla es preciso confrontarla con el experimento. Así hicieron en 1925 Bothe y Geiger, por un lado, e independientemente Compton y Simon, por otro. Sus experiencias mostraron sin ningún género de duda la aplicabilidad de las leyes de conservación a cada proceso individual de dispersión de fotones por electrones, reafirmando así la bondad de la hipótesis de Einstein y, en definitiva, el comportamiento corpuscular de la radiación.

2.5. DESCRIPCIÓN CORPUSCULAR DE OTROS FENÓMENOS ÓPTICOS

La asignación de características corpusculares a la radiación expresadas mediante las ecuaciones $E = h\nu$ y $p = h/\lambda$ permite reinterpretar determinados fenómenos ópticos justificados en principio a partir del electromagnetismo clásico. En este apartado nos referiremos a dos de ellos, por cuanto permiten manejar las relaciones anteriores y sirven de introducción de otra de las propiedades características de una partícula, como es su momento angular.

a) Presión de radiación

En 1901, Nicols y Hull, e independientemente Lebedev, demostraron experimentalmente que cuando un haz de luz incidía sobre un disco ennegrecido colocado en uno de los extremos de un péndulo de torsión éste giraba un pequeño ángulo (véase figura 2.11), indicando así la existencia de una presión ejercida por la radiación incidente. Este efecto, desde luego inobservable en nuestra experiencia diaria, no es difícil, sin embargo, de explicar desde el punto de vista de la teoría electromagnética clásica. Piénsese que en el proceso anterior, el disco absorbe toda la energía de la onda luminosa, y que esta transferencia de energía lleva aparejada una transferencia de momento. Según el electromagnetismo, la presión de radiación, P , esto es, la fuerza ejercida por el haz sobre la unidad de superficie del disco, vale

$$P = I/c \quad [2.5.1]$$

donde I representa la intensidad luminosa incidente, es decir, la energía que incide en la unidad de tiempo sobre la unidad de superficie del disco.

Según la descripción cuántica de la radiación, el haz de luz está constituido por cierto número de paquetes de energía (fotones), cada uno de los cuales con un momento $p = h/\lambda$. Si designamos por N el número de dichos fotones que impactan en la unidad de tiempo sobre la unidad de área del disco, la presión ejercida resulta ser

$$P = Np = Nh\nu/c \quad [2.5.2]$$

Téngase en cuenta que al ser el disco completamente absorbente los fotones quedan «incrustados» en él, comunicándole todo su momento. Es un proceso análogo al que se produce cuando una bala impacta sobre un blanco que, al poderse mover libremente, se desplaza solidariamente con el proyectil en la dirección de incidencia de éste.

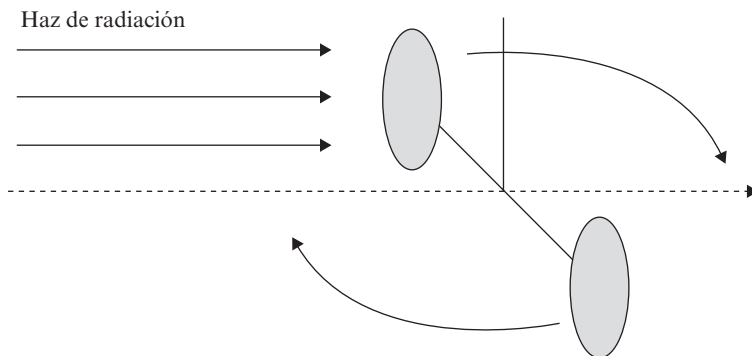


Figura 2.11. Presión de radiación. Esquema experimental.

Por otro lado, $h\nu$ es la energía de cada uno de los fotones, por lo que se tendrá

$$Nh\nu = I \quad [2.5.3]$$

de donde se deduce inmediatamente [2.5.1].

Es interesante observar que si el haz incide sobre una superficie totalmente reflectante, la absorción sería nula y el haz regresaría en la misma dirección incidente, pero en sentido contrario. En tal caso, y suponiendo que el espejo tiene masa infinita (de manera que permanece en reposo tras la colisión), el cambio total del momento de cada fotón sería $p - (-p) = 2p$, por lo que la presión de radiación valdría entonces

$$P = 2I/c \quad [2.5.4]$$

La magnitud de la presión de radiación es extraordinariamente pequeña si se compara, por ejemplo, con la presión atmosférica, cuyo valor es del orden de 10^5 N/m^2 . Así, si consideramos la presión debida a la radiación solar que incide sobre la atmósfera terrestre, suponiendo absorción completa, obtendríamos un valor de $4.7 \times 10^{-6} \text{ N/m}^2$. No debemos menospreciar, sin embargo, los efectos de dicha presión, ya que se admite que, actuando a modo de viento de radiación que sopla desde el Sol, es la causante de que las colas de los cometas apunten siempre en dirección contraria al Sol.

b) *Momento angular de la radiación*

Si las balas del ejemplo mencionado antes estuviesen dotadas de un movimiento de rotación alrededor de su dirección de propagación, entonces, además de transferir momen-

to lineal al blanco sobre el que impactasen, le comunicarían también momento angular, de forma que si dicho blanco pudiese girar libremente, rotaría alrededor de un eje paralelo al de giro de los proyectiles.

Consideremos el montaje representado en la figura 2.12. En él un haz plano de luz circularmente polarizada incide perpendicularmente sobre un disco absorbente que puede girar alrededor de un eje de rotación que pasa por su centro. La teoría electromagnética clásica demuestra que sobre el disco actúa un par de fuerzas cuyo momento por unidad de área tiene un módulo $|M|$, dado por la expresión

$$|M| = \left| \frac{dL}{dt} \right| = \frac{I}{2\pi\nu} \quad [2.5.5]$$

donde L designa el momento angular por unidad de área, I es la intensidad del haz incidente y ν su frecuencia. La dirección del momento angular es la misma que la de propagación del haz, y su sentido es igual u opuesto al sentido de propagación de la radiación según el haz esté polarizado a izquierdas o a derechas, respectivamente.

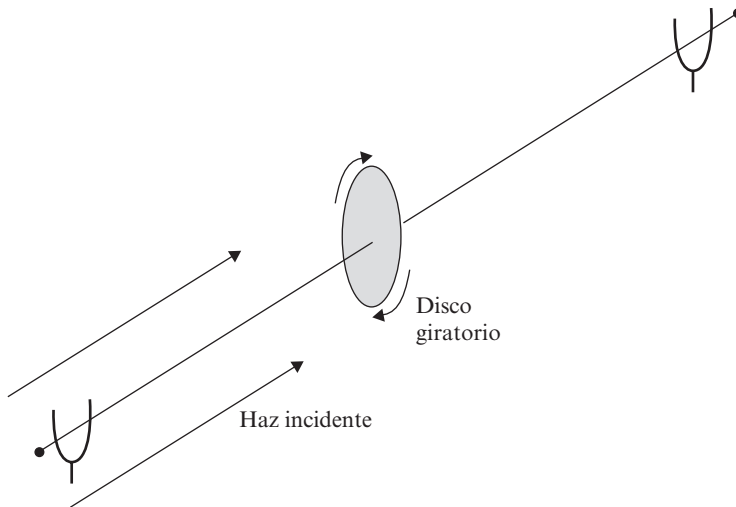


Figura 2.12. Momento angular de la radiación. Montaje esquemático.

Si se considera que el haz luminoso está formado por un flujo de N fotones idénticos que inciden en la unidad de tiempo sobre la unidad de área del disco, podemos obtener la expresión anterior admitiendo que cada fotón posee un momento angular asociado (espín)¹¹ igual a $h/2\pi$. En efecto, basta recordar [2.5.3] para escribir

¹¹ El término espín es la castellanización del vocablo inglés *spin*, que significa dar vueltas, girar.

$$|\mathbf{M}| = N \frac{h}{2\pi} = \frac{Nh\nu}{2\pi\nu} = \frac{I}{2\pi\nu} \quad [2.5.6]$$

en coincidencia con [2.5.5]. El momento angular asociado a la radiación fue medido por Beth en 1935 empleando un péndulo de torsión sumamente sensible.

Conviene señalar, no obstante, que una partícula puntual desplazándose con velocidad constante posee siempre un momento angular distinto de cero respecto a cualquier punto fuera de la recta que marca la dirección de su movimiento. Sin embargo, basta hacer un cambio adecuado en el origen de coordenadas del sistema de referencia elegido para anular L . Ahora bien, el espín del fotón no depende de la posición del origen de coordenadas, por lo que debe considerarse una propiedad intrínseca de la partícula. Una imagen intuitiva, aunque excesivamente simplista, la proporciona una pequeña esfera girando alrededor de un eje que pasa por su centro. Esta visualización del espín no es sostenible, sin embargo, dentro del esquema riguroso de la Mecánica Cuántica. Por otro lado, en el dispositivo ilustrado en la figura 2.12, si iluminamos el disco con luz circularmente polarizada a derechas, éste giraría en el sentido de las agujas del reloj, visto por un observador que mirase de frente a la onda incidente, y lo contrario sucedería cuando empleásemos luz polarizada a izquierdas. Esto puede justificarse formalmente asociando al fotón un espín igual a $-h/2\pi$ o $+h/2\pi$, según cual sea el sentido de giro del disco (nótese que ambos espines tienen el mismo módulo conforme a la ecuación [2.5.6]). Obsérvese también que la existencia de un momento angular asociado al fotón implica que en el proceso de emisión y absorción de radiación por una partícula cargada, además de producirse una variación en la energía y en el momento lineal de dicha partícula, ésta sufre un cambio en su momento angular igual a $\pm h/2\pi$ por cada fotón emitido o absorbido.

El lector puede preguntarse qué ocurriría si sobre nuestro disco giratorio incidiera luz linealmente polarizada. La respuesta podemos encontrarla haciendo uso de la interpretación ondulatoria clásica. En efecto, es bien conocido en óptica clásica que puede conseguirse luz linealmente polarizada mediante la superposición coherente (es decir, sumando las amplitudes) de cantidades iguales de luz circularmente polarizada a derechas y a izquierdas. Ahora bien, los momentos angulares asociados a cada uno de los sentidos de giro (dextrógiro o levógiro) de un haz circularmente polarizado tienen igual módulo pero signo contrario, por lo que el momento angular neto resultante de esta superposición equipartita sería, pues, cero. El disco no girará. La justificación de este último resultado, desde un punto de vista corpuscular, no es en absoluto tan simple. Téngase en cuenta que los fotones que forman el haz son todos idénticos, por lo que no tendría sentido afirmar que existe el mismo número de fotones con momentos angulares $+h/2\pi$ y $-h/2\pi$. Un tratamiento formalmente riguroso de este fenómeno se sale de los límites y el nivel del presente capítulo, por lo que no insistiremos más aquí sobre este punto.

EJERCICIOS

2.1. Considérese una fuente luminosa puntual de 1 W de potencia situada a 1 m de distancia de una superficie metálica. Estimar, empleando la teoría clásica, el intervalo

de tiempo que debería transcurrir entre la llegada de un cuanto de radiación al metal y la emisión de un fotoelectrón, suponiendo por sencillez que el electrón puede absorber toda la energía que incide sobre un círculo de radio igual al radio atómico ($\sim 1 \text{ \AA}$). *Dato:* la energía necesaria para extraer un electrón de la superficie del metal es 2.1 eV.

2.2. Demostrar que un electrón libre no puede absorber un fotón. Por sencillez, suponer que el electrón se encuentra inicialmente en reposo.

2.3. En una experiencia de efecto fotoeléctrico, se dispone de un material cuya función de trabajo vale w_0 . Consideramos que sobre dicho material incide un fotón emitido por un cuerpo negro que se halla a una temperatura T_0 cuya longitud de onda corresponde al máximo de la radiancia espectral. Hallar el momento máximo que puede tener el electrón arrancado (suponer energías relativistas).

2.4. Se desea determinar experimentalmente el valor de la constante de Planck y la función de trabajo w_0 de un cierto metal. Para ello se ilumina un fotocátodo de dicho material con luz monocromática de longitud de onda λ y se mide el potencial de frenado correspondiente, V_0 . Se encuentra que $V_0 = f_1$ para $\lambda = \lambda_1$, y $V_0 = f_2$ para $\lambda = \lambda_2$. Obtener h y w_0 en función de los datos conocidos.

2.5. En una colisión de tipo Compton se sabe que el fotón dispersado tiene una longitud de onda $\lambda_1 = 10^{-2} \text{ \AA}$ y el electrón de retroceso posee una energía $E = 1.34 \text{ MeV}$. Determinar el ángulo de dispersión del fotón saliente. *Dato:* se supone que el electrón está inicialmente en reposo.

2.6. ¿Cuál es el desplazamiento máximo que puede sufrir la longitud de onda de un fotón en una colisión de tipo Compton con un protón?

2.7. En una colisión de tipo Compton, el electrón y el fotón son dispersados formando ángulos de 70° y 30° , respectivamente, con la dirección del fotón incidente (se supone el electrón inicialmente en reposo). Hallar la energía del fotón incidente.

2.8. Un fotón de longitud de onda λ_0 sufre una colisión Compton siendo dispersado hacia atrás en sentido contrario al incidente. A continuación, incide sobre un fotocátodo de sodio en el que tiene lugar un efecto fotoeléctrico, siendo emitido el fotoelectrón con velocidad despreciable (umbral del efecto fotoeléctrico). Sabiendo que la función de trabajo del sodio es 2.1 eV, hallar λ_0 .

3

Dualidad onda-corpúsculo. Relaciones de indeterminación

Pedro M. Mejías

3.1. INTRODUCCIÓN

En el capítulo precedente nuestra atención se centró en probar que la luz, aun cuando clásicamente presentaba aspectos típicamente ondulatorios, sin embargo, en determinadas circunstancias, manifestaba un comportamiento corpuscular. La doble naturaleza ondulatoria-corpúscular que esto comporta para la radiación, en el presente capítulo veremos que es extensiva igualmente a partículas materiales, postulando la conexión formal que liga ambas descripciones. Se examinarán, además, los principales experimentos que confirmaron la bondad de dicha teoría. Finalmente, la revisión de las nociones clásicas de medida y de trayectoria de un corpúsculo nos conducirá a ciertas relaciones de indeterminación y al denominado principio de complementariedad, que se constituyen en piedras angulares de la estructura conceptual de la física cuántica.

3.2. DUALIDAD ONDA-CORPÚSCULO DE LA RADIACIÓN

En el capítulo anterior se mostraron ciertos fenómenos que exigieron una interpretación puramente corpuscular (cuántica) de la radiación. Existen, por otro lado, determinados procesos interferenciales y de difracción para cuya explicación es preciso hacer uso del formalismo ondulatorio derivado de la teoría electromagnética clásica. De hecho, estos procesos no encontrarían justificación en un marco puramente corpuscular. Contra lo que en principio pudiera parecer, ambas perspectivas, ondulatoria y corpuscular, no resultan irreconciliables, sino que, antes bien, constituyen, según pondremos de manifiesto a continuación, dos aspectos complementarios de una misma realidad conceptual. Así, en lo que sigue, y a partir del análisis detallado de la experiencia bien conocida en Óptica de la doble rendija de Young, concluiremos que una descripción completa de los fenómenos luminosos no puede llevarse a cabo más que conservando *ambos* aspectos. La paradoja resultante se resuelve mediante la introducción de algunas ideas cuánticas fundamentales.

Para este análisis es esencial, según veremos, poder manejar fuentes de luz de intensidad tan débil que emitan sólo algunos fotones por segundo. Una fuente de esta clase ya fue empleada por G. I. Taylor en 1909¹. Consideremos entonces el montaje esquema-

¹ G. I. Taylor era estudiante de la Universidad de Cambridge, y en sus experiencias empleó como fuente de luz una llama de gas que iluminaba una rendija después de atravesar varias placas de vidrio

tizado en la figura 3.1: la fuente emite luz monocromática que, tras atravesar sucesivamente la rendija situada sobre P_1 y la doble rendija (simétrica respecto del eje z) colocada en P_2 , alcanza el plano P_3 , sobre el que se encuentra una placa fotográfica. Se observa experimentalmente que si tapamos, por ejemplo, la rendija 2, la repartición luminosa sobre P_3 corresponde a la figura de difracción $I_1(x)$ producida por la rendija 1 que queda libre. Si bloqueásemos únicamente ésta, sobre P_3 obtendríamos la figura de difracción $I_2(x)$ de la rendija 2. Sin embargo, si mantenemos las dos rendijas abiertas, la distribución de intensidad, $I(x)$, en la placa fotográfica es la representada en la figura 3.1(b), esto es, el sistema familiar de franjas de interferencia de Young, cumpliéndose, además

$$I(x) \neq I_1(x) + I_2(x) \quad [3.2.1]$$

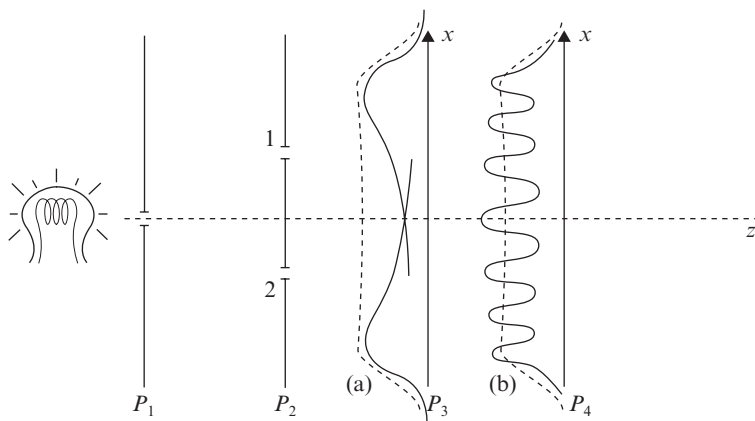


Figura 3.1. Experimento de la doble rendija de Young. Las rendijas son perpendiculares al plano de la figura, por lo que bastará considerar el problema bidimensional x, z . En (a) se representan las figuras de difracción producidas por cada rendija por separado. La línea a trazos da la suma de intensidades. En (b) se muestra la figura de interferencias cuando las dos rendijas permanecen abiertas.

Este resultado no es, en absoluto, sorprendente desde un punto de vista ondulatorio. De hecho, si denotamos por $E_1(x)$ y $E_2(x)$ las amplitudes del campo eléctrico producidas en el punto x por las rendijas 1 y 2, respectivamente², la intensidad sobre P_3 se calculará en la forma usual

$$I(x) \propto |E_1(x) + E_2(x)|^2 \quad [3.2.2]$$

ennegrecido, consiguiendo intensidades tan débiles que obligaban a tiempos de exposición de hasta tres meses.

² Consideraremos aquí que la luz emitida por la fuente es no polarizada, por lo que el carácter vectorial del campo eléctrico puede obviarse para nuestros propósitos.

Por otro lado, como

$$I_1(x) \propto |E_1(x)|^2 \quad ; \quad I_2(x) \propto |E_2(x)|^2 \quad [3.2.3]$$

es evidente de [3.2.2] que se cumple la desigualdad [3.2.1].

La justificación de lo anterior a partir de una descripción corpuscular de la radiación presenta, sin embargo, dificultades decisivas. Si dejamos a un lado, para simplificar, la existencia de figuras difraccionales³, podríamos intentar explicar la interferencia como una interacción entre los fotones que atraviesan la rendija superior y los que pasan al mismo tiempo por la inferior. Ahora bien, si se reduce la intensidad de la fuente de manera que los fotones lleguen de uno en uno a la placa fotográfica, éstos atravesarán también individualmente el plano P_2 , por lo que no podrá producirse ninguna interacción entre fotones distintos, y la figura interferencial debería, según esto, desaparecer.

Experimentalmente, se observa lo siguiente:

- a) Si el *tiempo de exposición* de la placa fotográfica es suficientemente largo, las franjas de interferencia se mantienen. Esto *descarta una descripción puramente corpuscular de la radiación*.
- b) Si el *tiempo de exposición* es suficientemente corto como para que incidan sobre la placa sólo unos cuantos fotones en total, cada uno de éstos producirá un impacto perfectamente localizado y no una figura interferencial débil. *Es preciso, por tanto, descartar una interpretación puramente ondulatoria de la radiación*.
- c) La distribución de impactos sobre la placa fotográfica es *aleatoria*, adquiriendo un aspecto continuo cuando su número es muy elevado.
- d) La *densidad* de impactos es proporcional a la intensidad $I(x)$ correspondiente a la figura interferencial. En otras palabras, según van alcanzando la placa, reconstruyen punto a punto las franjas de interferencia.

Puesto que la interacción entre fotones diferentes como causante de las interferencias ha quedado refutada, no se entiende entonces cómo puede afectar al comportamiento de un fotón que pasa por una de las rendijas el hecho de que la otra esté o no tapada.

Para profundizar en esta paradoja conviene que nos preguntemos de qué manera podemos asegurar que el fotón «*pasa*» por una determinada rendija. Para ello bastaría colocar un detector (por ejemplo, un fotomultiplicador) detrás de una de las rendijas, de forma que o bien el fotón es absorbido por éste o bien no se detecta nada, y, por tanto, necesariamente habrá pasado por la otra rendija. Ahora bien, al haber obstruido una de las rendijas, es evidente que no podrá formarse ninguna figura interferencial. Es decir, *al efectuar una medida para conocer la posición del fotón a su paso por las rendijas hemos modificado el sistema de manera fundamental. La medida ha perturbado, pues, el estado del sistema físico que se deseaba medir*.

³ Para justificar su presencia podrían argumentarse, en principio, colisiones de los fotones con los bordes de las rendijas, aunque un análisis detallado demostraría que esta hipótesis es insuficiente y no proporciona resultados acordes con la experiencia.

Un análisis más detallado de la experiencia que estamos considerando demostraría con total generalidad que *es imposible observar la figura de interferencias y conocer al mismo tiempo por cuál de las dos rendijas pasa cada fotón*. Carece de sentido, por tanto, afirmar en este ejemplo que el fotón «pasa» necesariamente por una rendija determinada.

Podemos concluir, en definitiva, que es imposible observar «a la vez» en nuestro experimento los aspectos corpuscular y ondulatorio de la radiación. Sin embargo, ambas descripciones han sido igualmente necesarias para explicar el fenómeno en su totalidad. Cuando la radiación es detectada actúa como corpúsculo, interaccionando de forma localizada. Por el contrario, cuando se propaga se comporta como una onda, distribuyéndose por todo el espacio, dando lugar a fenómenos interferenciales y difraccionales. Ambos modelos son, pues, complementarios. La descripción a emplear vendrá determinada en cada caso por el tipo de medición efectuada. Volveremos sobre todo esto más adelante.

A fin de aclarar estas ideas, Einstein propuso una *interpretación estadística de la dualidad onda-corpúsculo de la radiación*. Para establecer la conexión entre ambos modelos recordemos que en el experimento de la doble rendija que hemos analizado los impactos de los fotones se repartían sobre la placa fotográfica de manera aleatoria, confiriendo a ésta un aspecto moteado, en contraposición a lo esperable según la física clásica: en efecto, dado que, por hipótesis, todos los fotones son emitidos con idénticas condiciones iniciales, la distribución *aleatoria* de sus posiciones sobre P_3 rompe con la idea clásica, según la cual las condiciones iniciales *determinan* completamente el movimiento posterior de una partícula. Por otro lado, clásica y ondulatoriamente, la intensidad I de la radiación en un punto r , así como la energía del campo de radiación por unidad de volumen, son ambas proporcionales a $|E|^2$, donde E designa, como en [3.2.2], la amplitud del campo eléctrico asociado a la onda electromagnética (promediado sobre un período). Teniendo en cuenta las ideas cuánticas acerca de la radiación propuestas por él mismo, Einstein sugirió que la cantidad $|E|^2$ podría interpretarse como una *magnitud proporcional al número promedio de fotones por unidad de volumen*. Hemos dicho «promedio» porque su número exacto puede fluctuar en el tiempo y en el espacio debido a la naturaleza estadística de los procesos de emisión. Nótese que, a bajas intensidades, las fluctuaciones en torno al valor promedio son más apreciables, poniéndose entonces más claramente de relieve el carácter discontinuo cuántico de la radiación. De hecho, en el experimento de la doble rendija, la distribución de impactos sobre la placa al comienzo de la exposición presentará un aspecto moteado, pero conforme transcurra el tiempo, y el número de fotones incidentes aumente, las fluctuaciones serán cada vez menos significativas y dicha distribución tenderá a la prevista por el modelo ondulatorio clásico (figura interferencial de aspecto continuo).

De la interpretación de Einstein se desprende que $|E(\mathbf{r})|^2$ es, por tanto, proporcional a la probabilidad de que un fotón sea detectado, es decir, manifieste su presencia, en el punto r^4 . Para ilustrar esto consideremos, por ejemplo, una fuente *puntual* F que, desde

⁴ Aunque esta interpretación es útil y permite imaginar buen número de fenómenos interferenciales, conviene, sin embargo, manejarla con cierta cautela si no queremos incurrir en algunas inconsistencias. Este punto será precisado con más detalle en el capítulo 15. Por otro lado, no es estrictamente correcto asimilar $E(\mathbf{r}, t)$ al *estado* de un fotón. La definición cuántica rigurosa de estado de un conjunto de fotones sólo puede precisarse en el marco de una teoría a la vez cuántica y relativista como es la electrodinámica cuántica. Pero esto nos alejaría del propósito y del nivel de este libro.

un punto de vista ondulatorio, emite ondas esféricas cuya intensidad decrece con la inversa del cuadrado de su distancia a la fuente. De acuerdo con la interpretación de Einstein, de esa fuente partirán al azar fotones en todas direcciones con igual probabilidad, manteniéndose su número constante en promedio para cada elemento de ángulo sólido $d\Omega$ en cualquier dirección⁵ (véase figura 3.2). Ahora bien, como el área de la superficie esférica (de radio R , con centro en F) subtendida por $d\Omega$ aumenta con R^2 , el número promedio de fotones que atraviesa la unidad de superficie esférica será inversamente proporcional a R^2 , es decir, al cuadrado de la distancia a la fuente, en completo acuerdo con el resultado ondulatorio clásico. Además, si llamamos N al número *promedio* de fotones que cruzan la unidad de área en la unidad de tiempo, recordando que la energía de cada fotón es $h\nu$, podremos escribir

$$I = \varepsilon_0 |E|^2 \quad , \quad (\text{descripción ondulatoria}) \quad [3.2.4.a]$$

$$I = N h \nu \quad , \quad (\text{descripción corpuscular}) \quad [3.2.4.b]$$

donde ε_0 es la constante dieléctrica del vacío. Igualando ambas expresiones obtenemos

$$|E|^2 \propto N \quad [3.2.5]$$

que confirma la consistencia de la interpretación propuesta por Einstein. De hecho, la ecuación [3.2.5] expresa simbólicamente la conexión entre los modelos ondulatorio y corpuscular para la radiación. *Las ondas que aparecen en la descripción clásica pueden considerarse entonces como «ondas-guía» para los fotones, cuya intensidad nos da una medida relativa de la densidad promedio de fotones en cada punto.*

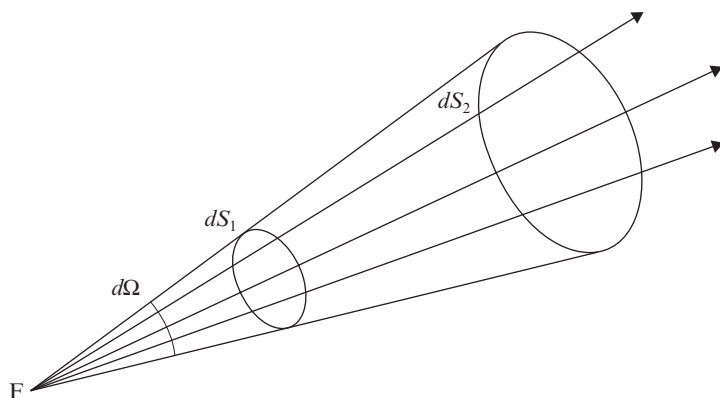


Figura 3.2. El número promedio de fotones que atraviesan las áreas dS_1 y dS_2 correspondientes a un ángulo sólido $d\Omega$ es el mismo, independientemente de su distancia a la fuente F . Obsérvese, no obstante, que el número de fotones por unidad de área que cruzan dS_1 y dS_2 es inversamente proporcional al valor de dichas áreas.

⁵ Téngase en cuenta que los fotones, como partículas, se propagan en línea recta, por lo que una vez emitidos por la fuente no se desviarán, o, lo que es lo mismo, no «saldrán» del elemento de ángulo sólido correspondiente.

3.3. POSTULADO DE DE BROGLIE. DUALIDAD ONDA-CORPÚSCULO DE LA MATERIA

Las ideas de Einstein acerca de la doble naturaleza de la radiación fueron extendidas a las partículas materiales en 1924 por el físico francés Louis-Victor de Broglie en la tesis doctoral que presentó en la Facultad de Ciencias de la Universidad de París. De Broglie supuso que la naturaleza debía comportarse de forma simétrica en cuanto a su doble carácter ondulatorio-corpúscular, tanto en lo que respecta a la radiación (fotones) como en lo referente a partículas de materia. Estaba convencido de que la dualidad onda-corpúsculo establecida por Einstein en su teoría de los cuantos de luz era absolutamente general, pudiendo ser extendida a todo el mundo físico, de manera que podría asociarse la propagación de una onda al movimiento de una partícula de cualquier clase. La idea de partícula de De Broglie fue asignar una cierta frecuencia característica a cada partícula material, al igual que Einstein hizo para los fotones. Esta frecuencia describiría, en principio, algún tipo de comportamiento periódico interno. Si igualamos la expresión de la energía deducida en la relatividad especial y la fórmula de Einstein $E = h\nu$, obtendremos

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = h\nu \quad [3.3.1]$$

donde m_0 y v denotan la masa en reposo y la velocidad de la partícula, respectivamente, y ν es la frecuencia a la que hacíamos referencia. De [3.3.1] se sigue inmediatamente

$$\nu = \frac{m_0 c^2}{h\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad [3.3.2]$$

A fin de compatibilizar su argumentación con los resultados de la relatividad especial, De Broglie se vio precisado a relacionar la frecuencia ν dada por [3.3.2] no directamente con la del hipotético proceso periódico interno, sino con una onda, en analogía con la onda-guía de Einstein, que viajase con la partícula manteniendo en todo momento su fase en coincidencia con la de dicho proceso interno. Sin entrar en más detalles acerca de la deducción desarrollada por De Broglie⁶, éste estableció para la materia las mismas ecuaciones que las postuladas para la radiación, es decir,

$$E = h\nu \quad [3.3.3]$$

$$p = h/\lambda \quad [3.3.4]$$

donde ahora λ y ν designan, respectivamente, la longitud de onda y la frecuencia de la onda asociada a una partícula material de momento lineal (en módulo) p y energía E . Es importante recalcar que las anteriores ecuaciones son igualmente válidas en los dominios

⁶ Aunque razonadas, las ecuaciones establecidas por De Broglie no dejan de ser un postulado cuya validez deberá confirmarse con los experimentos.

relativista y no relativista. En cada caso, sin embargo, habrá que escribir en la forma adecuada la relación entre E y p . Señalemos asimismo que, al igual que sus equivalentes en el caso de la radiación, las ecuaciones [3.3.3J] y [3.3.4] establecen la conexión entre los comportamientos ondulatorio y corpuscular, en este caso de la materia. Por ello y a pesar de sus limitaciones, principalmente en lo concerniente a la interpretación de las ondas de materia y su aplicabilidad general, la teoría de De Broglie ha desempeñado un papel crucial en la fundamentación de la física cuántica.

Aunque, formalmente, las expresiones [3.3.3] y [3.3.4] muestran una completa simetría con las correspondientes ecuaciones para la radiación, conviene, sin embargo, ser prudentes en la aplicación de esta similitud si no queremos incurrir en graves errores. Por ejemplo, en el caso de la radiación, E y p están relacionados mediante la igualdad

$$E = pc \quad [3.3.5]$$

Sin embargo, si se trata de partículas materiales que se desplazan libremente con velocidades no relativistas, su energía viene dada en función del momento lineal por medio de la bien conocida ecuación

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad [3.3.6]$$

Esto conlleva que las relaciones entre ω y k para radiación (propagándose en el vacío) y para la materia sean muy diferentes. En efecto, el lector puede comprobar inmediatamente (véase ejercicio 3.1) que se cumple

$$\omega = kc \quad , \quad (\text{radiación}) \quad [3.3.7.a]$$

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad , \quad (\text{materia}) \quad [3.3.7.b]$$

donde hemos escrito $\hbar \equiv h/2\pi$ (con esta notación $E = \hbar\omega$ y $p = \hbar k$)⁷. Esto implica que en el primer caso no existe dispersión, es decir, $d^2\omega/dk^2 = 0$, mientras que en el segundo $d^2\omega/dk^2 = \hbar/m$, lo que lleva aparejado, según se explicará en el capítulo 7, un ensanchamiento de la onda asociada a la partícula, cosa que no ocurre para haces luminosos.

La idea de De Broglie de asociar una onda a una partícula material, aunque conduce a resultados experimentales correctos, no nos dice nada, sin embargo, acerca de la naturaleza de dicha onda. En el caso de la radiación, ya vimos cómo Einstein proporcionó una interpretación estadística plausible en términos del módulo al cuadrado del campo eléctrico, solución de las ecuaciones clásicas de Maxwell. Esta analogía fue trasladada años después por Max Born a las ondas de materia. Pero para ello necesitó apoyarse en la generalización cuantitativa del postulado de De Broglie llevada a cabo por Schrödinger, que marcó el comienzo de la denominada mecánica cuántica. Todo esto será estudiado

⁷ A \hbar se la denomina habitualmente constante reducida de Planck.

con detalle en los capítulos 6 y 7, por lo que aplazaremos hasta entonces lo que será la interpretación probabilística de las ondas asociadas a las partículas materiales.

En el capítulo anterior, aunque no se hizo mención explícita de ello, se consideraron ondas de radiación cuya frecuencia y longitud de onda se suponían perfectamente definidas. Sin embargo, los haces luminosos que habitualmente se manejan son de extensión y duración finitas, para cuya representación, como es bien conocido en Óptica, es preciso abandonar el modelo de la onda plana, sustituyéndolo por otro en el cual el haz, que denominaremos paquete de ondas, viene expresado como superposición continua de ondas con distintos números de onda $k = 2\pi/\lambda$. Como se sabe, la velocidad con que se desplaza el paquete en su conjunto se denomina velocidad de grupo, v_g , y viene dada por la expresión

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad [3.3.8]$$

En el vacío $v_g = c$, según se desprende de [3.3.7.a]. La situación es análoga en el caso de ondas de materia; por tanto, la velocidad de grupo asociada a una partícula también vendrá expresada por [3.3.8]. Para ilustrar su significado físico consideremos, por ejemplo, una partícula libre no relativista desplazándose con velocidad v . Su energía y momento estarán entonces relacionados mediante [3.3.6]. Recordando, además, [3.3.7.b] y la ecuación de De Broglie $p = h/\lambda = \hbar k$, se obtiene inmediatamente

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v \quad [3.3.9]$$

es decir, la velocidad de grupo coincide con la velocidad lineal de la partícula en cuestión, lo que tiene perfecto sentido físico. Un resultado equivalente se obtendría igualmente en el caso relativista. Volveremos sobre este punto en el capítulo 6.

El lector se preguntará cuál es el orden de magnitud de la longitud de onda asociada a un cuerpo macroscópico. Podemos estimarla inmediatamente a partir de [3.3.4]. Si consideramos, por ejemplo, una pelota de masa $m = 66 \text{ g}$ moviéndose a una velocidad de $10 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, tendremos

$$\lambda \sim \frac{6.6 \times 10^{-34}}{66 \times 10^{-3} \times 10} m = 10^{-33} m = 10^{-23} \text{ \AA}$$

que es una cantidad inaccesiblemente pequeña⁸.

Tomemos ahora un neutrón (partícula sin carga de masa similar a la del protón) moviéndose con una velocidad v del mismo orden que la debida a la agitación térmica a temperatura ambiente ($T \sim 300 \text{ K}$). La longitud de onda de tales neutrones térmicos resulta ser

$$\lambda \sim 1.4 \text{ \AA}$$

⁸ Téngase en cuenta que el tamaño de los núcleos atómicos es del orden de 10^{-5} \AA .

es decir, similar al tamaño típico de los átomos, o también a la separación entre átomos en una red cristalina.

Por último, si aceleramos un haz de electrones mediante una diferencia de potencial V , la energía cinética que éstos alcanzarán será (suponiendo velocidades no relativistas)

$$E = \frac{p^2}{2m_e} = eV = 1.6 \times 10^{-19} \text{ V julios} \quad [3.3.10]$$

de donde se obtiene

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}} \sim \frac{12.25}{\sqrt{V}} \text{ \AA} \quad [3.3.11]$$

Así, si la diferencia de potencial es del orden de algunos miles de voltios, la longitud de onda asociada a estos electrones será comparable con la de un haz de rayos X.

Es importante señalar que así como la óptica geométrica constituye una aproximación de la óptica ondulatoria basada en las ecuaciones de Maxwell en el límite de pequeñas longitudes de onda, la mecánica clásica puede considerarse una aproximación de la mecánica cuántica cuando las longitudes de onda de De Broglie asociadas tienden a cero (o también cuando $h \rightarrow 0$), como sucede en el límite macroscópico. Este paralelismo se hace todavía más patente si se tiene en cuenta que ambas teorías, óptica geométrica y mecánica clásica, pueden derivarse de sendos principios de mínimo.

En efecto, según el principio de Fermat, la trayectoria real recorrida por un rayo de luz monocromática para ir desde un punto A a otro B es aquella que hace estacionario el camino óptico entre dichos puntos, es decir, la cantidad

$$\int_A^B n(\mathbf{r}, \nu) ds = \frac{c}{\nu} \int_A^B \frac{ds}{\lambda(\mathbf{r}, \nu)} \quad [3.3.12]$$

donde $n(\mathbf{r}, \nu)$ es el índice de refracción del medio, en general función de \mathbf{r} (medios inhomogéneos) y de ν (medios dispersivos), s es la longitud a lo largo del rayo y λ la longitud de onda de la radiación.

Por otro lado, según el principio de mínima acción, la trayectoria real seguida por una partícula de masa m y energía E sometida a un potencial $V(\mathbf{r})$ para ir desde A hasta B es aquella que hace estacionaria la acción, esto es, la integral

$$\int_A^B p(\mathbf{r}, E) ds = 0 \quad [3.3.13]$$

donde s representa de nuevo la longitud tomada sobre la trayectoria de la partícula y p es su momento lineal, función de la posición [debido al potencial $V(\mathbf{r})$] y de la energía total E a través de la ecuación

$$p = \sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))} \quad [3.3.14]$$

La similitud entre las expresiones [3.3.12] y [3.3.13] es evidente. De hecho, Hamilton, a mediados del siglo pasado, pensó en la posibilidad de una formulación conjunta de la mecánica clásica y la óptica. Pero además de la comparación entre ambas expresiones vemos que las trayectorias clásicas de las partículas pueden identificarse formalmente con los rayos de un haz de luz propagándose según la óptica geométrica si se cumple la relación

$$p(\mathbf{r}, E) = \frac{A}{\lambda(\mathbf{r}, v)} \quad [3.3.15]$$

donde el parámetro A dependería, en general, de v . El lector habrá observado inmediatamente que [3.3.15] tiene precisamente la misma forma que la relación [3.3.4] postulada por De Broglie. El alcance de esta analogía aparecerá con más claridad cuando analicemos en su momento la denominada ecuación de Schrödinger (véase capítulo 6).

3.4. CONFIRMACIÓN EXPERIMENTAL DEL POSTULADO DE DE BROGLIE

Al igual que el carácter ondulatorio de la radiación se ponía de manifiesto al observar fenómenos interferenciales y difraccionales, la naturaleza ondulatoria de la materia tendrá que ser corroborada mediante experimentos del mismo tipo. En este sentido, es importante recordar de la óptica clásica que los efectos difraccionales se hacen apreciables cuando el tamaño de la abertura difractante (o la dimensión característica de la estructura difractante) sobre la que incide un haz es comparable a su longitud de onda. En nuestro caso, al tratarse de partículas materiales, la longitud de onda asociada vendrá dada en función de su momento lineal mediante la ecuación [3.3.4]. Si manejamos objetos macroscópicos, vimos que su longitud de onda era inconmensurablemente pequeña, de manera que no existen en la naturaleza estructuras con dimensiones características tan pequeñas como aquélla. Por eso, los efectos de tipo ondulatorio producidos por estos cuerpos son completamente inobservables. Sin embargo, otros objetos materiales, tales como electrones, protones, neutrones, etc., desplazándose a velocidades no excesivamente elevadas poseen longitudes de onda comparables con las dimensiones atómicas o nucleares, por lo que deberían producirse fenómenos de carácter ondulatorio si empleásemos aparatos con aberturas o estructuras así de pequeñas. Afortunadamente, no es necesario fabricar rendijas de 1 Å de anchura, ya que la propia naturaleza se encarga de proporcionárnoslas. Nos estamos refiriendo a los sólidos cristalinos, los cuales presentan una estructura interna de tipo reticular cuya separación entre centros dispersores contiguos es justamente del orden del angstrom. En 1926, W. Elsasser sugirió para probar el comportamiento ondulatorio de la materia el mismo tipo de experimentos que los empleados para demostrar la naturaleza ondulatoria de los rayos X. Las experiencias realizadas en 1927 por Davisson y Germer, e independientemente por G. P. Thomson, en esta dirección confirmaron brillantemente esta idea. De ellas nos ocupamos a continuación.

El dispositivo experimental utilizado por Davisson y Germer está esquematizado en la figura 3.3. Los electrones son emitidos por un filamento de wolframio calentado, W, y acelerados mediante una diferencia de potencial V hasta alcanzar, a la salida del cañón de

electrones, una velocidad prefijada, que puede controlarse a voluntad a través de V . El haz emergente H incide sobre una capa especialmente preparada de un monocristal de níquel ${}^9\text{N}$, y los electrones reflejados son capturados por un colector C conectado a un galvanómetro G. El colector puede girar con respecto a la dirección del haz colocándose el sistema en el mismo plano, de forma que pueden recogerse electrones reflejados según diferentes ángulos. Todo el sistema es mantenido en alto vacío. Midiendo la intensidad de la corriente registrada por el galvanómetro se infiere la intensidad del haz electrónico reflejado en la dirección analizada.

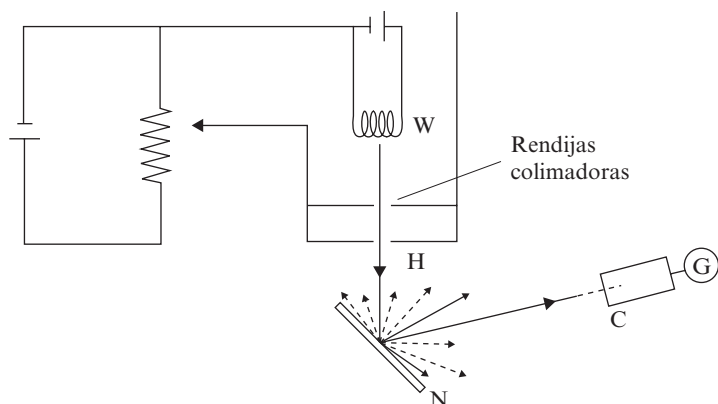


Figura 3.3. Esquema del dispositivo experimental empleado por Davisson y Germer.

Desde un punto de vista conceptual, si admitimos el carácter ondulatorio de los electrones con una longitud de onda asociada dada por [3.3.11], el experimento anterior es enteramente equivalente al fenómeno de la reflexión de rayos X por un cristal según el modelo de Bragg, cuya idea central ya fue mostrada en la sección 2.4 del capítulo anterior (véase también la figura 2.7). La expresión final resultante que nos daba la dirección φ de los máximos de intensidad en términos de la longitud de onda del haz incidente y de la distancia interplanar, d , de la red cristalina era (recordar [2.4.1])

$$n\lambda = 2d \operatorname{sen} \varphi \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [3.4.1]$$

donde ahora λ viene dada en función de V a través de [3.3.11]. A efectos de comprobación experimental pueden seguirse dos procedimientos: fijar λ y girar el cristal para asegurarse que los máximos de intensidad se obtienen para los ángulos φ_n que cumplen [3.4.1], o bien, fijar φ y variar de manera continua la longitud de onda, observando que encontramos los máximos para aquellas λ_n que verifican [3.4.1]. En el caso de la radiación de rayos X se siguió el primer procedimiento, mientras que en el caso de los electrones se empleó el segundo, debido a que resultaba más sencillo cambiar a voluntad λ modificando el

⁹ El cristal de níquel posee estructura cúbica, y la cara que se utilizó en el experimento había sido cortada oblicuamente respecto de los planos de simetría del cristal.

potencial acelerador V . Los resultados experimentales se muestran en la figura 3.4 para un ángulo $\varphi = 80^\circ$. Se aprecia que para valores de n elevados ($n \geq 7$) el acuerdo entre teoría y experimento es muy bueno. Sin embargo, para $n \leq 5$ aparece una cierta discrepancia, si bien se mantienen los picos pronunciados de intensidad. La explicación de esta divergencia se basa en que al escribir [3.4.1] no hemos tenido en cuenta el hecho de que la onda asociada al electrón se propaga en un medio (cristal) distinto del vacío. Recuérdese que en el esquema mostrado en la figura 2.7 no considerábamos por sencillez la refracción que se producía en la cara de entrada al cristal. Puede demostrarse que, tras la oportuna modificación de la ecuación [3.4.1], el ajuste cuantitativo con los datos experimentales es el correcto.

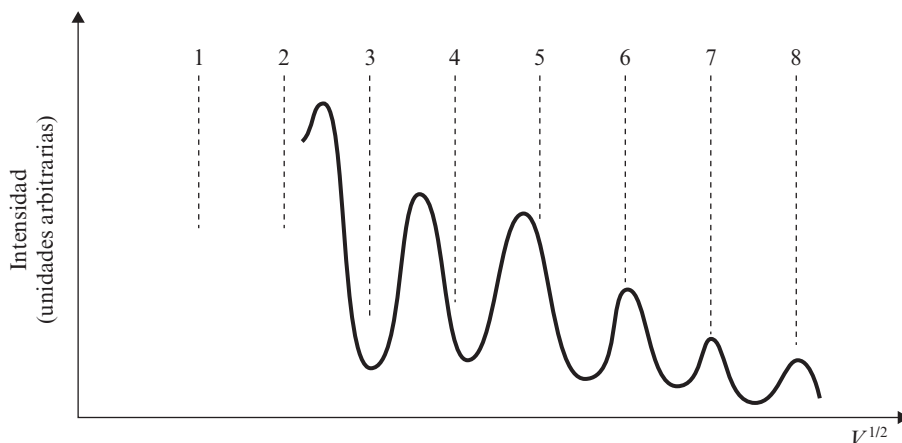


Figura 3.4. Reflexión de electrones por un monocristal de níquel. El trazo continuo muestra la curva experimental, y las líneas a trazos verticales señalan las posiciones de los máximos de intensidad previstas según la fórmula de Bragg [3.4.1].

En la estructura cristalina representada en la figura 2.7, además de las superficies parcialmente reflectantes (planos atómicos paralelos a la cara del cristal) que se muestran en ella, los átomos distribuidos regularmente también pueden agruparse imaginariamente en otros planos orientados según ciertas direcciones (véase figura 3.5). En todos estos casos son de aplicación igualmente los mismos principios físicos sobre los que se apoya la reflexión de Bragg, sólo que ahora la distancia efectiva interplanar dependerá de la red concreta que estemos considerando.

Así, en el esquema ilustrado en la figura 2.7, un haz incidiendo *perpendicularmente* sobre la cara del cristal dará lugar a un haz reflejado en la misma dirección y sentido contrario. Si consideramos, sin embargo, como planos reflectantes los mostrados en la figura 3.6, el haz reflejado se propagaría en dirección distinta a la de incidencia. Apoyándose en esto, Davisson y Germer llevaron a cabo otra serie de experiencias en las cuales el haz de electrones era dirigido perpendicularmente a la superficie de un monocristal de níquel tallada formando un determinado ángulo con los ejes de simetría del cristal. Man-

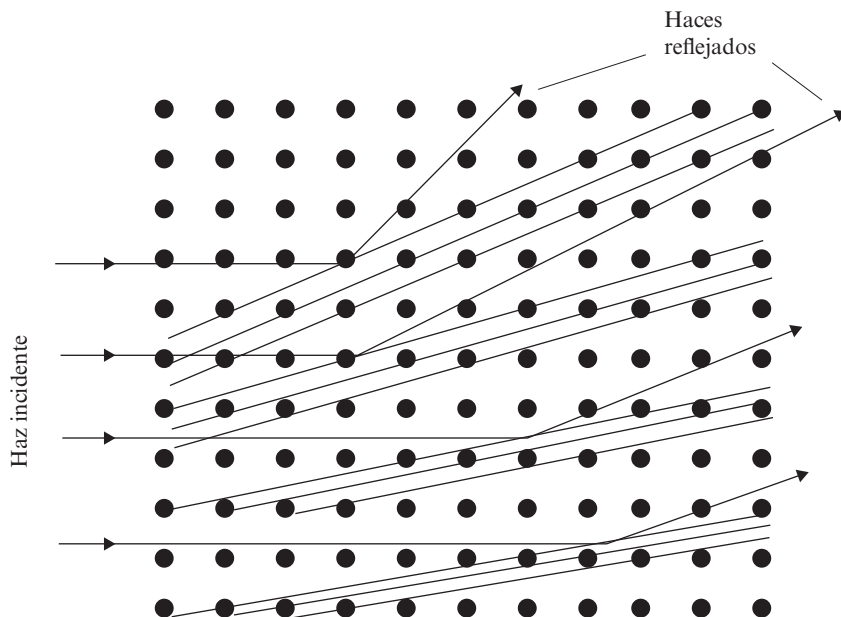


Figura 3.5. Reflexiones de Bragg en una red cristalina. Los elementos de la red pueden agruparse a lo largo de superficies planas según distintas direcciones.

teniendo fija esta posición del cristal respecto del haz incidente, se recogía la intensidad del haz reflejado según diferentes direcciones para diversos valores del potencial acelerador. Los resultados experimentales en forma de diagramas polares se muestran en la figura 3.7. Se observa inmediatamente un pico muy acusado, de hecho es el máximo absoluto, para un ángulo $\theta = 50^\circ$ entre las direcciones de los haces incidente y reflejado, con un valor de $V = 54$ V. Teniendo en cuenta (véase figura 3.6) que $\theta = 2\alpha$, midiendo experimentalmente la distancia interplanar efectiva mediante un haz de rayos X, y haciendo uso de la ecuación [3.4.1] corregida para incluir el índice de refracción del medio, Davisson y Germer obtuvieron un valor de $\lambda = 1.65 \text{ \AA}$, en excelente acuerdo con el previsto por la teoría de De Broglie, que era igual, según [3.3.11], a 1.67 \AA . Esto proporcionó una impresionante confirmación cuantitativa de dicho postulado y, en particular, de la relación entre λ y p .

Realmente, el procedimiento que acabamos de describir es conceptualmente análogo al propuesto por Laue, mediante el cual fue posible observar la interferencia de rayos X a través de cristales: se enviaba un haz estrecho de radiación X de espectro continuo sobre un sólido cristalino, y se registraba el haz emergente por medio de una placa fotográfica. De esta forma no era necesario variar el ángulo ni la longitud de onda del haz incidente. De hecho, la placa recogía simultáneamente los máximos de intensidad para aquellas direcciones de salida y longitudes de onda que satisficieran las correspondientes condiciones de interferencia constructiva. Desgraciadamente, el mismo esquema no puede utilizarse en el caso de electrones, debido a que todos son emitidos aproximadamente con la misma energía, o, a lo sumo, presentan una estrecha distribución de velocidades en torno a su

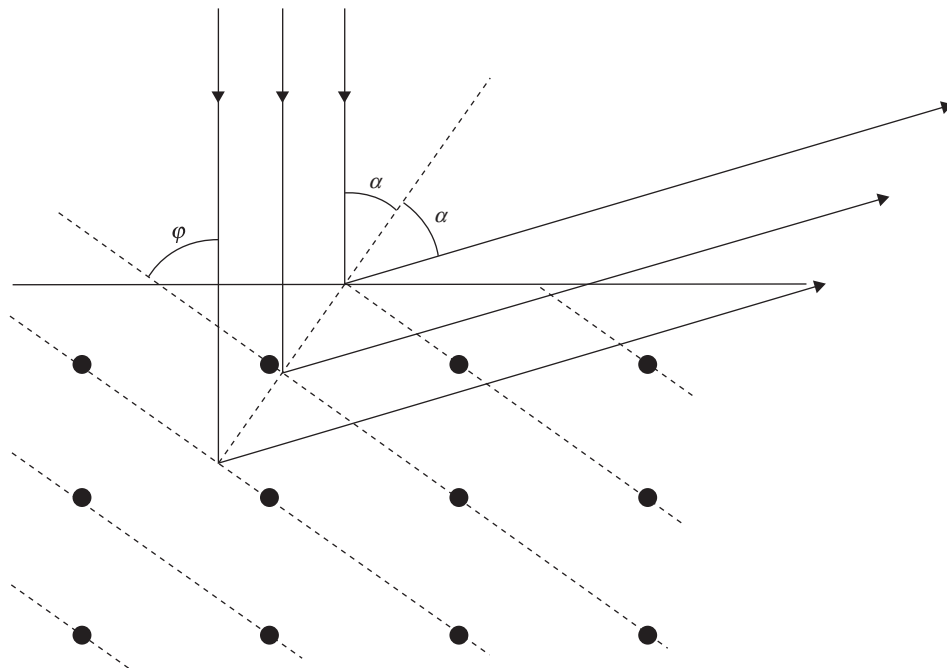


Figura 3.6. Reflexión de electrones en un cristal en dirección distinta a la de incidencia. En la figura se cumple $\varphi + \alpha = \pi/2$.

valor promedio. El montaje de Davisson y Germer es, precisamente, una forma ingeniosa de resolver este inconveniente.

El segundo procedimiento experimental al que hacíamos referencia al comienzo de este apartado fue desarrollado por G. P. Thomson¹⁰, y se basaba en la difracción de haces de electrones al pasar a través de láminas delgadas constituidas por un agregado de pequeños cristales metálicos (oro, cobre, aluminio, etc.) orientados aleatoriamente. La experiencia es similar al método de Debye-Scherrer en su estudio interferencial con rayos X. El esquema del experimento se muestra en la figura 3.8. Un haz de electrones rápidos con energías superiores a los 10 keV (si se utilizasen electrones lentos, al ser sustancias metálicas la absorción sería muy elevada) atraviesa la lámina, y el haz difractado resultante se registra por medio de una placa fotográfica. Dada la repartición aleatoria de los microcristales, de entre ellos siempre existirán algunos formando, respecto del haz incidente, un ángulo que verifique una condición de tipo Bragg. Por consiguiente, el haz de electrones se reflejará constructivamente en tales cristales. Teniendo en cuenta la simetría de nuestro problema, es fácil imaginar que, para cada valor de φ satisfaciendo la ecuación de Bragg, el haz emergente correspondiente a dicho máximo interferencial recorrerá la superficie de

¹⁰ Su padre, J. J. Thomson, descubrió en 1897 el electrón, asignándole características de partícula mediante el establecimiento preciso de su relación carga/masa.

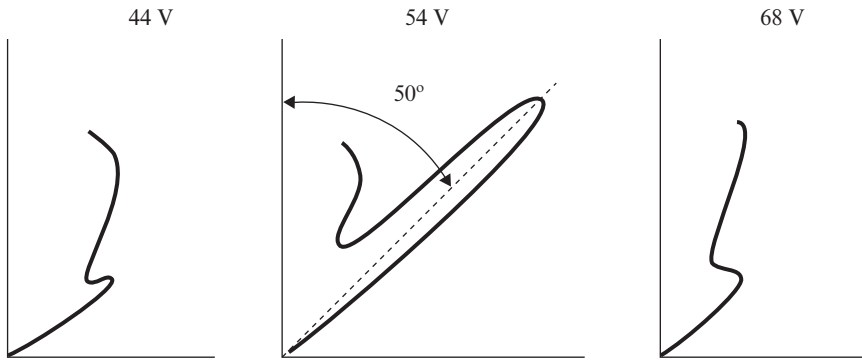


Figura 3.7. Diagramas polares mostrando la intensidad del haz reflejado para tres valores del potencial acelerador: sobre cada dirección, formando con el eje vertical un ángulo θ , se ha llevado un segmento proporcional a la intensidad del haz reflejado para dicho valor θ del ángulo de dispersión.

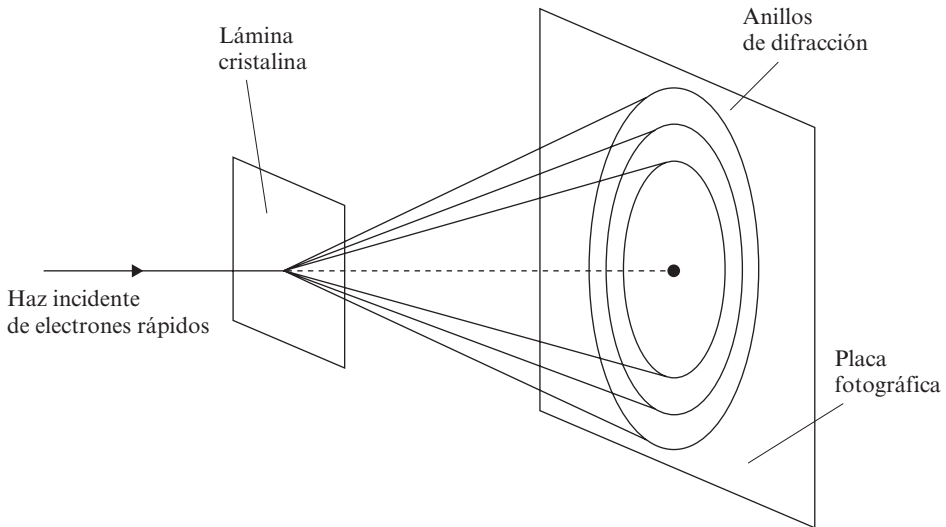


Figura 3.8. Difracción de electrones por un agregado cristalino. Experimento de G. P. Thomson.

un cono, de forma que su proyección sobre el plano de la placa dará lugar a una serie de anillos concéntricos bien definidos. Para distinguir si tales anillos son generados por electrones o por rayos X secundarios producto de la interacción de aquéllos con el material, basta aplicar un campo magnético tras la lámina: se observa que la figura de interferencias se desplaza y destruye, cosa que no sucedería si se tratase de rayos X, al no sufrir éstos alteración alguna por campos magnéticos. Además, G. P. Thomson verificó cuantitativamente sus resultados, comprobando en todo momento que el acuerdo con las relaciones de de Broglie era totalmente satisfactorio.

Con posterioridad se han repetido experimentos de esta clase con otras partículas materiales más pesadas y complejas. Por ejemplo, en 1930, Estermann, Stern y Frisch emplearon haces atómicos de helio y haces moleculares de hidrógeno sobre cristales de fluoruro de litio. En todos los casos las predicciones del modelo de de Broglie fueron confirmadas plenamente. El comportamiento dual de la materia quedó, pues, definitivamente establecido.

Las propiedades ondulatorias de los electrones sugieren su utilización en microscopía de muy alta resolución. En efecto, los electrones acelerados por encima de los 60 kV poseen longitudes de onda asociadas inferiores a 0.05 \AA . Dado que el poder de resolución de un microscopio aumenta conforme disminuye la longitud de onda del haz iluminador (sea de radiación o constituido por partículas materiales), los haces de electrones pueden emplearse en lugar de radiación en los instrumentos de aumento denominados microscopios electrónicos, nombre asignado por su analogía con los microscopios ópticos. En el presente caso, la combinación de determinados campos eléctricos y magnéticos puede actuar a modo de lente para enfocar electrones u otras partículas cargadas. A partir del año 1935, en el cual fue construido el primer microscopio electrónico comercial, esta clase de dispositivos viene experimentando un continuo avance tecnológico, habiéndose logrado alcanzar resoluciones espaciales del orden del angstrom.

Fundamentalmente, un microscopio electrónico (de transmisión) lo componen: *a*) una fuente de electrones, constituida esencialmente por un filamento de wolframio calentado, con forma de V; *b*) una lente condensadora, que regula la intensidad y la abertura angular del haz electrónico; *c*) un sistema formador de imagen, el cual enfoca los electrones que atraviesan la muestra que se desea aumentar a fin de formar una imagen real de la misma muy ampliada, y *d*) un sistema de registro de imágenes, que convierte la imagen electrónica en algo perceptible al ojo humano o posibilita su registro permanente. Es necesario, además, un adecuado sistema de vacío, así como disponer de fuentes eléctricas de alimentación cuidadosamente estabilizadas. De otra forma, la aberración cromática generada por el sistema de lentes podría llegar a ser importante.

Las aplicaciones de la microscopía electrónica abarcan dominios muy amplios: desde el análisis de virus y moléculas proteínicas de interés en las investigaciones sobre el cáncer, microbiología y botánica, hasta el estudio de defectos en metales y estructuras cristalográficas, de utilidad en geología, metalurgia y física de los materiales. En todas ellas su contribución ha sido y sigue siendo fundamental. Señalemos finalmente la existencia de diversas variantes del microscopio electrónico, las cuales emplean protones o iones positivos para conseguir mejorar aún más la resolución, dadas las longitudes de onda inferiores asociadas a tales partículas.

3.5. PRINCIPIO DE INDETERMINACIÓN

Cuando analizábamos el experimento de la doble rendija de Young con fuentes de radiación, observamos que para discriminar por cuál de las dos rendijas había pasado un determinado fotón estábamos obligados a perturbar el sistema, modificando, consecuentemente, la figura de interferencias sobre la placa fotográfica. Asimismo, la distribución de impactos originados por la interacción de cada uno de los fotones con dicha placa vimos que, para tiempos cortos, mostraba un aspecto aleatorio. Como señalamos entonces, esto contradecía el determinismo clásico, según el cual a partir de la posición y la

velocidad inicial de una partícula en un cierto instante, conocidas las fuerzas externas, se estaba en condiciones de calcular exactamente su trayectoria (posición y momento) posterior¹¹. De acuerdo con el postulado de De Broglie, si en lugar de fotones la fuente emitiese electrones u otras partículas materiales, los resultados del experimento serían similares para las longitudes de onda asociadas a cada objeto material y las consideraciones anteriores permanecerían igualmente válidas. De hecho, se han realizado experiencias de esta clase con electrones y neutrones.

Clásicamente, no resulta sorprendente que al efectuar una medida se interactúe con el sistema. Sin embargo, implícitamente, se admite que la perturbación ejercida es despreciable¹² y no afecta al movimiento posterior de dicho sistema. Esto tiene perfecto sentido cuando, por ejemplo, iluminamos un objeto macroscópico tal como una pelota a fin de determinar su posición (recuérdese el valor tan pequeño de la presión de la radiación). De hecho, manteniéndolo iluminado podemos seguir, punto por punto, la evolución de un cuerpo macroscópico sin modificar de manera perceptible su recorrido. Esta situación, sin embargo, no es equiparable a la que se da cuando tratamos de conocer con exactitud la posición y el momento de, por ejemplo, un electrón. En tal caso, recuérdese el efecto Compton, su interacción con el fotón que le ilumina puede hacer cambiar completamente su trayectoria inicial. Es más, el momento lineal de la partícula después de la colisión puede ser cualquiera con tal que satisfaga las correspondientes leyes de conservación. Surge entonces la pregunta: ¿podemos conocer *simultáneamente* la posición y el momento de una partícula con total precisión? Siguiendo a Heisenberg, para el cual cualquier argumento físico tiene sentido sólo si maneja magnitudes *observables* experimentalmente, podremos hablar de posición y momento de un electrón si somos capaces de idear un experimento en el cual ambas magnitudes puedan *medirse a la vez*.

Con este propósito, consideremos el siguiente experimento imaginario propuesto por Bohr: para medir con la mayor precisión posible la posición de un electrón, que supondremos puntual, utilizaremos un microscopio, consistente en su forma más simple en una lente y una placa fotográfica que registrará la imagen de la partícula (véase figura 3.9). Según apuntamos antes, para poder localizar al electrón es necesario iluminarlo, ya que lo que ve el observador (o la placa) son justamente los fotones dispersados por él. Con el fin de perturbar lo menos posible al electrón, y así poder determinar más precisamente su momento, supondremos que observamos dicho electrón a partir de un solo fotón dispersado. Ahora bien, el fotón es registrado siempre que penetre por la lente, independientemente de su dirección concreta. Dicho de otro modo, la componente x del momento de un fotón que impacte sobre la placa estará comprendida entre $p \sin \theta$ y $-p \sin \theta$, donde $p = h/\lambda$, siendo λ la longitud de onda del fotón incidente. Por la ley de conservación del momento lineal, el electrón habrá sufrido, a resulta de la colisión Compton, un cambio en su componente x igual en módulo y de signo contrario al experimentado por el fotón, es

¹¹ El tratamiento estadístico que se aplica en la mecánica estadística clásica es simplemente un instrumento de manejo de sistemas muy complicados. Las leyes básicas de la física que rigen los movimientos de cada partícula individual en tales sistemas (leyes de Newton) siguen siendo completamente deterministas.

¹² Clásicamente también, se admite que la perturbación pueda ser finita, siempre que el cambio pueda ser calculable aunque modifique el movimiento del sistema.

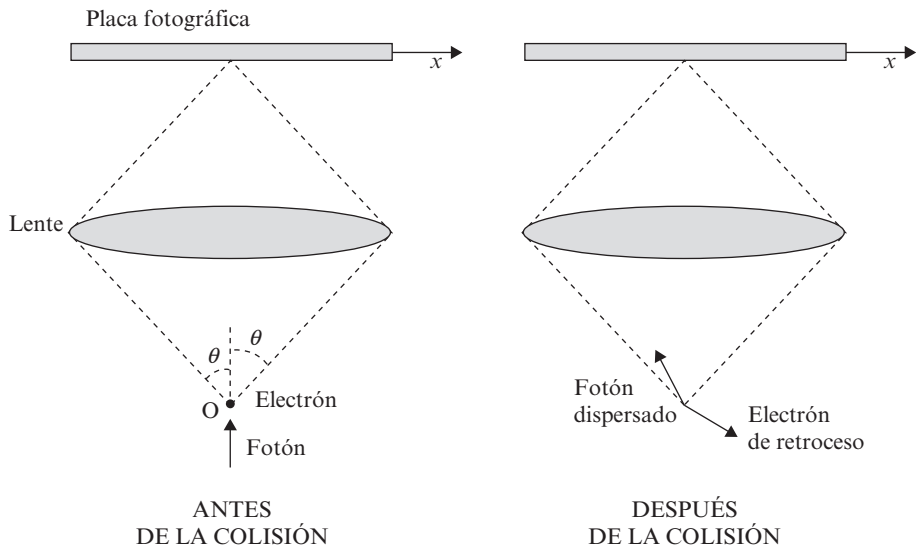


Figura 3.9. Experimento de Bohr. θ es el semiángulo máximo subtendido por la lente desde O.

decir, después de la interacción quedará indeterminado su momento p_x en una cantidad Δp_x igual a

$$\Delta p_x \sim 2(h/\lambda) \text{ sen } \theta \quad [3.5.1]$$

Por otro lado, es bien conocido en Óptica que en los instrumentos ópticos, en particular en un microscopio, la imagen de un objeto puntual no es estrictamente otro punto, sino una pequeña figura de difracción centrada en la imagen geométrica paraxial del objeto anterior. Esto se produce siempre como consecuencia inevitable de la existencia de aberturas u orificios de tamaño finito en el instrumento, los cuales difractan la *onda* incidente. La imagen del electrón se verá, pues, borrosa, no pudiendo, en consecuencia, precisarse más allá del límite de resolución del aparato el lugar exacto alrededor del eje del microscopio del cual proviene el fotón iluminador tras la colisión Compton. Denominando θ al semiángulo¹³ subtendido por la lente desde O, se demuestra en los textos de Óptica que la resolución del microscopio en la dirección x vale entonces

$$\Delta x \sim \lambda/2 \text{ sen } \theta \quad [3.5.2]$$

En la expresión anterior Δx proporciona, pues, el límite de precisión con que podemos determinar la posición del electrón en términos de la longitud de onda de la radiación iluminadora y de la abertura angular del microscopio. Las relaciones [3.5.1] y [3.5.2] nos

¹³ Este ángulo suele denominarse abertura angular del microscopio.

indican, en consecuencia, el camino a seguir para mejorar la precisión en la posición y el momento del electrón: empleando, por ejemplo, rayos γ , muy energéticos, o bien aumentando el tamaño de la lente, podríamos conocer con mayor exactitud la posición del electrón. Pero esto es justamente lo contrario de lo que debería hacerse para tratar de determinar su momento (véase ecuación [3.5.1]).

En otras palabras, la reducción de Δx sólo podrá llevarse a cabo a expensas de incrementar Δp_x , y viceversa, como queda puesto de manifiesto claramente si calculamos su producto:

$$\Delta x \Delta p_x \sim (\lambda/2 \text{ sen } \theta)(2h \text{ sen } \theta/\lambda) \sim h \quad [3.5.3]$$

La expresión anterior constituye una de las *relaciones de indeterminación* propuestas por Heisenberg. Aunque aquí, llevados por un propósito ilustrativo, hemos considerado como caso particular un microscopio, la relación de indeterminación [3.5.3], según señaló Heisenberg, posee validez y aplicabilidad universal, siendo, por tanto, correcta para cualquier otro mecanismo o dispositivo de medida. Indica que no pueden conocerse *simultáneamente* en un mismo experimento la posición y el momento de una partícula más allá de lo que permite dicha relación. Por eso la expresión [3.5.3] debe escribirse en realidad como desigualdad:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h \quad [3.5.4]$$

Naturalmente, la justificación de [3.5.4] es sólo cualitativa, dejando para más adelante (véase capítulo 7) la definición precisa de las cantidades Δx e Δp_x , y la demostración de la correspondiente relación de indeterminación que las liga.

Es importante destacar que en la justificación de la relación de Heisenberg mediante el experimento del microscopio ha sido necesario emplear la doble descripción ondulatoria-corpúscular de la radiación: corpúscular en su interacción con el electrón y ondulatoria a su paso a través del microscopio. Volveremos sobre este punto esencial en el siguiente apartado en relación con la noción de complementariedad.

La expresión [3.5.4] conlleva diversas implicaciones fundamentales: en primer lugar, es preciso abandonar el concepto clásico de trayectoria continua de una partícula. En efecto, si fuéramos capaces de medir con total precisión la posición de una partícula, nada sabríamos acerca de su momento, desconociendo completamente, por tanto, la dirección de su movimiento en un instante posterior. Recuérdense la discusión del experimento de la doble rendija de Young, en el cual, al observar las interferencias, perdía sentido hablar de trayectoria de un fotón. Para trazar el recorrido de una partícula es necesario, pues, efectuar sucesivas medidas de su posición, de manera que no podremos lograr en ningún caso una observación *continua*. Dicho de otro modo, las observaciones deben ser consideradas como sucesos discretos.

Por otro lado, al no poder conocer con total precisión las posiciones y los momentos iniciales de los objetos que intervienen en un sistema físico (lo cual permitiría determinar su evolución posterior) se hace necesario recurrir a una formulación estadística para analizar su comportamiento. Esto se hace patente incluso en los sistemas más simples como

puede ser la propagación de un solo electrón o fotón. El determinismo clásico, por tanto, es otra de las ideas que debe ser abandonada¹⁴. En física cuántica deberemos hablar, pues, de probabilidades.

Las relaciones de indeterminación comportan, además, otra consecuencia crucial: supongamos que disponemos de un conjunto de electrones. Si tratamos de seguir el movimiento individual de cada uno de ellos, como consecuencia de las medidas de las posiciones de las partículas alteraremos, de forma no totalmente predecible, sus momentos y energías, por no mencionar los efectos de posibles colisiones mutuas. La distribución del sistema de electrones que, en algún instante inicial, podía haber estado bien definida, queda así indeterminada por el proceso mismo de localización y seguimiento de cada electrón individual. Esta dificultad fundamental en el seguimiento de cada electrón hace que pierda sentido la propia individualidad de cada partícula, esto es, la distinción entre partículas diferentes de la misma clase. Aplazaremos por el momento estas consideraciones, que serán retomadas de forma más cuantitativa en capítulos posteriores.

Además de la relación [3.5.3], que considera medidas de la posición y el momento *en el mismo instante*, puede escribirse también otra relación que conecta la incertidumbre en la energía total de un sistema, ΔE , con el intervalo de tiempo característico, Δt , que ha de transcurrir para poder observar una variación apreciable de alguna magnitud física del sistema (por ejemplo, la posición de una partícula):

$$\Delta E \Delta t \geq h \quad [3.5.5]$$

A diferencia de la relación de indeterminación [3.5.4], en este caso es preciso tener en cuenta la evolución dinámica del sistema. Para ilustrarlo consideremos una partícula libre no relativista moviéndose en la dirección x , y supongamos que su indeterminación en la posición es Δx . Representemos figuradamente esto mediante un rectángulo de longitud Δx que se desplaza según el eje x (véase figura 3.10). La energía de dicha partícula será, evidentemente,

$$E = p_x^2/2m \quad [3.5.6]$$

donde, como es habitual, m representa la masa. En consecuencia, si la incertidumbre en la medida del momento lineal es Δp_x entonces la incertidumbre en la energía valdrá

$$\Delta E \sim (p_x/m)\Delta p_x = v\Delta p_x \quad [3.5.7]$$

¹⁴ Aunque actualmente la mayor parte de la comunidad científica admite esta conclusión, no todos los físicos están de acuerdo con ella. Incluso el propio Einstein se opuso firmemente esgrimiendo sutiles argumentos teóricos. Es realmente sugestiva la correspondencia que sobre este asunto sostuvo con Bohr. Con el fin de salvar el indeterminismo cuántico, fue sugerido por algunos la posible existencia de ciertas *variables ocultas*, no encontradas explícitamente aún, pero cuyo conocimiento exacto nos proporcionaría información adicional suficiente como para recuperar el determinismo perdido. Desgraciadamente, nadie ha aportado todavía evidencia experimental que demuestre la realidad de dichas variables. Es más, la existencia de las de tipo local ha sido rebatida experimentalmente. Información más detallada puede encontrarse en los apéndices al final del libro.

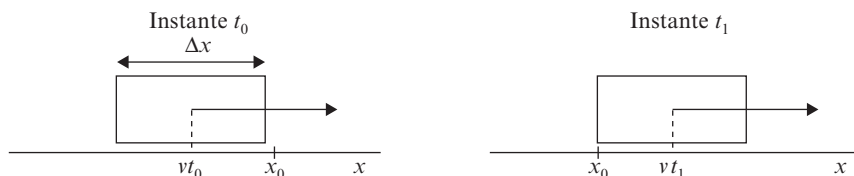


Figura 3.10. Ilustración de la relación de indeterminación [3.5.5].

donde v es la velocidad de la partícula. Al moverse el paquete en la dirección positiva del eje x , su «borde anterior» llega en el instante t_0 al punto $x_0 = vt_0 + \Delta x/2$. El «borde posterior» del paquete pasará por x_0 en el instante t_1 tal que $x_0 = vt_1 - \Delta x/2$, pudiendo identificarse la diferencia $t_1 - t_0$ con el tiempo característico Δt buscado, pues, al cabo de él, ha habido un «cambio apreciable» en las propiedades del sistema, a saber, todo el rectángulo asociado a la posición de la partícula ha atravesado el punto x_0 (véase figura 3.10). Se tendrá, en consecuencia,

$$\Delta t \sim \Delta x/v \quad [3.5.8]$$

Por tanto, usando [3.5.7] y [3.5.8] se llega a

$$\Delta E \Delta t \sim h \quad [3.5.9]$$

conforme a la expresión postulada. En capítulos posteriores aparecerán ejemplos importantes en los que se hará uso de la desigualdad anterior.

El lector, de nuevo, puede preguntarse qué es lo que sucede en el caso de objetos macroscópicos. Para aclararlo, supongamos una pelota de 100 g de masa desplazándose a una velocidad de $60 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, con una incertidumbre en dicha velocidad del 1 por mil. Puede comprobarse fácilmente que el límite de precisión impuesto por la relación de indeterminación sobre la posición de dicha pelota, Δx , es $\sim 10^{-30} \text{ m}$, que es una cantidad completamente despreciable. Cuando se manejan objetos macroscópicos las relaciones de indeterminación no suponen, por tanto, ninguna restricción de tipo práctico a la precisión que podemos alcanzar en nuestras medidas. No sucede lo mismo a escala microscópica. De hecho, el tamaño finito de los átomos, según el modelo planetario visto en cursos elementales de Física, puede considerarse una consecuencia de tales relaciones. En efecto, tomemos, por ejemplo, el átomo de hidrógeno, en el cual un único electrón se mueve alrededor del núcleo, que supondremos puntual, con una energía¹⁵

$$E = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad [3.5.10]$$

¹⁵ Consideraremos, por sencillez, que la masa del protón respecto de la del electrón es infinita, y así podremos suponer que el núcleo está fijo, con el electrón dando vueltas alrededor de él.

donde ϵ_0 denota, como antes, la constante dieléctrica del vacío y r la distancia entre el electrón y el núcleo. El estado real del átomo será aquel que minimice su energía total. Clásicamente, la energía mínima posible sería en este caso $E = -\infty$, correspondiendo al valor $r = 0$ (electrón unido al núcleo), lo cual llevaría a energías de ionización infinitas. Esta inconsistencia se resuelve aplicando los principios cuánticos. De hecho, el valor anterior de r es incompatible con las relaciones de Heisenberg, ya que si $r = 0$, se tiene $\Delta r = 0$ (suponiendo el problema unidimensional en la dirección radial), y ello implicaría $\Delta p = \infty$, que no tiene sentido (energía cinética infinita). Las relaciones de indeterminación conducen, por tanto, a un tamaño finito para los átomos, permitiendo incluso estimar el orden de magnitud de su energía mínima (véase ejercicio 3.7).

Por otro lado, según se vio en el primer capítulo, Planck postuló que las energías permitidas E_n para un oscilador armónico monodimensional venían dadas por la relación

$$E_n = nh\nu \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [3.5.11]$$

donde ν era la frecuencia de oscilación. La aplicación aquí de la relación [3.5.4] impide que n pueda tomar el valor cero. En efecto, la energía total E de un oscilador vale

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2} x^2 \quad [3.5.12]$$

Si $n = 0$, entonces $E_n = 0$, lo que obligaría a que $x = 0 = p$, de donde $\Delta x = \Delta p = 0$, en clara contradicción con la relación de Heisenberg. Es preciso, por tanto, excluir el valor $n = 0$ de [3.5.11], de manera que siempre se cumplirá $E_n > 0$. La energía mínima que puede alcanzar un oscilador armónico es, pues, estrictamente mayor que cero (véase ejercicio 3.8).

3.6. COMPLEMENTARIEDAD

Retomando la cuestión con la que iniciábamos el presente capítulo, hemos demostrado que tanto la radiación como la materia poseen propiedades y comportamientos de carácter dual, corpuscular y ondulatorio. Ahora bien, onda y partícula son conceptos contradictorios. ¿Cómo explicarse, entonces, que un ente físico sea ambas cosas a la vez? Bohr resolvió esta paradoja postulando el llamado principio de complementariedad: no pueden observarse *simultáneamente en un mismo experimento* los aspectos ondulatorio y corpuscular de un ente físico. Esto ya había sido señalado para la radiación en conexión con el experimento de la doble rendija de Young. La afirmación de Bohr es, sin embargo, más general y se extiende a toda clase de sistemas físicos. Lo esencial del principio de Bohr es que evita la contradicción entre ambas descripciones, afirmando que cada aspecto se observa en instantes y con experimentos diferentes. Recuérdese en este sentido que en el efecto Compton el fotón era tratado *primero* como partícula al colisionar con el electrón, y *posteriormente* era analizado como onda determinando su frecuencia mediante un espectroscopio.

Por otro lado, ambas concepciones son necesarias para lograr una descripción completa del sistema físico. Las dos interpretaciones de los entes físicos son, pues, *complemen-*

tarias y, desde una perspectiva experimental, mutuamente excluyentes. Lo anterior está íntimamente ligado con las relaciones de indeterminación propuestas por Heisenberg. De hecho, tales relaciones preservan la validez del principio de Bohr. E incluso las parejas de magnitudes conjugadas que aparecen en ellas, posición y momento, energía y tiempo, pueden considerarse en cierto sentido como cantidades complementarias, sólo que, en este caso, la exclusión entre variables conjugadas no es tan rigurosa como la que se presenta en el doble planteamiento ondulatorio-corpúsculo.

Para ilustrar lo que esto significa, consideremos el dispositivo esquematizado en la figura 3.11: de nuevo se trata de una doble rendija sobre la que incide un haz plano colimado de radiación monocromática, registrándose la correspondiente figura de interferencias sobre una placa fotográfica situada en P_F . La diferencia con el caso habitual es que ahora el plano de las rendijas no está fijo, sino que, mediante los muelles colocados en sus extremos, puede moverse paralelamente a sí mismo. De esta forma seremos capaces, hipotéticamente, de medir la componente p_x del momento lineal transferido al plano P_R por los fotones que atraviesan las rendijas. Al igual que en la sección 3.2, supondremos que la fuente emite los fotones de uno en uno. Si la longitud de onda de la radiación es λ , el

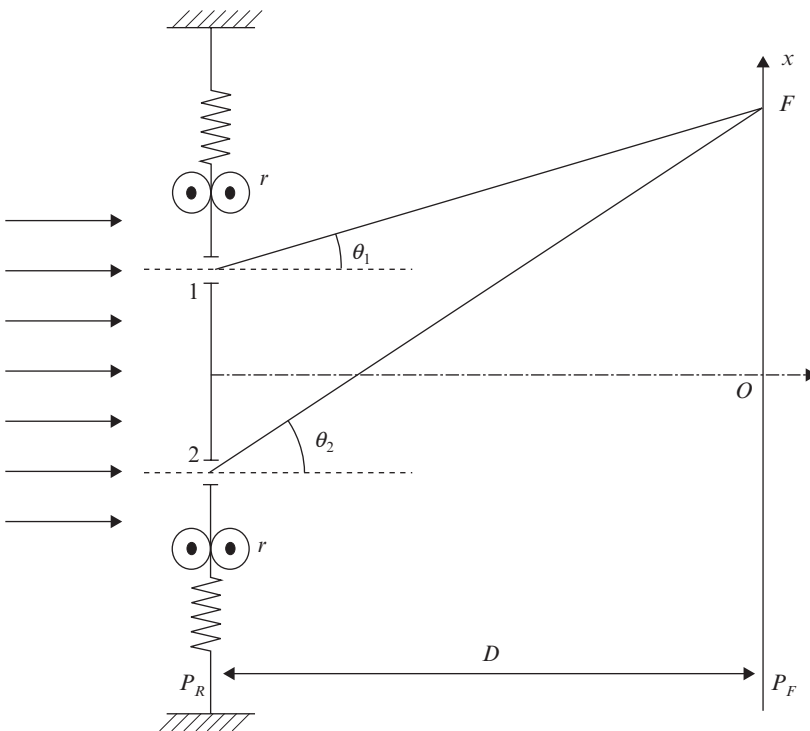


Figura 3.11. Principio de complementariedad y relaciones de indeterminación: doble rendija (móvil) de Young. En la figura, r denota los rodillos que fijan la pantalla P_R en la dirección perpendicular al eje x , permitiendo su movimiento sólo a lo largo de este eje. La separación entre las rendijas es s .

momento del fotón incidente valdrá $p = h/\lambda$. Por otro lado, al atravesar las rendijas, los fotones cambiarán su momento, cediendo una parte del mismo al plano P_R a fin de preservar la ley de conservación¹⁶. Si, para fijar ideas, suponemos que el fotón ha impactado sobre el punto F de la placa, la componente x del momento transferido a P_R valdrá

$$p_1 = -\frac{h}{\lambda} \operatorname{sen} \theta_1 \quad [3.6.1]$$

si ha atravesado la rendija superior, y

$$p_2 = -\frac{h}{\lambda} \operatorname{sen} \theta_2 \quad [3.6.2]$$

si ha franqueado la inferior. En otras palabras, midiendo el momento comunicado a P_R estaríamos en condiciones de saber por cuál de las rendijas ha pasado cada fotón emitido y, al mismo tiempo, puesto que ambas aberturas permanecen abiertas, observaríamos la figura de interferencias sobre P_F . Este resultado, de ser correcto, violaría el principio de complementariedad de Bohr. Sin embargo, si se realizase realmente el experimento, se comprobaría que *no* aparece ninguna clase de franjas interferenciales. Es preciso, pues, analizar con más cuidado la experiencia. Esencialmente, el error en el razonamiento estriba en que únicamente hemos dotado de características y comportamiento cuántico a los fotones, pero no así a otro de los objetos físicos que, aunque macroscópico, interviene en nuestro sistema. Nos estamos refiriendo a la pantalla móvil que contiene a las rendijas. Su naturaleza dual conlleva el cumplimiento de las relaciones de Heisenberg. Así, si se desea precisar por cuál de las dos rendijas pasa el fotón, es necesario, evidentemente, que la indeterminación en la componente p_x del momento adquirido por P_R cumpla

$$\Delta p_x \leq |p_2 - p_1| \quad [3.6.3]$$

Ahora bien, la relación de indeterminación [3.5.3] *aplicada al objeto material* P_R obliga a introducir una imprecisión Δx en la posición en dicha pantalla igual a

$$\Delta x \geq \frac{h}{|p_2 - p_1|} \quad [3.6.4]$$

Suponiendo ángulos pequeños (aproximación habitual en este dispositivo), podemos escribir

$$\operatorname{sen} \theta_1 \approx \operatorname{tg} \theta_1 = \frac{x - s/2}{D} \quad [3.6.5.a]$$

¹⁶ Dado que la masa de P_R es muy grande, la energía cinética que adquiere dicho plano tras la colisión con cada fotón es muy pequeña. Por ello consideraremos que la longitud de onda del fotón no se altera tras su paso por la rendija.

$$\text{sen } \theta_2 \approx \text{tg } \theta_2 = \frac{x + s/2}{D} \quad [3.6.5.b]$$

donde x designa la posición del punto F sobre P_F . De las ecuaciones [3.6.1, 2 y 5] se tiene

$$|p_2 - p_1| \approx \frac{h}{\lambda} \frac{s}{D} \quad [3.6.6]$$

que, llevado a [3.6.3] y [3.6.4], nos da

$$\Delta x \geq \frac{\lambda D}{s} \quad [3.6.7]$$

Ahora bien, según puede comprobarse en cualquier texto de Óptica, la cantidad $\lambda D/s$ es precisamente la separación entre franjas consecutivas de la figura de interferencias generada por un dispositivo de Young. Por tanto, cada vez que un fotón atraviesa P_R , las rendijas pueden ocupar cualquier posición dentro de ese rango. De hecho, el fotón siguiente encontraría la pantalla P_R desplazada una cantidad Δx (que no conocemos con precisión) y, por tanto, contribuiría a formar una figura interferencial sobre P_F desplazada una distancia Δx con respecto a la producida por el fotón anterior. Este proceso se repetiría para los fotones sucesivos que incidieran sobre la doble rendija y, al no poder controlar (ni incluso conocer) la posición de dichas rendijas, las hipotéticas franjas interferenciales alternativamente claras y oscuras se fusionarían, desapareciendo así la figura de interferencias sobre P_F . Las relaciones de indeterminación aplicadas a *todos* los entes físicos han asegurado, por tanto, la validez del principio de complementariedad.

EJERCICIOS

3.1. Obtener las relaciones de dispersión [3.3.7.a y b] para radiación propagándose en el vacío y para partículas materiales propagándose libremente.

3.2. Un fotón y un electrón tienen ambos una onda asociada cuya longitud de onda de De Broglie es λ_0 . Expresar en términos de λ_0 sus momentos, energías totales y energías cinéticas.

3.3. Calcular la longitud de onda λ asociada a una partícula material que se desplaza con energía cinética K en los límites no relativista ($v \ll c$) y ultrarrelativista ($v \sim c$).

3.4. Un haz de neutrones de energía cinética igual a 1 eV incide sobre una red cristalina de período 1.9 Å. ¿Cuántos órdenes interferenciales, correspondientes a las reflexiones de Bragg, podremos observar?

3.5. Usando el principio de indeterminación, hallar la energía cinética mínima que puede poseer un electrón confinado en una cavidad unidimensional de paredes impenetrables y anchura l . Estimar su valor si l es del orden del diámetro atómico ($l \sim 1 \text{ \AA}$).

3.6. Sobre un detector incide de uno en uno un haz de fotones de longitud de onda $\lambda = 3000 \text{ \AA}$. ¿Cuántos fotones por segundo puede contar sin perturbar la energía de cada fotón más del 1 por millón? *Ayuda:* hacer uso de la relación de indeterminación energía-tiempo.

3.7. Haciendo uso de la relación de indeterminación [3.5.4] escrita en la forma $\Delta r \Delta p \geq \hbar$, donde r denota la coordenada radial, estimar la energía mínima del electrón en el átomo de hidrógeno.

3.8. Haciendo uso de la relación de indeterminación [3.5.4] escrita en la forma $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$, estimar la energía mínima de un oscilador armónico lineal, expresándola en términos de su frecuencia angular ω .

4

Modelos atómicos. Series espectrales

Pedro M. Mejías

4.1. INTRODUCCIÓN

A principios de este siglo se sabía con suficiente seguridad, apoyada por los experimentos, que los átomos estaban constituidos por cargas negativas (los electrones) y positivas en igual cantidad, ya que, en condiciones normales, los átomos se comportan como partículas neutras. Incluso se conocía que el número de electrones es aproximadamente la mitad de su peso atómico. Sin embargo, nada podía decirse acerca de la distribución espacial de tales cargas en cada átomo. Por otro lado, buen número de experimentos proporcionaban los espectros de la radiación emitida por diversas sustancias. Se admitía, de acuerdo con las ideas clásicas, que dicha radiación se producía cuando los átomos, habitualmente adoptando una disposición estable de cargas, eran perturbados, y sus electrones, al ser los componentes más ligeros, vibraban en torno a sus posiciones de equilibrio, emitiendo así el espectro correspondiente.

Era deseable, por tanto, establecer un modelo atómico consistente internamente y compatible con los resultados espectroscópicos. En 1904, Nagaoka, concretando las ideas de Perrin, proponía un modelo planetario del átomo, en el cual la carga positiva ocupaba el centro y los electrones giraban a su alrededor con una velocidad angular común. Dado que, según la electrodinámica clásica, una carga acelerada pierde energía por radiación, el modelo de Nagaoka resultaría inestable, motivo por el cual no fue suficientemente apreciado hasta los análisis de Rutherford en 1911. Simultáneamente, en 1903, J. J. Thomson propuso otra configuración alternativa que salvaba el problema de la estabilidad, pero desgraciadamente no se ajustaba a los espectros observados. En las secciones subsiguientes se discutirán en detalle las ventajas e inconvenientes de ambos modelos y se mostrarán las dificultades que presentan para explicar determinados resultados experimentales.

4.2. MODELO ATÓMICO DE THOMSON

El modelo de Thomson establecía que los electrones estaban incrustados en el interior de una distribución esférica uniforme de carga eléctrica positiva. El tamaño de la esfera atómica debería ser del mismo orden de magnitud que el tamaño típico de los átomos que componen el material, que puede estimarse a partir del valor de la densidad, peso atómico y número de Avogadro. Para fijar ideas le supondremos del orden del angstrom. Natural-

mente, debido a la repulsión mutua, los electrones deberían repartirse uniformemente en el interior del volumen atómico (véase figura 4.1). Por otro lado, en la situación estable, dichos electrones se mantendrían en reposo. Sin embargo, bajo perturbaciones externas, se pondrían en movimiento, oscilando en torno a sus posiciones de equilibrio, emitiendo radiación.

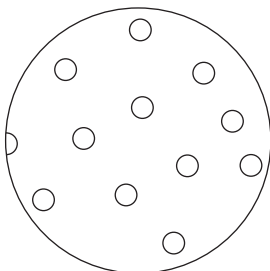


Figura 4.1. Esquema ilustrativo del átomo de Thomson. Los pequeños círculos representan los electrones, repartidos en una esfera con una distribución uniforme de carga positiva.

A fin de confirmar la bondad de esta teoría, deberemos calcular las frecuencias de oscilación de los electrones atómicos y compararlas con el experimento. Consideremos, por sencillez, el átomo de hidrógeno. En él, según el modelo de Thomson, un electrón de carga $-e$ se encontrará en el interior de una región esférica cuya densidad (uniforme) de carga positiva la denotaremos por ρ . Si el electrón se desplaza del centro de la esfera una distancia r_0 , puede demostrarse, aplicando el teorema de Gauss y la ley de Coulomb, que la fuerza F ejercida sobre él vale

$$F = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{4}{3} \pi \rho r_0^3 \right) \frac{e}{r_0^2} = \frac{-\rho e r_0}{3\epsilon_0} \quad [4.2.1]$$

donde $4/3 \pi \rho r_0^3$ representa la carga eléctrica positiva contenida en una esfera de radio r_0 y ϵ_0 es, como siempre, la permitividad del vacío. Si hacemos $k \equiv \rho e / 3\epsilon_0$, se observa, a la vista de [4.2.1], que F es de la forma

$$F = -kr_0 \quad [4.2.2]$$

idéntica a la fuerza aplicada en un movimiento vibratorio armónico de constante k . A resultas de dicho desplazamiento, el electrón ejecutará, por tanto, oscilaciones armónicas simples cuya frecuencia ν vendrá dada por la expresión

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m_e}} \quad [4.2.3]$$

donde m_e denota la masa del electrón. Nos queda por determinar el valor de ρ . Ahora bien, como la carga positiva, igual a $+e$, se encuentra distribuida uniformemente en un volumen esférico de radio $r_A (\sim 1 \text{ \AA})$, ρ se escribirá

$$\rho = \frac{e}{\frac{4}{3}\pi r_A^2} \quad [4.2.4]$$

Sustituyendo valores en [4.2.3], obtenemos

$$\nu \sim 2.5 \times 10^{15} \text{s}^{-1}$$

De acuerdo con la teoría clásica de la radiación, esta frecuencia coincidirá con la frecuencia de la radiación emitida por el átomo, que equivale, en longitud de onda, a

$$\lambda \sim 1200 \text{ \AA}$$

Aunque este valor de λ pudiera acercarse a algunas de las frecuencias determinadas experimentalmente para el átomo de hidrógeno, sin embargo, la diversidad de frecuencias que aparece en su espectro no encuentra justificación según el modelo de Thomson. En efecto, el lector puede comprobar por simple inspección que el valor obtenido de ν no depende de la magnitud r_0 del desplazamiento sufrido por el electrón. Dicho de otro modo, para un tamaño fijo de átomo, sólo encontraríamos una única frecuencia de emisión, resultado a todas luces incompatible con la complejidad de los espectros observados (véase sección 4.5 del presente capítulo). Naturalmente, el valor de ν cambiará si se suponen otros tamaños de átomo (véase ejercicio 4.1).

Las experiencias decisivas que descartaron definitivamente el modelo de Thomson se realizaron, sin embargo, a partir de 1909, y fueron llevadas a cabo por Geiger y Marsden, ambos colaboradores de Rutherford, quien analizó cuantitativamente sus resultados. En la figura 4.2 se muestra un esquema del dispositivo experimental empleado: una fuente de material radiactivo emite partículas α^1 que son colimadas mediante una serie de diafragmas, incidiendo posteriormente, todas con la misma dirección, sobre una lámina de alguna sustancia metálica como, por ejemplo, oro. Tales partículas actúan verdaderamente a modo de sondas que penetran en el interior del átomo y nos muestran detalles de su estructura interna a partir de las desviaciones sufridas. La lámina que hace de blanco es tan delgada que las partículas α la atraviesan completamente sin apenas disminuir su veloci-

¹ Las partículas α son emitidas espontáneamente a gran velocidad por diversos materiales radioactivos, como, por ejemplo, el uranio o el radio. Son desviadas por campos eléctricos y magnéticos, lo que implica que poseen cargas eléctricas. Del sentido y magnitud de sus desviaciones se infiere que su carga es positiva e igual al doble de la del electrón. Por otro lado, se precisan campos mucho más intensos que los aplicados sobre electrones para producir desviaciones sensibles, lo que conlleva que su masa sea muy superior a la del electrón. Rutherford encontró que la relación carga/masa de una partícula α era igual a la mitad del valor correspondiente a un átomo de hidrógeno ionizado. De todo lo cual se deduce que la masa de las partículas α es igual a la del átomo de helio. Es decir, una partícula α no es más que un átomo de helio doblemente ionizado. Esto ha sido comprobado, además, mediante experiencias de tipo espectroscópico. La velocidad con que son emitidas depende de la sustancia radiactiva emisora, y su valor ronda los $2 \times 10^7 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ (para el radio es $1.6 \times 10^7 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$), que corresponde aproximadamente a la veinteva parte de la velocidad de la luz.

dad. Sin embargo, sí modifican su dirección, debido a las sucesivas deflexiones que experimentan por efecto de la fuerza de Coulomb ejercida sobre ellas por las cargas positivas y negativas que encuentran a su paso. Evidentemente, la deflexión total resultante dependerá de los detalles concretos de la trayectoria seguida en el interior de la lámina, por lo que será diferente para las distintas partículas α que componen el haz. Como consecuencia, la dirección de las partículas α a la salida de la lámina no estará bien definida, distribuyéndose angularmente. El número de tales partículas dispersadas en el intervalo angular $(\theta, \theta + d\theta)$ puede medirse observando a través de un microscopio los destellos producidos por cada una de éstas al colisionar con una película de S Zn cristalino colocada delante del objetivo. Empleando láminas de oro de 1 micra de espesor, se encontró que el promedio cuadrático del ángulo de dispersión, $(\bar{\theta}^2)^{1/2}$, era del orden de 1 o 2 grados, lo que encajaba en principio con el modelo de Thomson. Téngase en cuenta en este sentido que, al estar distribuida la carga positiva de cada átomo de oro en todo el volumen atómico y poseer los electrones una masa muy pequeña en comparación con la de la partícula α , las fuerzas de Coulomb ejercidas sobre ella no tendrán suficiente intensidad como para provocar deflexiones apreciables al atravesar *cada átomo individual*.

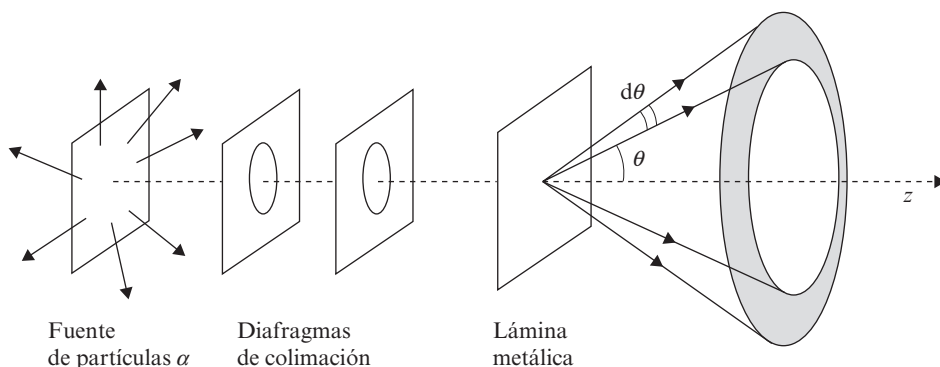


Figura 4.2. Dispersión de partículas α por láminas metálicas delgadas. Nótese que la geometría mostrada en la figura posee simetría de revolución en torno a la dirección del haz incidente (eje z). Por tanto, el intervalo angular $(\theta, \theta + d\theta)$ realmente equivale, tridimensionalmente, a un ángulo sólido con forma de anillo $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$.

Para verlo, estimemos el mayor ángulo que puede ser desviada una partícula α al chocar con un electrón. Supondremos a este último libre e inicialmente en reposo y, por sencillez, ya que se trata de una estimación, asimilaremos este proceso a una colisión de tipo elástico entre dos cuerpos². Con la notación mostrada en la figura 4.3, las leyes de conservación de la energía y momento dan

² Todo esto tiene sentido, ya que la energía de ligadura del electrón en el átomo es muy pequeña en comparación con la energía de la partícula α .

$$\frac{p_i^2}{2m_\alpha} = \frac{p_f^2}{2m_\alpha} + \frac{p_e^2}{2m_e} \quad [4.2.5.a]$$

$$p_i = p_f \cos \theta + p_e \cos \varphi \quad [4.2.5.b]$$

$$0 = p_f \operatorname{sen} \theta - p_e \operatorname{sen} \varphi \quad [4.2.5.c]$$

donde m_α y m_e denotan las masas de las partículas α y e , respectivamente. Del sistema de ecuaciones anterior se deduce

$$\left(1 + \frac{m_\alpha}{m_e}\right) \left(\frac{p_f}{p_i}\right)^2 - 2 \frac{m_\alpha}{m_e} \cos \theta \left(\frac{p_f}{p_i}\right) + \left(\frac{m_\alpha}{m_e} - 1\right) = 0 \quad [4.2.6]$$

de donde

$$\frac{p_f}{p_i} = \frac{m_\alpha}{m_\alpha + m_e} \cos \theta \pm \left[\left(\frac{m_\alpha}{m_\alpha + m_e}\right)^2 \cos^2 \theta - \frac{m_\alpha - m_e}{m_\alpha + m_e} \right]^{1/2} \quad [4.2.7]$$

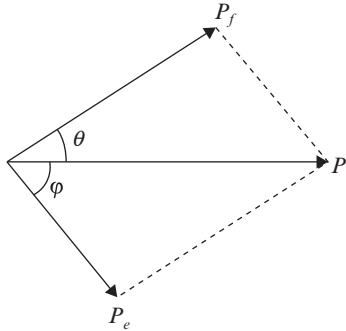


Figura 4.3. Esquema ilustrativo de la notación empleada en la colisión entre una partícula α y un electrón. p_i y p_f representan los módulos de los momentos inicial y final de la partícula α , y p_e el correspondiente al electrón después del choque.

Teniendo en cuenta que $m_\alpha \approx 4 \times 1836m_e$, no es difícil demostrar (véase ejercicio 4.2) que el mayor ángulo de desviación $\theta_{\text{máx}}$ que puede sufrir la partícula α , compatible con la ecuación anterior, es aproximadamente $\theta_{\text{máx}} \sim 10^{-4}$ rad., que es una cantidad muy pequeña.

Estimemos ahora el orden de magnitud de la desviación sufrida por efecto de la carga positiva del átomo que, según el modelo de Thomson, se encuentra distribuida en un volumen esférico. La fuerza coulombiana que actúa sobre la partícula α valdrá

$$\mathbf{F} = \int 2e \frac{\mathbf{r}}{r^3} dq \quad [4.2.8]$$

donde \mathbf{r} denota el vector que une el elemento de carga dq con la posición en un cierto instante de la partícula α en el interior del átomo. En la integración se cancelarán las fuerzas ejercidas por elementos de carga simétricamente situados respecto a la posición de la partícula (en concreto, si la trayectoria recorre uno de los diámetros de la esfera, no se produciría desviación alguna). Teniendo esto en cuenta, y recordando que, por hipótesis, la carga positiva se encuentra uniformemente distribuida en todo el volumen atómico, una estimación válida de la integral que aparece en [4.2.8] sería (en módulo)

$$|\mathbf{F}| \sim \frac{2Ze^2}{R^2} \quad [4.2.9]$$

donde Z denota la carga total positiva del átomo y R el radio del volumen esférico atómico. Suponiendo, por sencillez, que esta fuerza actúa durante el tiempo de tránsito Δt de la partícula α a su paso a través del átomo, se originará un cambio en el momento lineal de ésta igual a

$$\Delta p \sim |\mathbf{F}| \Delta t \sim \frac{4Ze^2}{Rv} \quad [4.2.10]$$

donde hemos usado la relación $\Delta t \sim 2R/v$, siendo v la velocidad de la partícula α . El ángulo máximo de desviación $\theta_{\text{máx}}$ puede estimarse suponiendo que, a resultas de la interacción, el átomo se desplaza perpendicularmente a la dirección de incidencia de la partícula α . En consecuencia,

$$\text{tg } \theta_{\text{máx}} \sim \frac{\Delta p}{p} \sim \frac{4Ze^2}{Rm_\alpha v^2} \quad [4.2.11]$$

Para velocidades usuales, $v \sim 2 \times 10^7 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, y para átomos con, por ejemplo, $Z \sim 50$, tomando como radio atómico $R \sim 1 \text{ \AA}$, se obtiene $\theta_{\text{máx}} \sim 10^{-4} \text{ rad.}$, es decir, se trata del mismo orden de magnitud que la desviación ejercida por uno de los electrones del átomo.

En resumidas cuentas, las partículas α apenas son desviadas cuando atraviesan un sólo átomo. Las dispersiones significativas se producirán, por tanto, por acumulación de pequeñas deflexiones de tipo aleatorio, cuyo comportamiento vendrá regido por la teoría estadística clásica, la cual predice para $(\theta^2)^{1/2}$ una dependencia proporcional a $N^{1/2}$, siendo N el número de átomos que deflectan una partícula α al atravesar la lámina³.

Sin embargo, además de esta dispersión para ángulos pequeños, Geiger y Marsden encontraron que cierto porcentaje de partículas α (aproximadamente el 0.01 %) se desviaba ángulos muy grandes, superiores a 90° , e incluso algunas alcanzaban los 180° . Tales desviaciones no pueden explicarse de ningún modo en términos de sucesivas deflexiones originadas por muchos átomos obedeciendo el modelo de Thomson: de hecho, el número previsible de partículas α dispersadas ángulos mayores que 90° sería prácticamente *cero* (véase ejercicio 4.3). Parafraseando al propio Rutherford, el empleo del modelo atómico

³ Este número puede estimarse dividiendo el espesor de la lámina entre el diámetro del átomo.

de Thomson para justificar la dispersión para ángulos elevados sería algo tan increíble como pretender que una bala puede rebotar cuando se dispara sobre una delgada hoja de papel.

Por otro lado, se demostró también, utilizando láminas de distintos espesores, que el número de dispersiones para ángulos grandes era proporcional a N , en lugar de a $N^{1/2}$, pero ésta es precisamente la dependencia que se obtendría si considerásemos que una partícula α puede ser desviada un ángulo grande tras atravesar un *único* átomo. Esto es incompatible, según acabamos de ver, con el modelo de átomo «blando» de Thomson, y sólo puede entenderse si se supone la existencia de un campo eléctrico muy intenso generado por una carga positiva ligada a una gran masa que ocupa un volumen mucho más pequeño que el tamaño global del átomo. Esto fue lo que condujo a Rutherford a establecer el modelo que lleva su nombre.

4.3. MODELO ATÓMICO DE RUTHERFORD

Rutherford retomó la idea de Nagaoka y propuso un modelo en el cual la carga positiva se encontraba concentrada en una región central, de dimensiones extremadamente pequeñas ($\sim 10^{-14}$ m) en relación con el tamaño del átomo completo (10^{-10} m). Alrededor de este *núcleo*, los electrones giraban de manera similar al movimiento de los planetas en torno a una estrella. La fuerza central que mantiene ligado al conjunto la supuso de tipo coulombiano, mucho más intensa a esta escala que la de atracción gravitatoria. Es importante señalar que la ley de Coulomb había sido confirmada en situaciones y con objetos macroscópicos, pero no existía ninguna evidencia experimental de que siguiera siendo aplicable cuando se manejaban partículas y distancias tan pequeñas. La verificación de la ley de Coulomb constituye, por tanto, una hipótesis de partida que sólo será corroborada a través de la comparación entre teoría y experimento. Dado que el modelo de Thomson había sido refutado al mostrarse incapaz de explicar lo observado por Geiger y Marsden, deberemos probar que esto puede, sin embargo, lograrse sobre la base del modelo de Rutherford. Para ello, en lo que sigue, analizaremos con cierto detalle la dispersión de partículas α por *un* átomo aplicando el formalismo clásico no-relativista, basado en las leyes de Newton, y los teoremas de conservación al cálculo de trayectorias.

Como Rutherford apuntó, la dispersión a ángulos grandes se produce como consecuencia de la interacción repulsiva entre la partícula α y el núcleo cargado positivamente, sin que los electrones que lo circundan, dada su pequeña masa, perturben apreciablemente la trayectoria de aquélla. Para simplificar los cálculos consideraremos átomos pesados, de manera que la masa de su núcleo sea suficientemente grande en comparación con la de la partícula α como para despreciar el retroceso del núcleo en la colisión. En otras palabras, supondremos que dicho núcleo se mantiene fijo en el espacio durante la interacción. Por otro lado, estudiaremos las trayectorias de aquellas partículas α que no penetran en la región nuclear. De otro modo, las fuerzas que intervendrían en la descripción de nuestro problema físico serían de diferente naturaleza, y el análisis consiguiente mucho más complicado. Esta simplificación equivale, de hecho, a asimilar tanto la partícula α como el núcleo a cargas puntuales.

Teniendo en cuenta lo anterior, un esquema de la geometría del proceso de dispersión se muestra en la figura 4.4. En ella, v y v' denotan las velocidades de la partícula a grandes distancias del núcleo antes y después de ser dispersada, respectivamente (comportamiento asintótico). La distancia entre la recta que indica la dirección incidente y otra recta paralela a ella que pasa por el núcleo la denominaremos parámetro de impacto, y vendrá representado por la letra s . Al tratarse de un problema de fuerzas centrales, el momento angular respecto del origen, L , será constante, y, por tanto, el movimiento se desarrollará en un plano. Bastará, pues, emplear tan sólo dos variables independientes para describir completamente la trayectoria. Cuando la partícula se encuentre muy lejos del núcleo, la fuerza de Coulomb será prácticamente despreciable y, por consiguiente, lo mismo sucederá con su energía potencial. A grandes distancias del núcleo, toda la energía de la partícula será, pues, cinética. De la conservación de la energía y el momento angular se obtienen las ecuaciones

$$\frac{1}{2} Mv^2 = \frac{1}{2} Mv'^2 \tag{4.3.1}$$

$$L = Mvs = Mv's' \tag{4.3.2}$$

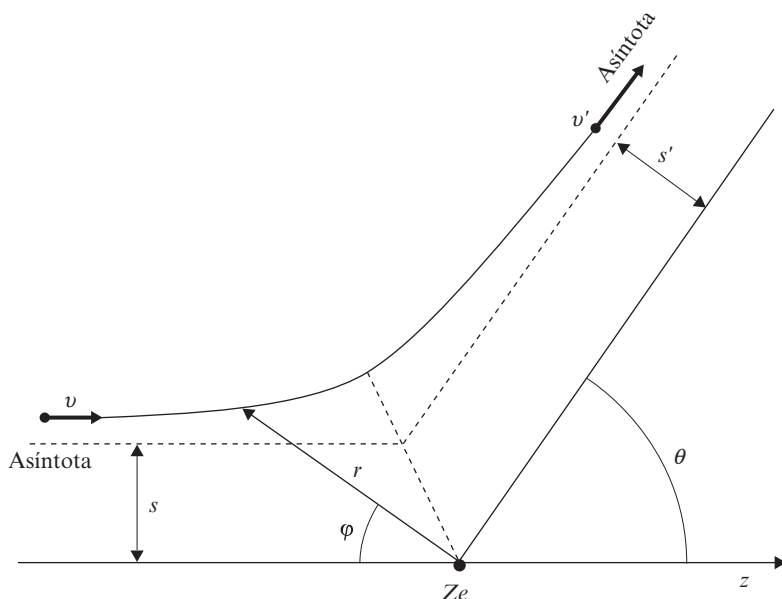


Figura 4.4. Esquema de la trayectoria seguida por una partícula α según el modelo de Rutherford. En la figura, r y φ designan las coordenadas polares planas que describen el movimiento (todo el sistema tiene simetría de revolución respecto del eje z), θ es el ángulo de dispersión (ángulo que forman las direcciones asintóticas, inicial y final, del vector relativo entre las partículas) y Z_e la carga (positiva) del núcleo atómico situado sobre el origen de coordenadas.

siendo M la masa de la partícula α , las cuales conducen a

$$v = v' \quad [4.3.3]$$

$$s = s' \quad [4.3.4]$$

Por otra parte, la ley de Newton $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, donde \mathbf{F} denota la fuerza aplicada y \mathbf{a} la aceleración, se escribe en el presente caso para la partícula α en la forma

$$\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = M \left[\frac{d^2 r}{dt^2} - r \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right] \quad [4.3.5]$$

En [4.3.5], el miembro de la izquierda es, evidentemente, la fuerza de repulsión coulombiana, y los términos primero y segundo del miembro de la derecha representan las aceleraciones radial y centrípeta asociadas, respectivamente, al cambio en módulo y dirección del vector de posición de la partícula. El factor 2 que aparece en el numerador de la fuerza de Coulomb se ha mantenido aquí para recordar explícitamente la carga $(+2e)$ de la partícula α . La ecuación de la trayectoria se obtendrá, como es habitual, eliminando el tiempo en [4.3.5], resultando, por tanto, una ecuación en términos de r y de φ .

Introduzcamos por conveniencia el cambio

$$u = 1/r \quad [4.3.6]$$

Recordando que el momento angular L (constante) se expresa como sigue

$$L = Mr^2 \frac{d\varphi}{dt} \quad [4.3.7]$$

puede comprobarse (la demostración se deja como ejercicio para el lector) que se cumple

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{L}{M} \frac{du}{d\varphi} \quad [4.3.8]$$

y

$$\frac{d^2 r}{dt^2} = -\frac{u^2 L^2}{M^2} \frac{d^2 u}{d\varphi^2} \quad [4.3.9]$$

Sustituyendo la ecuación [4.3.9] en [4.3.5], y teniendo en cuenta [4.3.7], se llega a la siguiente ecuación diferencial que relaciona u , y, por tanto, r , con φ :

$$\frac{d^2 u}{d\varphi^2} + u = -\frac{MZe^2}{2\pi\epsilon_0 L^2} \quad [4.3.10]$$

Conviene escribir [4.3.10] en una forma más compacta en términos del parámetro de impacto s . Como $L = Mvs$, [4.3.10] se transforma en

$$\frac{d^2u}{d\varphi^2} + u = -\frac{D}{2s^2} \quad [4.3.11]$$

donde

$$D \equiv \frac{Ze^2}{\pi\epsilon_0 Mv^2} \quad [4.3.12]$$

Debemos escribir la solución de la ecuación [4.3.11] que satisfaga, además, las condiciones iniciales de nuestro problema: cuando $r \rightarrow \infty$, la posición y la velocidad de la partícula incidente vienen dadas por

$$\varphi = 0 \quad [4.3.13.a]$$

$$\frac{dr}{dt} = -v \quad [4.3.13.b]$$

El signo menos que aparece en [4.3.13.b] se debe al frenado que experimenta la partícula α por efecto de la fuerza de repulsión ejercida por el núcleo. Puede comprobarse inmediatamente que la solución de [4.3.11] sujeta a las condiciones [4.3.13] resulta ser

$$u = \frac{1}{r} = \frac{1}{s} \operatorname{sen} \varphi + \frac{D}{2s^2} (\cos \varphi - 1) \quad [4.3.14]$$

La expresión anterior nos da, por tanto, la trayectoria seguida por una partícula α al ser dispersada por un núcleo. El movimiento es de tipo hiperbólico, ya que [4.3.14] es la ecuación de una hipérbola en coordenadas polares, con uno de sus focos sobre el núcleo. Además, el parámetro D , definido en (4.3.12), representa la distancia de máximo acercamiento de la partícula α al núcleo en una colisión frontal ($s = 0$) (véase ejercicio 4.4). Cuando $s \neq 0$ puede demostrarse (ejercicio 4.5) que la distancia de máximo acercamiento D_θ viene dada, en función del ángulo de dispersión θ , por la relación

$$D_\theta = \frac{D}{2} \left[1 + \frac{1}{\operatorname{sen} \theta/2} \right] \quad [4.3.15]$$

Naturalmente, cuando $\theta = \pi$ radianes, $D_\pi = D$, como era de esperar. El ángulo de dispersión θ se obtiene fácilmente en función del parámetro de impacto a partir de [4.3.14] teniendo en cuenta que, tras la dispersión, la coordenada φ de la partícula α a grandes distancias del núcleo ($r \rightarrow \infty$) satisface la igualdad

$$\varphi + \theta = \pi \quad , \quad (r \rightarrow \infty) \quad [4.3.16]$$

Se llega, finalmente, a

$$\cotg(\theta/2) = 2s/D \quad [4.3.17]$$

Sin embargo, esta expresión no puede comprobarse directamente comparándola con el experimento, ya que no conocemos el valor del parámetro de impacto para cada partícula individual. Téngase en cuenta al respecto que la cantidad realmente medible es el número de partículas α dispersadas tras atravesar la lámina metálica (recuérdese la figura 4.2) en el intervalo angular θ , $\theta + d\theta$, que denotaremos por $N(\theta) d\theta^4$. No obstante, la ecuación [4.3.17] establece la correspondencia existente entre θ y s , de manera que (véase figura 4.5) aquellas partículas cuyo parámetro de impacto está comprendido entre los valores s y $s + ds$ serán dispersadas en el intervalo angular θ , $\theta + d\theta$, y viceversa. Dicho de otro modo, $N(\theta) d\theta$ se hallará contando el número de partículas con parámetro de impacto comprendido entre los límites s , $s + ds$, donde s está relacionado con θ a través de [4.3.17].

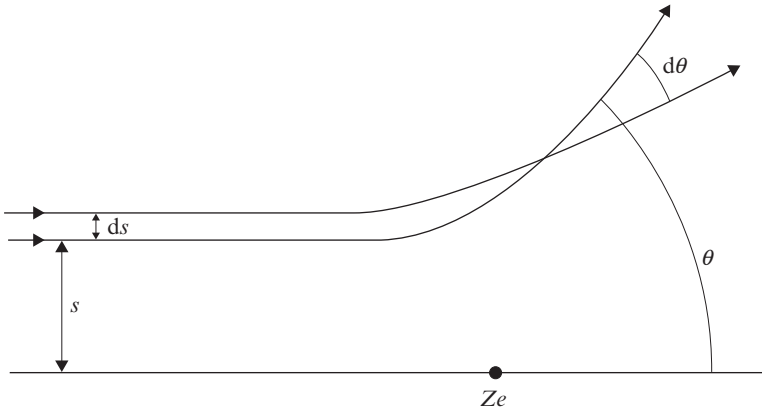


Figura 4.5. Esquema ilustrativo de la relación entre s y θ .

Consideremos entonces una lámina delgada de material dispersor, de grosor g (véase figura 4.6), conteniendo ρ núcleos por unidad de volumen, sobre la que inciden perpendicularmente I partículas α . Tracemos imaginariamente, con centro en cada núcleo puntual y normal a la dirección de propagación del haz, un anillo cuyos radios interno y externo valgan s y $s + ds$. Es claro, a raíz de lo anterior, que si una partícula α atraviesa alguno de estos anillos (zonas grises en la figura 4.6), será dispersada en una dirección formando un ángulo comprendido en el intervalo θ , $\theta + d\theta$ con la dirección incidente, donde θ y s están ligados por [4.3.17]. Ahora bien, el porcentaje de partículas α que pasa a través de alguno de estos anillos será igual al área cubierta por todos ellos dividida entre el área total de la

⁴ Lo mismo podría decirse del número de partículas dispersadas por unidad de tiempo en dicho intervalo angular.

lámina blanco, es decir, será igual al producto $g\rho 2\pi s ds$, donde $g\rho$ nos da el número de anillos por unidad de área (perpendicular a la dirección de incidencia del haz) y $2\pi s ds$ es el área de un anillo. Para que este cálculo sea correcto es necesario suponer que la lámina es lo suficientemente delgada como para poder despreciar tanto el efecto de «sombra» que podrían ejercer unos núcleos sobre otros como la probabilidad de dispersión múltiple por más de un núcleo. Ignoraremos, asimismo, la interacción mutua entre partículas α que sólo sería apreciable con haces muy «densos».

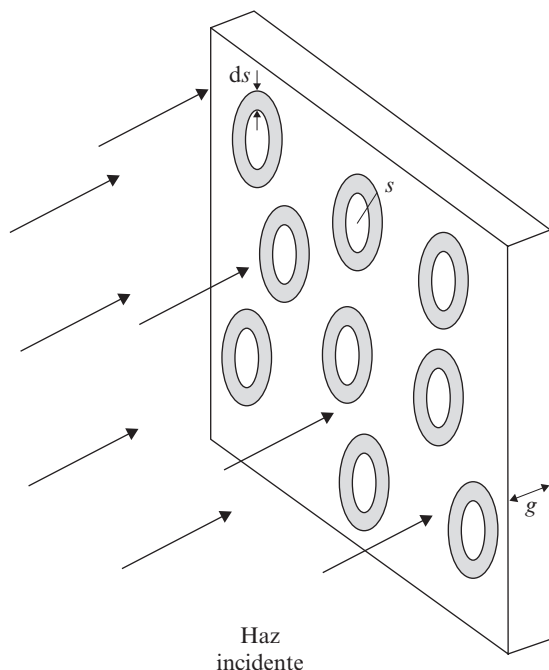


Figura 4.6. Cálculo de $N(\theta)$: los anillos trazados con centro en cada átomo dispersor constituyen sólo un artificio geométrico para simplificar el cálculo, y no poseen entidad real. Por otro lado, aunque en la figura se han representado macroscópicamente, el radio s de tales anillos debe ser realmente mucho más pequeño.

La cantidad buscada $N(\theta) d\theta$ se obtendrá, por tanto, calculando el producto

$$N(\theta) d\theta = -I g \rho 2\pi s ds \quad [4.3.18]$$

El signo menos en [4.3.18] expresa el hecho de que cuando el parámetro de impacto aumenta, el ángulo de dispersión disminuye, como se desprende de la figura 4.5. Recordando ahora la relación [4.3.17], se tiene

$$ds = -\frac{D}{4} \frac{d\theta}{\sin^2(\theta/2)} \quad [4.3.19]$$

con lo que llegamos a la siguiente expresión

$$N(\theta)d\theta = \frac{\pi}{8} I g \rho D^2 \frac{\text{sen } \theta}{\text{sen}^4(\theta/2)} d\theta \quad [4.3.20]$$

Sustituyendo el valor de D , nos queda finalmente

$$N(\theta)d\theta = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{Ze^2}{Mv^2}\right)^2 \frac{I g \rho 2\pi \text{sen } \theta d\theta}{\text{sen}^4(\theta/2)} \quad [4.3.21]$$

La ecuación anterior es la relación buscada: expresa $N(\theta)$ en función de cantidades conocidas o perfectamente medibles. De hecho, Geiger y Marsden comprobaron de forma minuciosa y exhaustiva la bondad de la ecuación de Rutherford para distintos valores de g , ρ y v en intervalos angulares que iban desde unos pocos grados hasta 150° . El acuerdo entre las previsiones teóricas y los resultados experimentales fue en todos los casos excelente, confirmando así el modelo atómico propuesto por Rutherford.

En el tiempo en el que los experimentos fueron realizados no se conocía el valor de Z , es decir, cuál era la carga eléctrica nuclear de diversos átomos. Si admitimos que la ecuación [4.3.21] es correcta, determinando I y $N(\theta)$ podemos deducir cuánto debe valer Z . En las primeras experiencias I y N se medían utilizando montajes distintos, con lo cual las condiciones experimentales no eran exactamente las mismas en ambos casos, introduciéndose así errores apreciables. Téngase en cuenta, en este sentido, que I y N toman valores numéricos que se diferencian en varios órdenes de magnitud, lo que dificulta enormemente su medida simultánea (el cociente I/N puede alcanzar valores superiores a 1000). Era preciso, por consiguiente, diseñar un dispositivo que permitiera determinar ambas variables I y N con el mismo montaje. Un esquema de esta clase fue ideado por J. Chadwick, y se muestra en la figura 4.7: las partículas α son emitidas por una fuente radiactiva situada en F e inciden sobre una lámina de material dispersor con forma de anillo. El detector (una película de S Zn) se encuentra colocado en P, punto sobre el cual se recibirá, por una parte, el haz directo sin dispersión procedente de F, y, por otra, el haz dispersado según un ángulo θ (véase figura 4.7). Bastará tapar, bien sea la abertura central del anillo, bien el propio anillo, dejando pasar el haz directo para hallar los valores de N y de I . De esta forma ingeniosa pudo Chadwick obtener Z para el cobre, el platino o la plata. En todos los casos se encontró que la carga nuclear era igual al número atómico del elemento considerado multiplicado por la carga del electrón. Como los átomos son neutros, Z proporciona, además, el número de electrones, lo que implica que el primer átomo de la tabla periódica, hidrógeno, debe contener un electrón, el segundo, helio, dos electrones, y así sucesivamente. Esta regla fue también comprobada por otros investigadores de manera independiente a partir del análisis de espectros de rayos X.

Decíamos al comienzo de este apartado que la interacción entre las partículas α y los núcleos atómicos se supone de tipo coulombiano. Sin embargo, para átomos ligeros, con Z bajo, aparecen discrepancias entre lo previsto por la ecuación [4.3.21] y los resultados experimentales. Estas discrepancias subsisten incluso después de hacer la correspondiente corrección teniendo en cuenta el valor finito de la masa nuclear. Las diferencias se hacen más evidentes cuando se observan partículas de alta velocidad dispersadas a 180° . Recor-

dando [4.3.12], es claro que la distancia D de máximo acercamiento entre la partícula y el núcleo disminuirá fuertemente conforme aumentemos v . Para valores suficientemente elevados de ésta, el número de partículas α dispersadas sufre un fuerte descenso con respecto a lo esperable según [4.3.21]. Esto pone de manifiesto que la partícula α está penetrando en el interior de las regiones nucleares para las cuales no es válida la ley de Coulomb. De hecho, según se verá en su momento, entran en acción fuerzas de atracción intensas pero de corto alcance que debilitan drásticamente las fuerzas de repulsión coulombianas. Los valores del parámetro D para los cuales deja de cumplirse la ecuación [4.3.21] proporcionan, por tanto, una estimación indirecta del tamaño del núcleo, cuya dimensión típica resulta ser 10^{-14} m a 10^{-15} m. Teniendo en cuenta que los electrones se mueven en órbitas de ~ 1 Å de diámetro, el átomo, según el modelo de Rutherford, tendrá el aspecto de una minúscula masa nuclear cargada positivamente alrededor de la cual giran a enorme distancia (en proporción, naturalmente, al diámetro nuclear) las cargas negativas (los electrones).

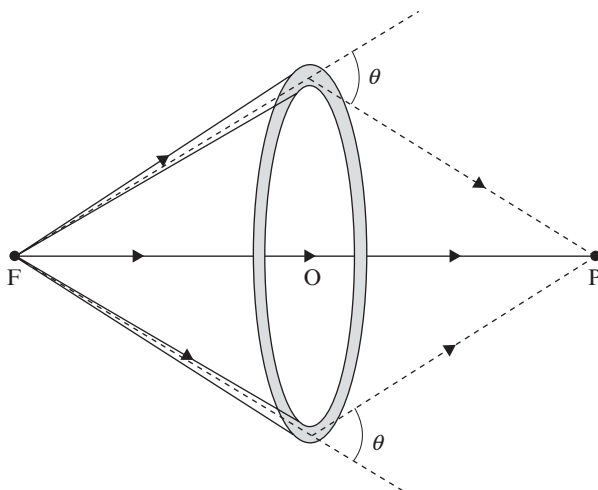


Figura 4.7. Montaje de Chadwick para medir I y N con la misma configuración. El punto O (punto de corte del plano que contiene el anillo con el segmento FP) equidista de F y de P .

4.4. SECCIÓN EFICAZ

La fórmula de Rutherford [4.3.21] se expresa habitualmente en términos de las denominadas secciones eficaces. El interés de este concepto se extiende más allá del problema de dispersión que estamos considerando y aparecerá en diversas ocasiones a lo largo del libro. Dada la importancia fundamental que el tema tiene en física cuántica, conviene que examinemos aquí, aunque con brevedad, algunas ideas básicas en las que se apoya.

La sección eficaz de un determinado proceso proporciona una medida de la probabilidad de que dicho proceso ocurra. En el caso que estamos estudiando, la *sección eficaz de dispersión* nos dará una medida de la *probabilidad* (expresada en ciertas unidades) de

que una partícula α sea dispersada por un núcleo. Para definirla consideremos que un haz de partículas α incide perpendicularmente sobre una lámina delgada de un cierto material conteniendo n núcleos por unidad de superficie. Si la placa es suficientemente delgada como para suponer que unos núcleos no «tapan» a otros, entonces parece razonable admitir que el número de dispersiones N debe ser proporcional tanto al número de centros dispersores, n , como al número de partículas incidentes que designaremos por I , es decir,

$$N \propto nI \quad [4.4.1]$$

La constante de proporcionalidad que es necesario introducir en [4.4.1] para lograr la igualdad es precisamente la sección eficaz de dicho proceso, que denotaremos por σ :

$$N = \sigma nI \quad [4.4.2]$$

Como N es adimensional, σ debe tener dimensiones de área⁵. Como el tamaño de los núcleos es $\sim 10^{-14}$ m, la unidad de sección eficaz se toma en física nuclear igual a 10^{-28} m², y se denomina barn. Su símbolo es b. Si ρ es la densidad de átomos del material blanco, el producto $\rho\sigma$ nos dará entonces una medida de la probabilidad de dispersión *por unidad de longitud atravesada*. Esto será válido, no se olvide, cuando, para las distancias involucradas, no haya una atenuación importante del haz a su paso a través del medio ya que, en caso contrario, el valor de I disminuiría conforme el haz penetrase en el material. Volveremos sobre este punto más adelante.

Podríamos intentar visualizar la sección eficaz de dispersión imaginando que reemplazamos cada uno de los centros dispersores por un disco de área σ de tal forma que cuando una de las partículas del haz incide sobre la región delimitada por dicho disco se produce la interacción. Es preciso, sin embargo, ser prudente con esta interpretación excesivamente simplista, ya que σ es función no sólo del tipo de proyectil o blanco, sino también de la clase de proceso que se considere, así como de la energía de las partículas incidentes. Puede hablarse, pues, de secciones eficaces de absorción fotoeléctrica, dispersión Compton, dispersión Thomson, etc., en intervalos energéticos muy amplios.

Volviendo a nuestro problema de dispersión, resulta más útil referir la sección eficaz a una dirección concreta de dispersión, ya que, al fin y al cabo, así es como se comprueba experimentalmente la exactitud de la ecuación de Rutherford. De acuerdo con [4.4.2], escribamos el número de partículas α dispersadas según un ángulo θ en la forma

$$N(\theta) d\theta = \frac{d\sigma}{d\Omega} nI d\Omega \quad [4.4.3]$$

donde $d\Omega$ es el diferencial de ángulo sólido. La cantidad $d\sigma/d\Omega$ suele escribirse $\sigma(\Omega)$ y se denomina *sección eficaz diferencial*. Nos da la *probabilidad de que una partícula α sea dis-*

⁵ A la misma conclusión se llegaría si N e I se definieran por unidad de tiempo y/o de superficie. El concepto de sección eficaz será retomado en los capítulos 18 y 34, aunque en ellos, por conveniencia, se empleará una notación ligeramente diferente a la utilizada aquí al escribir [4.4.2].

persada según θ dentro del ángulo sólido $d\Omega$. Se cumplirá, evidentemente

$$\int \sigma(\Omega) d\Omega = \sigma \quad [4.4.4]$$

Dada la simetría de nuestro problema (de rotación alrededor de la dirección de propagación incidente), se tiene (véase figura 4.2) $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$, por lo que la ecuación [4.3.21] tomará la forma

$$N(\theta) d\theta = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{Ze^2}{Mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} nI d\Omega \quad [4.4.5]$$

Comparando [4.4.5] y [4.4.3], se obtiene finalmente

$$\sigma(\Omega) = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{Ze^2}{Mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \quad [4.4.6]$$

Obsérvese que la dependencia de la sección eficaz diferencial con la energía E de la partícula incidente y con el tipo de material dispersor viene dada a través de los factores $E = Mv^2/2$ y Z , respectivamente. No deja de ser especialmente reseñable que la fórmula [4.4.6], deducida a partir de principios clásicos, sea idéntica a la expresión que se obtiene en mecánica cuántica (no relativista) empleando un formalismo diferente.

Por otro lado, si calculásemos mediante [4.4.4] la sección eficaz total (integrada para todos los ángulos), obtendríamos un valor infinito. Esto no debe extrañarnos, ya que al ser la fuerza de interacción de tipo coulombiano se anula demasiado lentamente en el infinito. Dicho de otro modo, la partícula α siempre es desviada aunque pase lejos del núcleo (parámetro de impacto grande). Al mismo resultado se llega en mecánica cuántica. Conviene notar, sin embargo, que no todas las fuerzas de largo alcance poseen secciones eficaces totales infinitas. De hecho, aquellas fuerzas derivadas de potenciales que, a grandes distancias, disminuyan más rápido que $1/r^2$ tendrán secciones eficaces finitas.

En la deducción de la fórmula de Rutherford supusimos que el átomo, y más concretamente, el núcleo, permanecía quieto durante el proceso de dispersión. Esto tiene sentido cuando se manejan partículas α y núcleos pesados, pero no ocurre lo mismo si las masas de las partículas que interaccionan son comparables, en cuyo caso *ambas* partículas se mueven. El lector podría pensar que el problema de dos cuerpos que se plantea es reducible al que acabamos de estudiar sustituyendo la masa de la partícula α por la masa reducida del sistema. Sin embargo, la solución no es tan simple. Nótese (véase figura 4.8) que el ángulo de dispersión que realmente medimos experimentalmente, denotado por δ en la figura, es el formado por las direcciones inicial y final de la partícula α , mientras que el ángulo manejado en el problema reducido de un cuerpo es el que forman las direcciones inicial y final del *vector relativo* entre las dos partículas. Estos dos ángulos tendrán, en general, valores diferentes. Por otro lado, un observador situado sobre el centro de masas del sistema verá las trayectorias descritas por las dos partículas como se ilustra en la figura 4.9. La relación que liga δ con θ resulta ser (el lector puede encontrar el cálculo detallado en textos de mecánica clásica)

$$\operatorname{tg} \delta = \frac{\operatorname{sen} \theta}{\cos \theta + \frac{m_1}{m_2}} \quad [4.4.7]$$

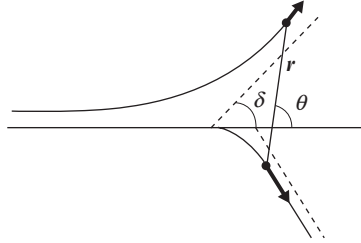


Figura 4.8. Dispersión de partículas α en el sistema de laboratorio. r es el vector relativo (final) entre las partículas.

donde m_1 y m_2 designan las masas de la partícula incidente y del núcleo dispersivo, respectivamente. Si $m_1 \ll m_2$, como ocurre en la dispersión de partículas α por núcleo pesados, es claro de [4.4.7] que $\operatorname{tg} \delta \sim \operatorname{tg} \theta$, y la fórmula de Rutherford se mantiene correcta. Sin embargo, en un caso general, es necesario corregir la expresión de la sección eficaz diferencial que obtuvimos antes. Para ello bastará tener en cuenta que el número de partículas dispersadas en cada elemento de ángulo sólido debe ser el mismo, tanto en el sistema de laboratorio (figura 4.8) como en el sistema del centro de masas (figura 4.9). Se cumple, por tanto (recordar ecuación [4.4.3]),

$$\sigma_{\theta}(\Omega) n I 2\pi \operatorname{sen} \theta d\theta = \sigma'_{\delta}(\Omega) n I 2\pi \operatorname{sen} \delta d\delta \quad [4.4.8]$$

de donde se obtiene

$$\sigma'_{\delta}(\Omega) = \sigma_{\theta}(\Omega) \frac{\operatorname{sen} \theta d\theta}{\operatorname{sen} \delta d\delta} \quad [4.4.9]$$

siendo $\sigma_{\theta}(\Omega)$ la dada en [4.4.6]. Despejando θ en función de δ en [4.4.7] y sustituyendo el resultado en la expresión anterior, se determinaría $\sigma'_{\delta}(\Omega)$.

De la ecuación [4.4.7] se siguen consecuencias interesantes: por ejemplo, si $m_1 = m_2$, entonces $\delta = \theta/2$. Esto implica que cuando las masas de las partículas que interactúan son iguales, el ángulo máximo de dispersión en el sistema de laboratorio no puede exceder de 90° .

Cuando la lámina de material dispersor sea gruesa se producirá, según indicábamos antes, una atenuación del haz incidente conforme se propague en su interior. La intensidad del haz a la salida, así como la probabilidad de dispersión en función de la distancia atravesada, pueden determinarse de manera simple en términos de la sección eficaz correspondiente. Para verlo supongamos una partícula desplazándose en un medio formado por un conjunto de centros dispersores idénticos e inmóviles que se encuentran distribuidos aleatoriamente con los cuales puede interactuar (colisionar). Denotemos por $f(z)$ una función, de momento desconocida, representando la probabilidad de que nuestra partícula en cuestión recorra una distancia z sin colisionar. Sabemos, por otro lado, que la probabili-

dad de que se produzca una colisión al propagarse una distancia *pequeña*, dz , es proporcional a dicha longitud, siendo la constante de proporcionalidad el producto $\sigma\rho$, donde, como antes, σ denota la sección eficaz y ρ la densidad de átomos del material dispersor.

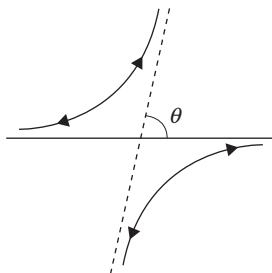


Figura 4.9. Dispersión de partículas α en el sistema del centro de masas. Nótese que el ángulo que forman las direcciones inicial y final del vector relativo entre las partículas (θ en la figura) es el ángulo de dispersión.

A fin de determinar $f(z)$ calculemos la probabilidad de que la partícula atraviese una distancia $z + dz$ sin sufrir ninguna colisión. De acuerdo con la definición de $f(z)$, la probabilidad buscada será, en este caso

$$f(z + dz) \tag{4.4.10}$$

Pero, por otro lado, el recorrido $z + dz$ puede descomponerse en dos etapas: una primera, de longitud z , y, a continuación, otra de longitud dz . Como estadísticamente ambos tramos son independientes, la teoría probabilística nos dice que la probabilidad de ocurrencia del suceso compuesto es igual al producto de las probabilidades de ocurrencia de cada suceso elemental por separado, es decir, [4.4.10] tomará la forma

$$f(z)(1 - \sigma\rho dz) \tag{4.4.11}$$

Para escribir [4.4.11] se ha tenido en cuenta que $1 - \sigma\rho dz$ nos da la probabilidad de que no se produzca ninguna colisión en el intervalo dz . Es evidente que las probabilidades establecidas por ambos procedimientos (ecuaciones [4.4.10] y [4.4.11]) deben coincidir, por lo que cumplirá

$$f(z + dz) = f(z) - \sigma\rho f(z) dz \tag{4.4.12}$$

Ahora bien, la cantidad $[f(z + dz) - f(z)]/dz$ no es otra cosa que la derivada df/dz cuando la distancia dz tiende a cero. Podremos escribir, pues, la ecuación [4.4.12] en la forma

$$\frac{df}{dz} = -\sigma\rho f \tag{4.4.13}$$

cuya resolución es inmediata, obteniéndose

$$f(z) = Ae^{-\sigma\rho z} \quad [4.4.14]$$

Para hallar la constante A basta tener en cuenta que $f(0)$ debe ser igual a 1^6 . Imponiendo esta condición en (4.4.14), se encuentra $A = 1$, esto es

$$f(z) = e^{-\sigma\rho z} \quad [4.4.15]$$

que es la función buscada. Puede demostrarse (véase capítulo 34) que el producto $\sigma\rho$ coincide con el inverso del recorrido libre medio de las partículas en ese material⁷.

Supongamos ahora que, en lugar de disponer de una sola partícula, manejamos un haz de intensidad I , es decir, en la unidad de tiempo I partículas atraviesan la unidad de área del material dispersor, todas ellas propagándose inicialmente en la dirección z . Es claro que cuando alguna de dichas partículas colisione, se apartará de su trayectoria inicial, originando, por consiguiente, una disminución del número de partículas que viajan según z , o, lo que es lo mismo, una reducción de la intensidad del haz. Tras atravesar una longitud z el número resultante N de partículas que *no* han experimentado desviación se calculará a partir de [4.4.15] multiplicando simplemente por I :

$$N = Ie^{-\sigma\rho z} \quad [4.4.16]$$

N nos da, en consecuencia, la intensidad del haz no dispersado a la salida de una lámina de espesor z . Nótese que N posee también dimensiones de flujo de partículas por unidad de área. A la vista de [4.4.16] se comprende que al producto $\sigma\rho$ se le denomine frecuentemente factor de atenuación.

4.5. SERIES ESPECTRALES. PRINCIPIO DE COMBINACIÓN

La validez de cualquier modelo atómico estará condicionada a la justificación del espectro de la radiación emitida (o absorbida) por las distintas sustancias. Aunque el modelo de Rutherford proporciona una explicación satisfactoria de los procesos dispersivos, es necesario, además, comprobar si existe acuerdo con los resultados experimentales espectroscópicos. Para ello será preciso, obviamente, conocer cuáles eran éstos.

En el esquema simplificado de la figura 4.10 se muestra el montaje utilizado para la determinación del espectro emitido por una fuente. Ya vimos en el primer capítulo que los sólidos a altas temperaturas poseían un espectro continuo. Sin embargo, si hacemos pasar una descarga eléctrica a través de un gas monoatómico, el espectro de la radiación

⁶ La probabilidad de que una partícula recorra sin colisionar una distancia nula es, evidentemente, la unidad.

⁷ El recorrido libre medio puede definirse como la distancia promedio que recorre una partícula sin sufrir ninguna colisión.

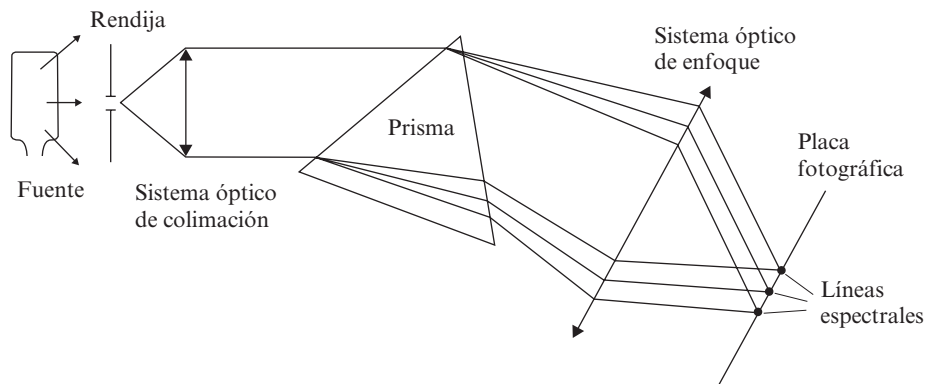


Figura 4.10. Montaje espectroscópico para la determinación del espectro de una fuente de radiación.

emitida presenta una estructura regular en forma de líneas con el aspecto mostrado en la figura 4.11 para el caso más simple del hidrógeno⁸. En 1885, un maestro de escuela, Balmer, probó que la longitud de onda de las cuatro primeras rayas del espectro visible del hidrógeno podían obtenerse a partir de la siguiente ecuación empírica:

$$\lambda = 3645.6 \left(\frac{n^2}{n^2 - 4} \right) \text{Å} \quad [4.5.1]$$

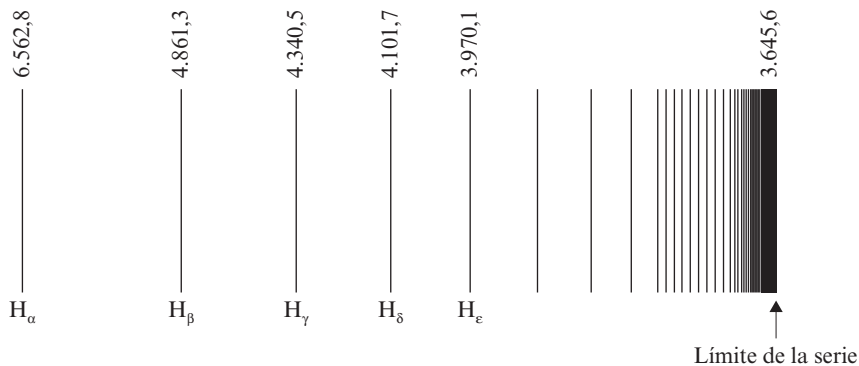


Figura 4.11. Espectro de líneas del hidrógeno atómico correspondiente a la serie de Balmer. Es corriente designar las primeras líneas mediante subíndices siguiendo el alfabeto griego.

⁸ El hecho de que sean líneas se debe a la forma alargada de la rendija inicial. Lo realmente importante y característico de cada sustancia es la posición absoluta y la separación relativa entre tales líneas. De hecho, la estructura espectral del hidrógeno atómico contenido en una lámpara de laboratorio es idéntica a la observada en el hidrógeno existente en las estrellas o en las protuberancias solares.

donde n es un entero que vale 3, 4, 5 y 6, respectivamente, en orden decreciente de λ . La precisión conseguida con la fórmula anterior fue sorprendente: por ejemplo, para la raya α el error cometido era inferior a 1 por diez mil. Es más, la expresión [4.5.1] permitió ajustar, asimismo, con gran precisión otras cinco líneas en el rango del ultravioleta, que correspondieron a sucesivos valores de $n = 7, 8, 9, 10$ y 11. En espectroscopía es corriente manejar el inverso de la longitud de onda, que denotaremos por κ . En términos de κ , la ecuación [4.5.1] nos queda

$$\kappa = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad , \quad n = 3, 4, 5, \dots \quad [4.5.2]$$

donde R_H es la denominada constante de Rydberg para el hidrógeno, cuyo valor es⁹

$$R_H = 10967757.6 \pm 1.2 \text{ m}^{-1} \quad [4.5.3]$$

lo que da idea de la precisión actual de las medidas espectroscópicas. Al conjunto de líneas descritas por la ecuación [4.5.2] se le denomina *serie espectral*. A partir de [4.5.2] se observa que la separación, en unidades de κ , entre líneas consecutivas decrece conforme aumenta n , de manera que se hace prácticamente nula en un entorno de la línea límite de la serie, $n = \infty$, para la cual $\kappa = R_H/4$. Además de esta peculiar distribución espectral, experimentalmente se aprecia una disminución en la intensidad de las rayas al aumentar n , haciéndose, por tanto, más difícil la detección de las líneas con n alto. Por ello resulta sumamente complicado registrar más allá de 30 términos de la serie.

Además de la serie de Balmer, se encontraron posteriormente¹⁰ otros conjuntos de líneas para el hidrógeno que podían agruparse mediante fórmulas empíricas similares. Así surgieron las siguientes series designadas por los nombres de sus descubridores:

Serie de Lyman

$$\kappa = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad , \quad n = 2, 3, 4, \dots \quad [4.5.4]$$

Serie de Paschen

$$\kappa = R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad , \quad n = 4, 5, 6, \dots \quad [4.5.5]$$

⁹ La constante de Rydberg R , llamada así en honor al espectroscopista sueco del mismo nombre, aumenta muy ligeramente (dentro de un margen del 0.05 %) conforme se incrementa el peso atómico del elemento en cuestión.

¹⁰ Las series de Lyman, Brackett y Pfund no fueron descubiertas hasta bastantes años después (véase la sección 5.3 del capítulo siguiente).

Serie de Brackett

$$\kappa = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad , \quad n = 5, 6, 7, \dots \quad [4.5.6]$$

Serie de Pfund

$$\kappa = R_H \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad , \quad n = 6, 7, 8, \dots \quad [4.5.7]$$

El lector puede comprobar fácilmente que todas estas series para el hidrógeno atómico obedecen a la fórmula general

$$\kappa = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad [4.5.8]$$

donde m es un entero que designa la serie, y n el término de la serie. Las cantidades R_H/m^2 y R_H/n^2 en [4.5.8] son denominadas habitualmente *términos espectrales*. A partir de todo ello, Ritz formuló empíricamente, en 1908, el llamado *principio de combinación*, que puede enunciarse como sigue: el valor de κ de cualquier línea espectral de un elemento viene dado por la diferencia entre dos de sus términos espectrales. Esto equivale a afirmar que si se conocen los valores de κ de cualesquiera dos líneas espectrales de una misma serie, su diferencia nos dará un valor de κ correspondiente a una raya espectral de otra serie diferente.

Según mencionamos antes, el principio de combinación tuvo un origen puramente empírico, y fue considerado durante un tiempo como mera curiosidad numérica. Su sentido más profundo no fue reconocido, sin embargo, hasta la formulación, en 1913, de los postulados cuánticos de Bohr, pero esto ya es tema del siguiente capítulo.

Hasta ahora hemos hablado de espectros de *emisión*. Podríamos haberlo hecho igualmente de los denominados espectros de absorción, que corresponden a aquellas longitudes de onda que son *absorbidas* por los átomos del material. El dispositivo experimental que debe utilizarse para su determinación es similar al mostrado en la figura 4.10, sólo que ahora se emplea una fuente de espectro continuo y el gas bajo estudio se coloca en un recipiente de paredes transparentes, entre la fuente y el prisma. Sobre la placa fotográfica revelada (negativo) observaremos un fondo completamente ennegrecido, correspondiente al espectro continuo de la fuente, salvo un conjunto de líneas claras, justamente las que no han llegado a impresionar la placa al haber sido absorbidas por el gas. El espectro de la placa es, en cierta medida, el negativo del espectro de emisión. Esta similitud resultaría completa si no fuera porque *no todas las líneas del espectro de emisión aparecen en el de absorción*, aunque la inversa, sin embargo, sí se cumple, es decir, para cada línea de absorción existe la misma línea de emisión. Por ejemplo, el hidrógeno a baja temperatura sólo muestra, bajo absorción, la serie de Lyman, mientras que a altas temperaturas, como ocurre en las estrellas, aparece la serie de Balmer. Una explicación de estos comportamientos la encontramos en el próximo capítulo.

4.6. INSUFICIENCIA DEL MODELO ATÓMICO DE RUTHERFORD

No es difícil demostrar, apoyándonos en la teoría electromagnética clásica, la insuficiencia del modelo atómico propuesto por Rutherford. Dos son los problemas que no encuentran explicación en un marco puramente clásico: por un lado, la estabilidad del modelo planetario, y, por otro, la composición espectral de la radiación emitida por los átomos. Analicemos cada una de estas cuestiones por separado.

Aunque el modelo de Rutherford es mecánicamente estable, sin embargo, la presencia de carga en las partículas que giran alrededor del núcleo origina, según la teoría clásica de la radiación, la emisión de radiación electromagnética, con la subsiguiente pérdida de energía por parte del electrón. Esto es cierto para cualquier carga que se desplace con movimiento acelerado. De hecho, la potencia radiada, P , por una carga acelerada e viene dada por la relación

$$P = \frac{dE}{dt} = \frac{e^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \left| \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right|^2 \quad [4.6.1]$$

donde E y v denotan la energía total y la velocidad de la partícula cargada, respectivamente, y la barra horizontal expresa el promedio temporal¹¹. Esta pérdida continua de energía se realizaría a expensas de su energía mecánica, con lo cual, al cabo de un tiempo que, para un átomo de diámetro $\sim 1 \text{ \AA}$ resultaría ser inferior a 10^{-10} s, el electrón caería en espiral sobre el núcleo, emitiendo radiación de espectro continuo. Esto se encuentra en total desacuerdo con los resultados experimentales que vimos antes, en los cuales el espectro tenía carácter discreto en forma de líneas bien definidas.

Puede estimarse de manera simple el tiempo de caída del electrón hacia el núcleo. Supondremos, por sencillez, que se trata de un átomo de hidrógeno. Consideremos entonces, a efectos de cálculo estimativo, que el electrón va recorriendo en cada instante órbitas circulares de radio r . Naturalmente, el radio de tales órbitas irá disminuyendo conforme se acerque al núcleo. En la hipótesis de que el electrón describa inicialmente una órbita de radio $r_0 \sim 1 \text{ \AA}$, para calcular el tiempo de colapso Δt_c bastará evaluar la cantidad dr/dt y hacer uso de la relación

$$\Delta t_c \sim r_0 / (dr/dt)_{r=r_0} \quad [4.6.2]$$

Ahora bien, como la fuerza de interacción es de tipo coulombiano, la ley de Newton nos dice¹²

$$m_e \left| \frac{dv}{dt} \right| = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad [4.6.3]$$

¹¹ Téngase en cuenta que, desde un punto de vista experimental, no puede conocerse la potencia instantánea, ya que ésta presenta oscilaciones, por ejemplo, en el rango visible, del orden de 10^{15} Hz. Ningún detector puede seguir, por tanto, tales fluctuaciones, y la cantidad realmente registrada será el promedio sobre intervalos de tiempo suficientemente grandes.

¹² Supondremos el caso no relativista.

Por otro lado, la energía total del electrón (suma de cinética y potencial) girando a una distancia r del núcleo vale¹³

$$E = \frac{1}{2}V = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad [4.6.4]$$

donde V denota la energía potencial. Finalmente, dado que el ritmo de pérdida de energía viene dado por [4.6.1], expresando dr/dt en función de dE/dt a partir de [4.6.4] y teniendo en cuenta las ecuaciones [4.6.2] y [4.6.3] se obtiene

$$\Delta t_c \sim \frac{12\pi^2 e_0^2 c^3 m_e^2 r_0^3}{e^4} \sim 10^{-10} \text{ s} \quad [4.6.5]$$

como habíamos indicado más arriba.

Aun admitiendo, a través de algún mecanismo desconocido, que el átomo fuese estable, el modelo de Rutherford tal cual no podría dar cuenta de las series espectrales observadas. En efecto, la teoría clásica establece como modelo de fuente de luz elemental una partícula cargada que ejecuta oscilaciones. Supongamos, al menos en principio, que en nuestro modelo planetario el electrón describe órbitas circulares alrededor de un núcleo puntual. Como es bien conocido en Mecánica, este movimiento de rotación puede considerarse superposición de dos movimientos lineales oscilatorio-armónicos, de la misma frecuencia y amplitud, y desfasados entre sí un cuarto de período. El movimiento en el plano vendrá descrito, por consiguiente, por las ecuaciones

$$x = a \cos \omega t \quad [4.6.6.a]$$

$$y = a \sin \omega t \quad [4.6.6.b]$$

¹³ Este resultado es una consecuencia del denominado *teorema del virial*, ampliamente utilizado en la teoría cinética de los gases, que para sistemas con movimiento periódico puede enunciarse como sigue: sea un conjunto de partículas puntuales con vectores de posición r_i , actuando sobre cada una de ellas una fuerza F_i . La energía cinética total del sistema, K , promediada en un período, viene dada entonces por la igualdad

$$\bar{K} = -\frac{1}{2} \overline{\sum_i F_i \cdot r_i}$$

donde la barra horizontal denota el mencionado promedio. El miembro de la derecha se conoce con el nombre de virial de Clausius. Para una sola partícula bajo la acción de un potencial central V la expresión anterior se convierte en

$$\bar{K} = \frac{1}{2} \overline{\frac{\partial V}{\partial r} r}$$

donde r denota la coordenada radial. En el caso particular de fuerzas inversamente proporcionales al cuadrado de la distancia, $V \propto 1/r$ y nos queda, finalmente,

$$\bar{K} = -\frac{1}{2} \bar{V}$$

de donde se deduce inmediatamente la ecuación [4.6.4].

Como la radiación emitida por ambos osciladores ortogonales posee la misma frecuencia angular, ω , es claro que el espectro de emisión del átomo de hidrógeno estaría formado por una única línea espectral.

A fin de intentar explicar la multiplicidad de líneas observadas en los experimentos, podríamos considerar que el electrón se mueve describiendo órbitas elípticas¹⁴. En este caso las componentes del movimiento según los ejes x e y en el plano de la trayectoria no toman la forma armónica simple de las ecuaciones [4.6.6]. Sin embargo, al tratarse de movimientos periódicos, siempre podremos desarrollarlos en serie de Fourier, es decir, escribirlos como superposición de oscilaciones armónicas simples de frecuencias múltiplos de la propia del sistema¹⁵, en otras palabras,

$$x = a_1 \cos \omega t + a_2 \cos 2 \omega t + a_3 \cos 3 \omega t + \dots \quad [4.6.7.a]$$

$$y = b_1 \sin \omega t + b_2 \sin 2 \omega t + b_3 \sin 3 \omega t + \dots \quad [4.6.7.b]$$

Naturalmente, la frecuencia principal ω es la misma en las direcciones x e y , ya que ambos movimientos ortogonales poseen el mismo período. En consecuencia, las ecuaciones [4.6.7] conducen a que el espectro de la radiación emitida por un electrón describiendo órbitas elípticas estaría formado por líneas espectrales correspondientes a la frecuencia principal y sus armónicos, esto es, ω , 2ω , 3ω , ... Desgraciadamente, sin embargo, en los espectros de emisión de los átomos no se observan armónicos de ninguna clase, por lo que estaremos lejos de justificar las series espectrales encontradas experimentalmente, y menos aún la fórmula [4.5.8].

Dejaremos para el capítulo siguiente el ingenioso modelo con el que Bohr intentó resolver esta situación.

EJERCICIOS

4.1. Escribir la expresión que nos da la frecuencia de la radiación emitida según el modelo de Thomson en términos del tamaño del átomo.

4.2. A partir de la expresión [4.2.7], y teniendo en cuenta que la masa de la partícula α es 7344 veces mayor que la del electrón, demostrar que el mayor ángulo de desviación que puede sufrir una partícula α al chocar contra un electrón es del orden de 5×10^{-4} rad.

¹⁴ En efecto, según la mecánica clásica el electrón, describiría una elipse con el núcleo en uno de sus focos, siendo la frecuencia del movimiento, en el caso del hidrógeno

$$v = \frac{1}{\pi e^2} \left(\frac{2|E|^3}{\mu} \right)^{1/2}$$

donde $E(<0)$ denota la energía total del electrón y μ designa la masa reducida del sistema protón-electrón $\mu = m_e m_p / (m_e + m_p)$. Las órbitas circulares no constituirían más que un caso particular de las elípticas.

¹⁵ Esta frecuencia angular propia ω estará conectada con el tiempo T que tarda el electrón en recorrer una órbita (período) mediante la relación habitual $\omega = 2\pi/T$.

4.3. Siguiendo el modelo de Thomson, la teoría estadística predice que el número de partículas α dispersadas en el intervalo angular θ , $\theta + d\theta$ es $2I_0(\theta/a^2) \exp [-(\theta/a)^2]$, donde $\alpha \equiv (\bar{\theta}^2)^{1/2} \sim 1^\circ$, e I_0 es el número de partículas α incidentes. ¿Qué porcentaje de las mismas son dispersadas ángulos mayores de 90° ?

4.4. Probar que el parámetro D definido en [4.3.12] representa la distancia de máximo acercamiento de la partícula α al núcleo en una colisión frontal ($s = 0$).

4.5. Probar que la distancia de máximo acercamiento D_θ al núcleo en una colisión no frontal ($s \neq 0$) viene dada por la ecuación [4.3.15].

4.6. Expresar, en términos del correspondiente factor de atenuación, la distancia que debe atravesar un haz de partículas α para que la intensidad del haz no dispersado se reduzca a la mitad.

4.7. Determinar las líneas espectrales de longitud de onda mayor y las líneas límite de las tres primeras series espectrales del átomo de hidrógeno.

5

Teoría de Bohr

Pedro M. Mejías

5.1. INTRODUCCIÓN

En los capítulos anteriores hemos ido analizando un conjunto de fenómenos y experimentos que ponían de manifiesto el comportamiento dual tanto de la radiación como de la materia, así como la estructura a escala atómica de esta última. Sin embargo, se echa en falta un cuerpo de doctrina coherente que permita explicar satisfactoriamente dichos fenómenos y a su vez predecir otros nuevos, justificando la cuantificación energética que se produce en sistemas físicos muy diversos. Tal es la tarea que abordaremos en este capítulo, mostrando un primer intento de explicación de los sistemas atómicos debido a Bohr, extendido posteriormente a sistemas físicos multiperiódicos por Sommerfeld, Wilson e Ishiwara. Es lo que se denominó teoría cuántica antigua. Un papel esencial en su desarrollo e incluso en la fundamentación de lo que constituiría años después la mecánica cuántica que aceptamos actualmente lo desempeñó el llamado principio de correspondencia, el cual estableció formalmente el puente entre las leyes clásicas y cuánticas. Una necesariamente breve revisión del mismo se ofrece en la sección 5.5, aunque aparecerá en otras ocasiones a lo largo del capítulo.

5.2. POSTULADOS DE BOHR

Es claro, a la vista de lo discutido en el capítulo anterior, que el modelo de Rutherford y la electrodinámica clásica resultan incompatibles entre sí, aunque esta última proporciona resultados satisfactorios a nivel macroscópico. Ahora bien, ¿por qué hemos de suponerla correcta a escala atómica? Bohr dio una respuesta mediante el siguiente postulado:

- I. Un sistema atómico posee cierto número de estados, que denominaremos estacionarios, en los cuales no se produce ninguna emisión de radiación, incluso aunque las partículas se muevan entre sí y tal emisión sea esperable de acuerdo con la electrodinámica clásica.

Por otro lado, vimos en el capítulo anterior que se obtenían resultados acordes con la experiencia si considerábamos que las partículas interactuaban conforme a las leyes de la mecánica clásica. Además, el modelo de Rutherford establecía que el electrón giraba en

torno al núcleo describiendo órbitas circulares o elípticas. A partir del postulado anterior, no existe ninguna dificultad en admitir la validez de este esquema atómico en lo concerniente a estados estacionarios, pero surge el problema de explicar la transición entre tales estados. Bohr introdujo así un segundo postulado:

- II. El equilibrio dinámico de los sistemas en los estados estacionarios está regido por las leyes ordinarias de la mecánica. Sin embargo, dichas leyes no son aplicables cuando se trata de transiciones entre estados estacionarios.

El comportamiento de los sistemas en los procesos de emisión y absorción de radiación fue establecido por Bohr a partir de una ingeniosa adaptación de la teoría de Planck. Bohr supuso que en el paso de un estado estacionario a otro de energía inferior era emitido un cuanto de energía. En la absorción se producía el proceso inverso: un cuanto de energía era absorbido en la transición a un estado estacionario de mayor energía. En ambos casos la energía de dicho cuanto la escribió como el producto de la constante de Planck por una frecuencia adecuada. Estas consideraciones las resumió Bohr en el siguiente postulado:

- III. Toda emisión y absorción de radiación en un sistema atómico es originada por la transición entre dos estados estacionarios. La radiación emitida (o absorbida) durante tal transición corresponde a un cuanto de energía cuya frecuencia ν está determinada mediante la relación

$$h\nu = |E_i - E_f| \quad [5.2.1]$$

donde E_i y E_f representan las energías del sistema en los estados estacionarios inicial y final, respectivamente¹.

Para completar el esquema conceptual de Bohr nos falta por determinar cuáles son las energías de los estados estacionarios o, equivalentemente, las frecuencias ν de los cuantos de radiación. Para ello² consideremos un electrón de masa m girando a velocidades no relativistas en una órbita circular de radio r alrededor de un núcleo de carga $+Ze$. Dada

¹ Es necesario señalar que el postulado III y, concretamente, la expresión [5.2.1] no tiene en cuenta el retroceso del átomo, exigido por la conservación del momento lineal. No obstante, la corrección que habría que efectuar sería extraordinariamente pequeña. De hecho (véase ejercicio 5.1) se tendría

$$h\nu \approx \Delta E \left(1 - \frac{\Delta E}{2m_f c^2} \right)$$

donde m_f es la masa del átomo en el estado final, y $\Delta E = |E_i - E_f|$. Un valor típico del cociente que aparece dentro del paréntesis es 10^{-9} , despreciable frente a la unidad.

² Lo que presentamos aquí es una posible justificación de lo que constituirá el cuarto postulado de Bohr (véase, en este sentido, el libro de Cropper mencionado en la bibliografía). Pueden darse, asimismo, otras argumentaciones, empleadas también por Bohr, aunque resultan menos convincentes e ilustrativas desde un punto de vista conceptual.

la simetría de nuestro problema, utilizaremos coordenadas polares planas (r, θ), situando el origen sobre el núcleo, que supondremos, de momento, fijo. La energía cinética K de dicho electrón valdrá

$$K = \frac{1}{2} m r^2 \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 = 2\pi^2 m r^2 f^2 \quad [5.2.2]$$

donde $f = (d\theta/dt)/2\pi$ es la frecuencia de rotación del electrón, es decir, el número de vueltas que da por segundo. Recordando que, según el postulado II, es válida la mecánica clásica, podemos aplicar aquí la segunda ley de Newton, obteniéndose

$$\frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m r \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 = 4\pi^2 m r f^2 \quad [5.2.3]$$

ya que $r(d\theta/dt)^2$ nos da la componente radial de la aceleración. De [5.2.2] y [5.2.3] se desprende inmediatamente

$$K = \frac{Z e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad [5.2.4]$$

lo que, unido al valor de la energía potencial,

$$V = -\frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad [5.2.5]$$

nos da una energía total E para el electrón moviéndose en una órbita de radio r igual a³

$$E = K + V = \frac{-Z e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad [5.2.6]$$

Es claro de [5.2.6] que E toma valores negativos. El signo menos en la energía total se debe únicamente a la elección del origen de potencial. Es usual en mecánica clásica, y así lo hemos hecho, asociar una energía potencial nula a un electrón situado a distancias infinitamente grandes del núcleo. De acuerdo con este criterio, un estado con energía total negativa significará simplemente que la energía del electrón en dicho estado es inferior a la que tendría si se encontrase en reposo a una distancia *infinita* del núcleo. Una energía

³ La energía total también puede obtenerse aplicando el teorema clásico del virial (véase capítulo anterior):

$$E = \bar{K} + \bar{V} = \frac{1}{2} \bar{V} = \frac{1}{2} V$$

Al escribir la expresión anterior hemos tenido en cuenta la relación $\bar{V} = -2\bar{K}$, y el hecho de que las órbitas sean circulares, en cuyo caso V y K se mantienen constantes en cada período.

total positiva representará, entonces, a un electrón no ligado, el cual describirá, como es bien conocido en los textos de física clásica, trayectorias de tipo hiperbólico (no cerradas), al contrario de lo que sucedería si estuviese ligado, en cuyo caso recorrerá elipses. A la cantidad $-E$, esto es, a la energía mínima que es necesario comunicar al electrón para que adquiera energía positiva, la denotaremos por la letra W , denominándola energía de ligadura o energía de ionización, y podremos escribir, por tanto,

$$W = -E = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad [5.2.7]$$

A la inversa, para formar un átomo constituido por un electrón ligado a un núcleo, será necesario invertir una cantidad de energía W , la cual será proporcionada a expensas de una cantidad igual de energía del sistema total. Naturalmente, W dependerá del estado estacionario final en el que se encuentre el electrón. Por analogía con la teoría de Planck de la cavidad radiante, Bohr partió de una relación del tipo

$$W \propto hf \quad [5.2.8]$$

entre la energía de ligadura y la frecuencia de rotación f del electrón, y postuló además que las energías de los distintos estados estacionarios diferían en múltiplos enteros de la cantidad hf . En otras palabras, las energías de enlace podían escribirse en la forma

$$W \propto nhf \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad [5.2.9]$$

Esta hipótesis, que relaciona cierta cuantificación de la energía de los *átomos* con las frecuencias de rotación del electrón, recuerda formalmente la hipótesis de Planck, que conectaba la cuantificación de la energía de los *osciladores* de las paredes de la cavidad resonante con sus frecuencias de vibración. En este sentido, no deja de resultar significativa (véase sección 4.6) la analogía existente entre un movimiento de rotación circular y otro oscilatorio armónico. Podemos conseguir la igualdad en [5.2.9] introduciendo una constante α a determinar:

$$W = \alpha nhf \quad [5.2.10]$$

Por similitud con la teoría de Planck, el lector puede estar tentado de asignar directamente el valor $\alpha = 1$ en [5.2.10]. Sin embargo, hemos de ser sumamente cautelosos al respecto, ya que los átomos constituyen sistemas dinámicos diferentes a los osciladores armónicos. El valor de α debe, por tanto, obtenerse de manera independiente a la teoría de Planck. Para ello, consideremos la situación en la cual el número cuántico n toma valores muy elevados. En tal caso, vamos a demostrar que las órbitas electrónicas asociadas a los correspondientes estados estacionarios poseen radios muy grandes y las frecuencias de oscilación, en consecuencia, se hacen muy pequeñas: en efecto, recordando [5.2.3] y [5.2.7], se tiene

$$f = \frac{4\epsilon_0}{Ze^2} \left(\frac{2W^3}{m} \right)^{1/2} \quad [5.2.11]$$

que se convierte, teniendo en cuenta [5.2.10], en

$$f_n = \frac{mZ^2e^4}{32\epsilon_0^2\alpha^3n^3h^3} \quad [5.2.12]$$

donde el subíndice n designa el estado estacionario (ligado al número cuántico n). Multiplicando la expresión por αnh , obtenemos

$$W_n = \frac{mZ^2e^4}{32\epsilon_0^2\alpha^2n^2h^2} \quad [5.2.13]$$

igual, pero de signo contrario a la energía E_n del estado n -ésimo. A la vista de [5.2.12] y [5.2.13] es fácil inferir que cuanto mayor sea n tanto menores serán f_n y W_n , aumentando por el contrario (recuérdese [5.2.7]) los radios r de las órbitas, tal y como habíamos pronosticado más arriba.

Volviendo a nuestra argumentación central, conviene introducir aquí un postulado auxiliar conocido universalmente como *principio de correspondencia*, del cual se sirvió Bohr en numerosas ocasiones y que, a la postre, desempeñó un papel esencial en el desarrollo conceptual de la mecánica cuántica de Heisenberg⁴. Podría enunciarse este principio afirmando que *en el límite de los números cuánticos grandes (tendiendo a infinito) los resultados de la física cuántica deben coincidir con los de la física clásica*. Dicho de otro modo, las leyes clásicas y cuánticas deben converger cuando hacemos tender n a infinito. Esta idea no debe resultar extraña al lector: por ejemplo, al analizar el espectro de la radiación emitida por un cuerpo negro en equilibrio térmico a temperatura T , veíamos que los resultados clásicos y cuánticos coincidían para frecuencias suficientemente pequeñas. Ahora bien, la energía promedio E de los osciladores elementales de las paredes de la cavidad, calculada desde un punto de vista cuántico, puede escribirse formalmente como sigue:

$$E = \bar{n}h\nu \quad [5.2.14]$$

donde la barra horizontal denota el promedio sobre el conjunto. Este valor de E , cuando $\nu \rightarrow 0$, sabemos que coincide con el resultado clásico, es decir,

$$\bar{n}h\nu \rightarrow k_B T \quad , \quad \text{para } \nu \rightarrow 0 \quad [5.2.15]$$

Como k_B y T son constantes independientes de ν y ν tiende a cero, la única forma de satisfacer [5.2.15] es haciendo tender \bar{n} a infinito, o, lo que es lo mismo, el resultado clásico se alcanzará cuando tomemos en nuestras expresiones cuánticas valores de n suficientemente grandes, como postula el principio de correspondencia. Volveremos sobre este punto en la sección 5.5.

⁴ Aunque en los primeros trabajos publicados por Bohr en 1913 sobre la estructura del átomo de hidrógeno se hacía uso implícito del principio de correspondencia, sus contribuciones fundamentales sobre el mismo no aparecieron publicadas, sin embargo, hasta varios años después (período 1918-1923).

En relación con el modelo atómico que nos ocupa, la constante α definida en [5.2.10] es, evidentemente, independiente del estado estacionario de que se trate, es decir, no dependerá de n . Consideremos entonces una transición desde el estado $n + 1$ al estado n . A partir de [5.2.13], teniendo en cuenta el postulado III y recordando que $E = -W$, se obtiene para la frecuencia del cuanto de radiación emitido en dicha transición

$$\nu = \frac{mZ^2e^4}{32\varepsilon_0^2\alpha^2h^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right) \quad [5.2.16]$$

Si ahora hacemos tender n a infinito (límite clásico), la expresión anterior, deducida a partir de un formalismo cuántico, tomará la forma

$$\nu \approx \frac{mZ^2e^4}{32\varepsilon_0^2\alpha^2h^3} \left(\frac{2}{n^3} \right) \quad [5.2.17]$$

Pero, por otro lado, la electrodinámica clásica asegura que la frecuencia de la radiación emitida por un electrón dando vueltas es igual a su frecuencia de rotación f_n (véase la última sección del capítulo anterior) dada por [5.2.12]. La aplicación aquí del principio de correspondencia obliga a igualar esta última ecuación a [5.2.17], obteniéndose

$$\nu = \frac{mZ^2e^4}{16\varepsilon_0^2h^3n^3\alpha^2} = f_n = \frac{mZ^2e^4}{32\varepsilon_0^2h^3n^3\alpha^3} \quad [5.2.18]$$

que sólo se satisface si $\alpha = 1/2$. La expresión de W (y, por tanto, de $-E$) compatible con el principio de correspondencia será, por consiguiente,

$$W = \frac{1}{2} nhf_n \quad [5.2.19]$$

Todo este razonamiento, en particular la ecuación [5.2.19], fue plasmado por Bohr en el siguiente y último *postulado*:

- IV. Los estados estacionarios del sistema formado por un electrón girando alrededor de un núcleo vienen determinados por la relación

$$K = \frac{1}{2} nhf \quad [5.2.20]$$

donde K es el valor promedio de la energía de dicho sistema, f la frecuencia de la rotación y n un número entero positivo.

Nótese que, en el enunciado del postulado, Bohr empleó la energía cinética en lugar de la energía de ligadura W . Esto no constituye ninguna modificación esencial, ya que,

como el lector puede comprobar inmediatamente comparando [5.2.4] y [5.2.7], W y K son numéricamente idénticas. De [5.2.20] se desprende que, en el modelo atómico de Bohr, la energía de ionización y, en consecuencia, la energía total E del electrón, sólo puede tomar determinados valores discretos; en otras palabras, está cuantificada.

Es muy frecuente hallar en otros libros de texto una formulación equivalente del postulado anterior en términos del momento angular L del electrón en su órbita. Recordando la expresión de L en polares planas ($L = mr^2 d\theta/dt$), puede demostrarse fácilmente a partir del postulado IV (véase ejercicio 5.2) que el momento angular está también cuantificado de acuerdo con la ecuación

$$L = n\hbar \quad [5.2.21]$$

De hecho, puede enunciarse el cuarto postulado afirmando que *las órbitas estacionarias admisibles son aquellas en las cuales el electrón posee un momento angular orbital múltiplo de h* . Imponiendo el cumplimiento de [5.2.21], la ecuación [5.2.20] se obtiene como simple consecuencia.

Por otra parte, la ecuación [5.2.20] conlleva la discretización (cuantificación) de las velocidades del electrón y de los radios de sus posibles órbitas. En efecto, teniendo en cuenta que para una órbita circular, $L = mvr$, la ecuación [5.2.21] implica

$$mvr = n\hbar \quad [5.2.22]$$

que, junto con la ley de Newton,

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad [5.2.23]$$

nos da

$$v_n = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{n\hbar} \quad [5.2.24]$$

y

$$r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2\hbar^2}{mZe^2} \quad [5.2.25]$$

Llevando este valor de r_n a la expresión de la energía total [5.2.6], se obtiene

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad [5.2.26]$$

que coincide naturalmente con el resultado deducible directamente a partir de [5.2.19] y [5.2.11]. La energía del electrón en las órbitas estacionarias varía, pues, con $1/n^2$. Asimismo, y de acuerdo con [5.2.25], el radio de las órbitas permitidas cambia por el cuadrado de los números naturales. Para el átomo de hidrógeno, la cantidad $4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$ se denomina *radio de Bohr*, y corresponde al radio del estado fundamental (estado de mínima energía) de dicho átomo. Su valor, deducido de [5.2.25], concuerda razonablemente bien con los resultados experimentales conocidos (el valor exacto es $r_{n=1} = 0.52917706 \text{ \AA}$). Además, para $n = 1$, $v \sim 2.2 \times 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, lo que representa menos del 1% de la velocidad de la luz. Esto justifica haber empleado en todo momento expresiones no-relativistas. Es importante notar, sin embargo, que para valores grandes de Z , la velocidad del electrón se haría relativista y, en consecuencia, el modelo anterior dejaría de ser totalmente válido.

En el postulado IV se obligó a que el entero n fuera estrictamente positivo. La justificación de esta restricción (que elimina el valor $n = 0$) se desprende claramente de la ecuación [5.2.21]: si n pudiera tomar el valor 0 el momento angular se anularía, lo que equivaldría a admitir, por un lado, trayectorias rectilíneas que atravesaran el núcleo, y, por otro, velocidades infinitas, lo cual no tendría sentido físico. Por eso, en la teoría de Bohr, el valor mínimo del momento angular debe ser \hbar . Según se verá en capítulos posteriores, esta predicción resultó ser incorrecta, y la teoría más rigurosa de la mecánica cuántica permite para $|L|^2$ los valores $\ell(\ell + 1)\hbar^2$, donde ℓ puede valer 0, 1, 2, ...

En la derivación de los postulados de Bohr supusimos siempre que el núcleo permanecía en reposo; dicho de otro modo, que su masa respecto de la del electrón era infinita. Sin embargo, es bien conocido en mecánica clásica que, en un sistema formado por dos objetos ligados mediante una fuerza central, *ambas* partículas se mueven, girando alrededor del centro de masas común. Esto no invalida los postulados anteriores: puede demostrarse que, al igual que se hace habitualmente en mecánica clásica en problemas similares, y como el lector probablemente habrá adivinado, para incluir el efecto de la masa finita del núcleo bastará sustituir en las expresiones anteriores la masa del electrón, m , por la masa reducida, μ , del sistema electrón-núcleo:

$$\mu = \frac{mM}{m + M} \quad [5.2.27]$$

donde M denota la masa del núcleo. Con este cambio, todos los resultados anteriores permanecen válidos. Aunque ya para el hidrógeno $M/m = 1.836,1$, no debemos menospreciar, sin embargo, la magnitud de esta corrección, dada la extraordinaria precisión de los datos espectroscópicos. De hecho, Bohr, que inicialmente no la había tenido en cuenta, se vio forzado a incluirla en sus expresiones a fin de explicar ciertos resultados experimentales obtenidos por Fowler para el ion de helio (He^+). Asimismo, la relación entre la constante de Rydberg y la masa del núcleo fue empleada en el descubrimiento del isótopo pesado del hidrógeno.

5.3. CONFIRMACIÓN EXPERIMENTAL DE LA TEORÍA DE BOHR

En el capítulo anterior habíamos visto que los datos espectrales conocidos en los primeros años de este siglo para el átomo de hidrógeno podían agruparse en lo que denominábamos series espectrales, obedeciendo la fórmula general (véase ecuación [4.5.8])

$$\kappa = R_{\text{H}} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad [5.3.1]$$

donde, recordemos, m era un entero que designaba la serie, n el término de la serie y R_{H} la constante de Rydberg para el hidrógeno. Esta fórmula, encontrada por vías puramente empíricas, permanecía sin justificación teórica alguna. El modelo de Bohr, construido sobre los cuatro postulados anteriores, permitió deducir la expresión [5.3.1] de manera especialmente elegante como una consecuencia inmediata de dicha teoría. Para verlo basta tener en cuenta el postulado III y la ecuación [5.2.13] con $\alpha = 1/2$ y $Z = 1$:

$$W_n = -E_n = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad [5.3.2]$$

donde E_n es, claro está, la energía total (negativa) del electrón en el estado estacionario caracterizado por el número cuántico n . En particular, para $n \rightarrow \infty$, se cumple $E_n = 0$, que será la energía máxima de un estado *ligado*. Esto también es cierto para cualquier otro valor de Z . Como habrá observado el lector, en [5.3.2] hemos incluido la corrección por masa nuclear finita sustituyendo m por la masa reducida μ . La frecuencia de la radiación emitida en la transición entre los estados E_m (inicial) y E_n (final) valdrá, por tanto,

$$\nu = \frac{1}{h} (E_m - E_n) = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad [5.3.3]$$

que, expresada en términos de κ , se convierte en

$$\kappa = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad [5.3.4]$$

exactamente de la misma forma que [5.3.1]. Pero, además, la ecuación [5.3.4] permite calcular analíticamente el valor de R_{H} :

$$R_{\text{H}} = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \quad [5.3.5]$$

que resulta ser, sustituyendo los valores conocidos en 1914 de m , e y h , $R_{\text{H}} = 10968100 \text{ m}^{-1}$. Si comparamos este valor con el hallado experimentalmente (véase ecuación [4.5.3]), se comprueba que la precisión alcanzada mediante la teoría de Bohr es superior al 4 por cien mil.

A la vista de [5.3.4], el lector reconocerá inmediatamente que los llamados términos espectrales son simplemente las energías (en unidades de κ) de los diferentes estados estacionarios. Asimismo, el principio de combinación de Ritz viene formulado directamente mediante [5.3.4]. En especial, la línea espectral límite de la serie m vendrá dada por $\kappa = R_H/m^2$.

En cuanto a los procesos de emisión y absorción de radiación, pueden entenderse en términos del modelo de Bohr como sigue: es claro que, en ausencia de perturbaciones externas, los átomos permanecerán en su estado estacionario de energía más baja, denominado habitualmente nivel fundamental. Sin embargo, cuando hacemos incidir sobre dicho átomo un haz de radiación policromática⁵, éste absorberá energía, y el electrón efectuará una transición pasando a ocupar un nivel estacionario de energía superior o *estado excitado*. Obsérvese que el electrón sólo puede absorber cantidades *discretas* de energía, de tal forma que su energía final corresponda a la de uno de los estados estacionarios definidos por la ecuación [5.2.18]. Tras permanecer algún tiempo excitado y de manera espontánea, el átomo emitirá este «exceso» de energía, desexcitándose y realizando, en consecuencia, una transición a niveles inferiores (véase figura 5.1). La frecuencia de la radiación emitida en cada una de tales transiciones sólo puede tomar un determinado valor, proporcional a la diferencia de energías entre los niveles involucrados. Se comprende ahora el origen de las diferentes series espectrales para el hidrógeno: así, la serie de Lyman está formada por las transiciones entre cualquier nivel excitado y el fundamental; en la de Balmer, la transición se da entre cualquier nivel con $n > 2$ y el primer estado excitado ($n = 2$), y así sucesivamente para el resto de las series. Lo que las diferencia entre sí es, por consiguiente, el estado final que alcanza el electrón, que vendrá dado por el número m que caracteriza la serie. En particular, la línea espectral límite de la serie de Lyman del hidrógeno, $\kappa = R_H$, corresponderá a la transición entre el nivel fundamental y el estado de energía cero, por lo que el producto $hc\kappa = hcR_H = 13.6$ eV nos da directamente la energía de ionización del hidrógeno en su estado fundamental.

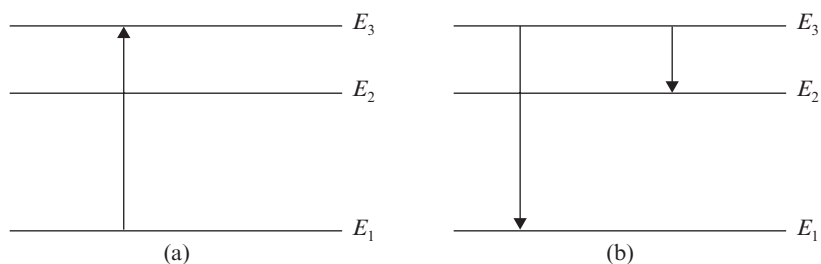


Figura 5.1. Representación esquemática de los procesos de absorción y emisión de radiación en el caso de un sistema atómico de tres niveles. La figura ilustra la forma habitual de representar los niveles de energía. Se utilizan segmentos horizontales paralelos, situados a diferentes alturas en proporción al valor de su energía. La transición se simboliza mediante una flecha cuyo origen es el estado inicial y su extremo el final. En (a), se trata de un proceso de absorción, mientras que en (b) se muestran las dos únicas transiciones posibles desde E_3 debidas a procesos de emisión para este diagrama de niveles.

⁵ Existen otras formas de hacer que un átomo reciba energía, según veremos más adelante. El método que acabamos de enunciar nos sirve aquí para ilustrar el proceso de absorción de radiación.

De lo anterior también se entiende fácilmente por qué el espectro de absorción está incluido pero no coincide totalmente con el espectro de emisión: evidentemente, la diferencia energética o, equivalentemente, la frecuencia de cualquier transición radiactiva es independiente de si estamos considerando procesos de emisión o de absorción. Sin embargo, según indicamos antes, en condiciones normales, los átomos tenderán de forma natural a ocupar el nivel de energía más baja. Por ello, cuando un átomo, inicialmente en el estado fundamental, absorba radiación, se producirán transiciones desde dicho nivel a cualquier estado de energía superior. En breves palabras, en el caso del hidrógeno, observaríamos únicamente en el espectro de absorción la serie de Lyman. No obstante, si aumentásemos suficientemente la temperatura del gas, se incrementaría consecuentemente la agitación térmica de los átomos y, por tanto, éstos sufrirán más colisiones. En esa situación, un porcentaje significativo de los átomos se encontraría inicialmente en algún estado excitado, lo que posibilitaría la aparición de otras series espectrales en el espectro de absorción. Esta idea es la base de un procedimiento espectroscópico para estimar la temperatura de la superficie de las estrellas.

El acuerdo de los datos espectroscópicos para el hidrógeno con la teoría de Bohr fue, según acabamos de ver, realmente espectacular. Es más, cuando Bohr propuso su modelo todavía no se habían descubierto las series de Lyman, Brackett y Pfund. Fue precisamente la predicción que Bohr hacía de las mismas lo que llevó a su búsqueda a los investigadores a quienes deben su nombre.

Por otro lado, en la época en la que Bohr publicó su primer trabajo era conocida una serie espectral descubierta por Pickering en el espectro de una estrella, que satisfacía con buena exactitud la fórmula [5.3.4] para $m = 2$ y n tomando alternativamente valores enteros y semienteros ($n = 2,5, 3, 3,5, \dots$). Las líneas espectrales asociadas a los valores de n enteros casi coincidían con los de la serie de Balmer del hidrógeno, sin embargo, no existía correspondencia ni justificación alguna acerca de las líneas calculadas a partir de los valores de n semienteros. Por eso se pensó durante un tiempo que el hidrógeno que se encontraba en las estrellas poseía estados y características diferentes al terrestre. Posteriormente fue observado este comportamiento en el laboratorio, pero para ello fue necesario disponer de una mezcla de hidrógeno y helio. Todos estos hechos fueron correctamente interpretados por Bohr, afirmando que el elemento en cuestión no se trataba de cierta clase de hidrógeno con propiedades especiales, sino de helio ionizado (He^+). En efecto, el lector puede comprobar inmediatamente, aplicando la ecuación [5.3.4], que los valores de κ asociados a transiciones entre estados estacionarios del ion He^+ pueden escribirse en la forma⁶.

$$\kappa = \frac{\mu_{\text{He}} e^4 \cdot 4}{8\epsilon_0^3 h^3 c} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = \frac{\mu_{\text{He}} e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{(m/2)^2} - \frac{1}{(n/2)^2} \right) \quad [5.3.6]$$

expresión que para $m = 4$ y $n = 5, 6, 7, \dots$ proporciona con exactitud las líneas espectrales observadas por Pickering. La expresión [5.3.6] difiere de la [5.3.4] en el valor de la masa

⁶ Téngase en cuenta la estrecha similitud entre el He^+ y el átomo de hidrógeno: según el modelo de Rutherford, ambos sistemas atómicos están constituidos por un núcleo de carga Ze y un único electrón girando alrededor. Para el helio $Z = 2$.

reducida μ_{He} . La diferencia es realmente pequeña, aunque, dada la precisión espectroscópica, es necesario tenerla en cuenta. De hecho, justifica que para los valores de n enteros, las líneas correspondientes a la serie de Pickering se encuentren ligerísimamente desplazadas con respecto a las líneas asociadas a la serie de Balmer del hidrógeno. Todo esto fue definitivamente confirmado por Paschen, quien comprobó que podía observarse la serie de Pickering con helio ionizado puro en ausencia de hidrógeno, pero no así en atmósfera de hidrógeno puro, en ausencia de helio.

Bohr fue también capaz de predecir la existencia de series espectrales de tipo hidrogenoideo para el litio doblemente ionizado (Li^{++}) y el berilio triplemente ionizado (Be^{+++}), las cuales fueron efectivamente observadas en espectros estelares.

En otro orden de ideas, veamos en el capítulo anterior que el conjunto de líneas discretas que constituía una serie espectral se aproximaba hacia una cierta línea límite. Esto no quiere decir que no pueda detectarse radiación emitida (o absorbida) de frecuencia superior a la del límite de la serie. Al contrario, a partir de este valor se observa la existencia de un espectro *continuo* que se extiende hacia las longitudes de onda más cortas. La aparición de este espectro puede explicarse de manera simple: en efecto, mientras que el espectro (discreto) de líneas corresponde a transiciones entre un conjunto discreto de estados *ligados* atómicos, el espectro continuo estará generado por las transiciones que se produzcan entre un estado ligado (de energía negativa) y un estado no ligado (de energía positiva). En este último caso, el electrón describirá alrededor de un núcleo un movimiento de tipo hiperbólico y, por tanto, no-periódico. Por esta razón⁷ no existirá ninguna restricción cuántica que impida que la energía pueda tomar cualquier valor positivo, por lo que el desplazamiento del electrón a lo largo de cualesquiera de estas trayectorias corresponderá a un estado permisible. El sistema emitirá entonces radiación cuando, desde un estado de energía positiva, pase a ocupar una configuración de tipo ligado. Una transición en sentido inverso se dará cuando se trate de procesos de absorción. Así, por ejemplo, si consideramos un electrón en el estado fundamental del átomo de hidrógeno que, mediante absorción, pasa al estado de energía positiva E_β , el valor de κ correspondiente a esta transición será (véase figura 5.2)

$$\kappa = \frac{R_H}{1^2} + \frac{E_f}{hc} \quad [5.3.7]$$

El espectro continuo de absorción revela, por tanto, procesos de ionización en los cuales el electrón se separa del átomo, mientras que, por el contrario, el espectro continuo de emisión muestra el proceso inverso, es decir, la recombinación de un ion positivo y un electrón.

Hasta ahora, aunque de forma indirecta, se ha probado la existencia en los átomos de niveles de energía discretos, asociados a estados estacionarios, tal y como postuló Bohr. Sin embargo, nos hemos referido por el momento sólo a procesos de emisión y absorción de radiación, y a átomos de tipo hidrogenoideo. En consecuencia, es necesario demostrar

⁷ Según veremos en la siguiente sección, la cuantificación de los valores de la energía sólo aparece si consideramos movimientos de tipo periódico o multiperiodico. La rotación circular del electrón alrededor de un núcleo es, evidentemente, un ejemplo de ellos.

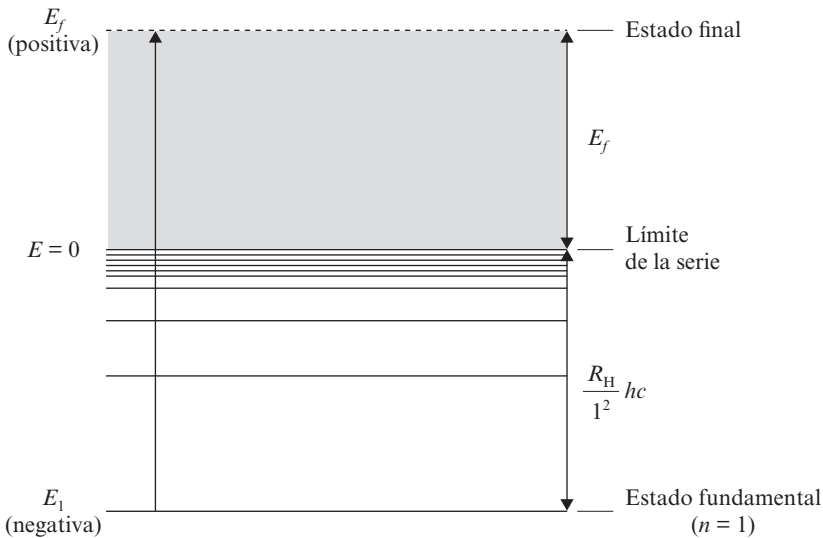


Figura 5.2. Diagrama de niveles correspondiente a una línea del espectro continuo de absorción del átomo de hidrógeno.

de forma directa que la discretización de la energía de los átomos es una propiedad característica de los mismos, sin importar la manera a través de la cual dicha energía ha sido adquirida o liberada, y que esta cuantificación energética se da igualmente en átomos complejos, multielectrónicos. La confirmación de todo esto fue proporcionada en 1914 por Franck y Hertz mediante el siguiente experimento: un gas a baja presión (las primeras experiencias se realizaron con vapor de mercurio) es bombardeado por un haz de electrones emitidos térmicamente desde el cátodo de platino C (véase figura 5.3) y acelerados hacia un ánodo A en forma de rejilla por un potencial variable V . Parte de los electrones atravesarán la rejilla A con suficiente energía cinética como para vencer un pequeño potencial de frenado aplicado entre A y la placa P. Dichos electrones generarán una corriente cuya intensidad es medida por el galvanómetro G. Cuando aumentamos el potencial acelerador la gráfica de la corriente en G tiene la forma mostrada en la figura 5.4. La aplicación de la teoría de Bohr resulta aquí sumamente esclarecedora. En efecto, cuando el potencial V es bajo, los electrones no alcanzan suficiente energía como para provocar, tras el correspondiente choque, la transición de los átomos de mercurio desde un nivel estacionario al siguiente. Las colisiones serían, pues, elásticas y, dada la enorme diferencia de masas de las partículas que interaccionan, los electrones no sufrirían pérdidas importantes de energía. Por eso la corriente se incrementará conforme aumentemos V . Sin embargo, para $V = 4.9$ V la curva desciende abruptamente. Lo que sucede es que buena parte de los electrones ha adquirido una energía cinética igual a la diferencia energética entre dos niveles consecutivos de un átomo de mercurio (4.9 V), la cual ha sido cedida al átomo en una única colisión. Dado que el vapor de mercurio a temperatura ambiente tiene prácticamente todos sus átomos en el estado de más baja energía, esta transición se

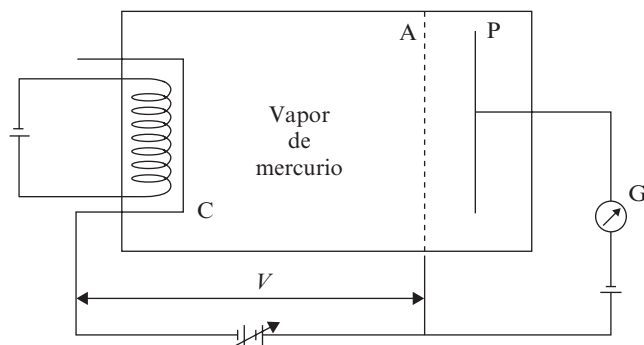


Figura 5.3. Esquema del experimento realizado por Franck y Hertz.

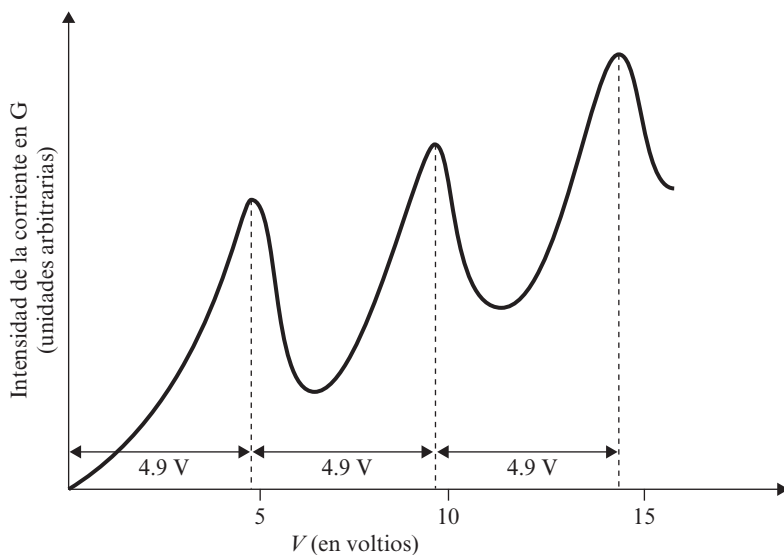


Figura 5.4. Resultado del experimento de Franck-Hertz: se aparecían máximos pronunciados en la intensidad de la corriente eléctrica generada para múltiplos de un determinado potencial de aceleración ($V = 4.9 \text{ V}$).

habrá producido entre el nivel fundamental y el primer estado excitado. Tras la colisión inelástica, el electrón ha perdido casi toda su energía y no puede ganar la suficiente en su recorrido hacia A como para vencer el potencial de frenado. Cuando seguimos aumentando V , cada vez habrá más electrones que, tras colisionar una vez, puedan alcanzar la placa, pero este proceso se ve de nuevo bruscamente interrumpido cuando $V = 9.8 \text{ V}$, es decir, el doble del potencial crítico anterior ($V = 4.9 \text{ V}$). La pronunciada caída de corriente se debe ahora, como el lector probablemente habrá imaginado, a que la mayor parte de

los electrones ha cedido toda su energía cinética en *dos* choques inelásticos. El mismo proceso se observa sucesivamente para valores del potencial múltiplos del potencial crítico.

Por otra parte, se observó espectroscópicamente la emisión de una línea cuya longitud de onda era 2537 Å, correspondiente a una energía 4.89 eV, en completo acuerdo con la diferencia energética prevista. El experimento de Franck-Hertz supuso, en consecuencia, una confirmación decisiva de la realidad de los estados estacionarios en átomos complejos.

5.4. REGLAS DE CUANTIFICACIÓN DE SOMMERFELD-WILSON-ISHIWARA

Aunque el éxito de la teoría de Bohr fue impresionante, no debemos olvidar, sin embargo, que en ella se consideraban únicamente órbitas circulares, mientras que, como es bien sabido, un electrón ligado sometido a un potencial coulombiano describe, en general, órbitas elípticas. Es preciso, por consiguiente, extender la regla de cuantificación de Bohr a movimientos periódicos más generales. Por otro lado, un movimiento circular constituye un ejemplo de sistema físico periódico con sólo *un* grado de libertad. Parece clara, pues, la necesidad de ampliar la formulación de Bohr a sistemas periódicos con más grados de libertad. Esta tarea fue llevada a cabo en 1915 y de forma independiente por tres científicos relevantes, y dio lugar a lo que se conoce habitualmente como reglas de cuantificación de Sommerfeld-Wilson-Ishiwara (en lo sucesivo SWI).

Para llegar a ellas vamos a retomar, al igual que hemos hecho otras veces, el postulado de Planck relativo a la cuantificación de la energía E de un oscilador armónico unidimensional. Vimos que se cumplía

$$E/h\nu = nh \quad [5.4.1]$$

donde ν era la frecuencia de oscilación y n un entero no negativo. La energía total E también puede escribirse como suma de energía cinética y potencial

$$E = K + V = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \quad [5.4.2]$$

donde, como siempre, p_x denota el momento lineal en la dirección x , m es la masa del oscilador y k su constante de recuperación característica. La ecuación [5.4.2] puede adoptar la forma

$$\frac{p_x^2}{2mE} + \frac{x^2}{2E/k} = 1 \quad [5.4.3]$$

ecuación que representa una elipse en un cierto espacio, denominado *espacio de fases*, en el cual p_x y x son las coordenadas (véase figura 5.5). En cada instante, el estado del oscilador vendrá descrito por un punto de dicho diagrama (diagrama de fases), de manera que

el movimiento completo recorrerá la mencionada elipse. Calculemos ahora el área encerrada dentro de dicha elipse, que vendrá dada por la integral

$$\oint p_x \, dx \quad [5.4.4]$$

donde el círculo en la integral simboliza que la integración debe realizarse en un período completo, lo cual tiene sentido, ya que el movimiento es periódico. Ahora bien, una elipse de semiejes a y b posee un área πab . En nuestro caso

$$a = \sqrt{2E/k} \quad ; \quad b = \sqrt{2mE} \quad [5.4.5]$$

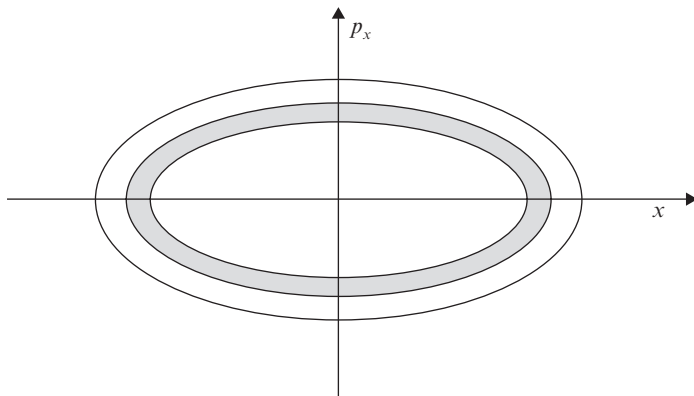


Figura 5.5. Diagrama en el espacio de fases del movimiento de un oscilador armónico lineal. Cada elipse está asociada a uno de los estados permitidos de energía del oscilador. El área (con trama en la figura) comprendida entre dos elipses consecutivas vale h .

por lo que se tendrá

$$\oint p_x \, dx = \pi ab = \frac{2\pi E}{\sqrt{k/m}} \quad [5.4.6]$$

Recordando que $\sqrt{k/m} = 2\pi\nu = \omega$, la expresión anterior nos queda

$$\oint p_x \, dx = E/\nu \quad [5.4.7]$$

que, teniendo en cuenta la condición de Planck (ecuación [5.4.1]), se transforma finalmente en

$$\oint p_x \, dx = nh \quad [5.4.8]$$

En otras palabras, la regla de cuantificación de Planck es, pues, consistente con el cumplimiento de la condición [5.4.8]. Podemos entonces preguntarnos si se da una situación similar en otros sistemas periódicos con un grado de libertad, como, por ejemplo, el átomo de Bohr, es decir, si las condiciones de cuantificación pueden deducirse de una relación del tipo [5.4.8]. Surge entonces una dificultad: un movimiento de tipo circular no está adecuadamente descrito mediante una coordenada lineal. Para salvar este problema y mantener además la forma de la ecuación [5.4.8] escribiremos de nuevo la integral de línea, pero referida a coordenadas y momentos canónicos *generalizados*, de la misma forma que la condición de Planck era igualmente válida para sistemas con un grado de libertad expresado mediante una coordenada generalizada. Para un electrón en una órbita circular la coordenada generalizada elegida será el ángulo polar ϕ , con lo que su momento canónico generalizado se calculará, como es habitual en mecánica clásica, a partir de la ecuación

$$p_\phi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \quad [5.4.9]$$

donde $\mathcal{L} = K - V$ (diferencia entre energía cinética y potencial) es la llamada función lagrangiana del sistema, y el punto denota derivación temporal. Un cálculo sencillo da⁸

$$p_\phi = mr^2\dot{\phi} \quad [5.4.10]$$

siendo r la coordenada radial. A la vista de [5.4.10] se observa que p_ϕ no es otra cosa que el momento angular L del electrón, que se mantiene constante en cada órbita, por lo que nuestra integral de línea queda

$$\oint p_\phi \, d\phi = \int_0^{2\pi} L \, d\phi = 2\pi L \quad [5.4.11]$$

Si suponemos válida la regla de cuantificación [5.4.8], obtendremos la condición

$$2\pi L = nh \quad [5.4.12]$$

es decir,

$$L = n\hbar \quad [5.4.13]$$

Pero ésta es precisamente una de las formas de enunciar el cuarto postulado de Bohr, del que se derivaban los valores discretos de la energía. Vemos que, efectivamente, la condición [5.4.8] extendida para coordenadas y momentos generalizados permite deducir la cuantificación de los estados energéticos atómicos según la teoría de Bohr.

⁸ Basta tener en cuenta, que, en coordenadas polares planas, la lagrangiana se expresa en la forma

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - V(r)$$

El paso fundamental dado por Sommerfeld, Wilson e Ishiwara fue postular que, para sistemas periódicos o multiperiodicos⁹ con m grados de libertad, caracterizados, por tanto, mediante q_1, q_2, \dots, q_m coordenadas generalizadas y p_1, p_2, \dots, p_m momentos canónicos asociados, se verifican las siguientes condiciones o reglas de cuantificación:

$$\oint p_1 dq_1 = n_1 h; \quad \oint p_2 dq_2 = n_2 h; \quad \dots; \quad \oint p_m dq_m = n_m h \quad [5.4.14]$$

donde los números enteros n_1, n_2, \dots, n_m son denominados números cuánticos. Las integrales sobre un período que aparecen en la expresión anterior reciben el nombre en mecánica clásica de *variables de acción*, denotándose habitualmente por J_i , donde el subíndice indica la coordenada generalizada asociada. Su uso estuvo limitado durante muchos años al estudio de movimientos de tipo planetario en astronomía (son constantes del movimiento en física clásica). A diferencia de lo que ocurre en mecánica clásica, donde las variables de acción poseen un intervalo *continuo* de valores, en física cuántica, debido a las condiciones de SWI, sólo pueden tomar determinados valores *discretos*. Nótese, por otra parte, que en un sistema periódico general hay tantos números cuánticos como grados de libertad posee dicho sistema.

Esta regla de cuantificación puede ser interpretada en términos de la longitud de onda de de Broglie asociada a una partícula con movimiento periódico. En efecto, consideremos una partícula que va y viene libremente a lo largo de, por ejemplo, el eje x , tras rebotar elásticamente en dos paredes impenetrables situadas en los puntos $x = \pm d/2$ (véase figura 5.6). La aplicación de la regla de cuantificación [5.4.14] a este movimiento periódico da (véase ejercicio 5.3)

$$p = \frac{nh}{2d} \quad [5.4.15]$$

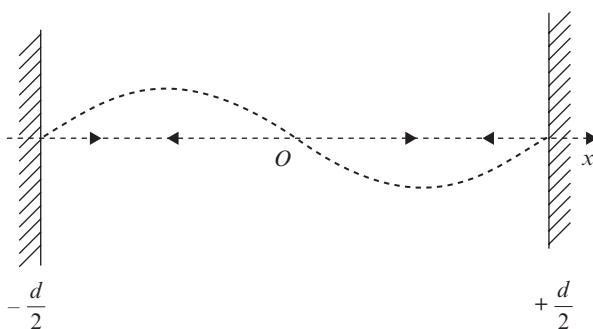


Figura 5.6. Partícula encerrada en el interior de una cavidad monodimensional. En el dibujo, la onda estacionaria representada corresponde al número cuántico $n = 2$.

⁹ Un sistema se denomina multiperiodico si existe un conjunto de coordenadas y momentos generalizados $(q_1, p_1, q_2, p_2, \dots, q_n, p_n)$ tales que, sobre cada trayectoria del sistema en el espacio de fases, p_i es función sólo de q_i y, además, la proyección de dicha trayectoria sobre cada uno de los planos $q_i - p_i$, esto es, la función $p_i(q_i)$, es una curva cerrada (libración) o periódica en q_i (rotación).

donde p es el módulo (constante) del momento lineal con que se desplaza dicha partícula. Pero, por otro lado, la longitud de onda de De Broglie asociada a una partícula de momento p valdrá

$$\lambda = h/p \quad [5.4.16]$$

por lo que se cumplirá

$$n\lambda = 2d \quad [5.4.17]$$

En otras palabras, la cavidad contendrá un número entero de semilongitudes de onda. Esta ecuación le recordará posiblemente al lector una condición similar para las ondas estacionarias que pueden crearse en una cuerda estirada que mantiene fijos sus extremos. Sabemos que, en régimen estacionario, sólo están permitidas determinadas frecuencias de vibración o, lo que es lo mismo, ciertas longitudes de onda.

La analogía entre la regla de SWI y las ondas de de Broglie se hace todavía más patente si consideramos el sistema periódico formado por un electrón describiendo una órbita circular de radio r alrededor de un núcleo. Así, si designamos por p el momento lineal de dicho electrón, la condición de Bohr [5.4.13] nos da

$$L = mvr = pr = nh/2\pi \quad [5.4.18]$$

De la aplicación de la relación de De Broglie [5.4.16] a la expresión anterior obtendremos

$$\frac{hr}{\lambda} = \frac{nh}{2\pi} \quad [5.4.19]$$

es decir

$$2\pi r = n\lambda \quad [5.4.20]$$

Dicho de otro modo, las órbitas (circulares) permitidas serán aquellas cuyo perímetro sea exactamente un múltiplo de la longitud de onda de De Broglie asociada al electrón en dicha órbita. Una imagen simplificada de este comportamiento se muestra en la figura 5.7 para la tercera órbita de Bohr ($n = 3$). Naturalmente, los nodos de la onda-guía que sigue al electrón pueden encontrarse en cualquier punto de dicha órbita. Al igual que en el ejemplo estudiado antes, el dibujo de la figura 5.7 nos recuerda ondas de tipo estacionario como las que se producen en una cuerda estirada, sólo que ahora los dos extremos de dicha cuerda se habrían anudado. De nuevo, únicamente determinadas frecuencias de vibración de la cuerda son permisibles en régimen estacionario. Es claro que, en ausencia de amortiguamiento o perturbaciones externas, tales ondas estacionarias continuarán oscilando indefinidamente. El paralelismo con la existencia de estados *estacionarios* en los átomos es, pues, evidente.

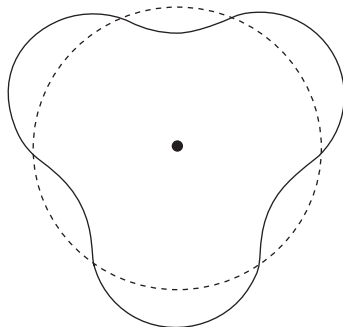


Figura 5.7. Ilustración gráfica de la onda-guía asociada a un electrón en una órbita de Bohr. En el dibujo $n = 3$.

Apliquemos ahora las reglas de cuantificación de SWI al problema de un átomo hidrogenoideo formado por un núcleo positivo y un único electrón orbitando a su alrededor. Dinámicamente, se trata, pues, de un problema típico de fuerzas centrales que, como tal, viene tratado y resuelto en numerosos textos de mecánica clásica. Como se sabe, las trayectorias cerradas descritas por el electrón son elipses contenidas en un plano perpendicular al momento angular del sistema cuyos semiejes mayor a y menor b vienen dados por

$$a = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0|E|} \quad ; \quad b = \frac{L}{\sqrt{2\mu|E|}} \quad [5.4.21]$$

cuya excentricidad ϵ y período T son

$$\epsilon = \left(1 + \frac{32\pi^2\epsilon_0^2EL^2}{\mu Z^2e^4}\right)^{1/2} \quad [5.4.22]$$

$$T = \frac{Ze^2}{8\epsilon_0} \left(\frac{\mu}{2|E|^3}\right)^{1/2} \quad [5.4.23]$$

En las expresiones anteriores E (<0 , ya que consideramos órbitas cerradas) denota la energía total, que es una constante del movimiento al tratarse de fuerzas conservativas, L es el módulo del momento angular (su cuadrado, L^2 , es otra constante del movimiento) y μ representa la masa reducida del sistema electrón-núcleo.

Nuestro sistema posee tres grados de libertad, por lo que vendrá descrito por tres coordenadas y otros tantos momentos canónicos generalizados. Empleando coordenadas esféricas r , ϕ y θ , dichos momentos p_r , p_ϕ y p_θ se obtendrán a partir de [5.4.9] teniendo en cuenta que la energía cinética en coordenadas polares esféricas toma la forma

$$K = \frac{\mu}{2} (\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2 \text{sen}^2 \theta \dot{\phi}^2) \quad [5.4.24]$$

Se obtiene

$$p_r = \mu \dot{r} \quad ; \quad p_\theta = \mu r^2 \dot{\theta} \quad ; \quad p_\phi = \mu r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi} = L_z \quad [5.4.25]$$

donde L_z es la componente según z del momento angular. Dado que la coordenada ϕ no aparece explícitamente en las expresiones de la energía cinética ni de la potencial, constituye una coordenada cíclica; por consiguiente, su momento canónico asociado, L_z , será también una constante del movimiento.

El cálculo explícito de las variables de acción que figuran en las ecuaciones [5.4.14], necesario para poder aplicar las reglas de cuantificación a nuestro sistema periódico, es tarea larga y laboriosa, por lo que preferimos omitir los detalles. El lector puede consultar a estos efectos diversos textos de mecánica clásica. El resultado final es¹⁰

$$J_r = \oint p_r \, dr = -2\pi \left(L - \frac{\sqrt{\mu} Z e^2}{4\pi \epsilon_0 \sqrt{2|E|}} \right) = n_r h \quad [5.4.26]$$

$$J_\theta = \oint p_\theta \, d\theta = -2\pi(L - |L_z|) = n_\theta h \quad [5.4.27]$$

$$J_\phi = \oint p_\phi \, d\phi = -2\pi |L_z| = n_\phi h \quad [5.4.28]$$

donde n_r , n_θ y n_ϕ son enteros no negativos. Resulta más conveniente para nuestros propósitos expresar los resultados en términos de otros tres números cuánticos, denominados número cuántico principal, n , número cuántico azimutal, n_ψ , y número cuántico magnético, m , definidos en función de los anteriores por las ecuaciones

$$n = n_r + n_\theta + n_\phi \quad [5.4.29]$$

$$n_\psi = n_\theta + n_\phi \quad [5.4.30]$$

$$|m| = n_\phi \quad , \quad \text{con } n_\phi \leq n_\psi \quad [5.4.31]$$

A partir de estas expresiones y de las ecuaciones [5.4.26] a [5.4.28] se obtiene (véase ejercicio 5.4)

$$E = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{2} \mu (Z \alpha c)^2 \frac{1}{n^2} \quad [5.4.32]$$

$$L = n_\psi \hbar \quad [5.4.33]$$

$$L_z = m \hbar \quad [5.4.34]$$

¹⁰ Al ser p_ϕ constante, el cálculo de J_ϕ es inmediato.

donde $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$ es una cantidad adimensional llamada constante de estructura fina, y cuyo valor es 1/137.035982 (para cálculos estimativos se suele tomar $(\alpha \approx 1/137)$). Las ecuaciones anteriores nos indican que *la energía, el módulo del momento angular y su tercera componente están cuantificados*. Sin embargo, y al contrario de lo que podía esperarse en un principio, la energía varía únicamente con el número cuántico principal n , y no lo hace explícitamente en términos de n_ψ . Este hecho, denominado degeneración accidental, se debe al tipo concreto de potencial (coulombiano) que estamos considerando, de manera que tan pronto éste sufra algún ligero cambio, por pequeño que sea (por ejemplo, si introdujéramos correcciones relativistas), la degeneración desaparecería. Por otra parte, según puede comprobarse inmediatamente, las energías dadas por [5.4.32] son exactamente las mismas que las deducidas por Bohr para órbitas circulares (véase ecuación [5.2.26]). Esto, en el fondo, no debe extrañarnos, ya que la fórmula de Bohr se ajustaba excelentemente al experimento. El lector se preguntará entonces de qué ha servido una mayor complejidad en nuestro formalismo. La respuesta se irá viendo paulatinamente conforme profundicemos en sus otras consecuencias. En efecto, de [5.4.33] y [5.4.34] se tiene

$$\frac{L_z}{L} = \cos \theta = \frac{m}{n_\psi} \quad [5.4.35]$$

donde θ representa el ángulo formado por el momento angular L con el eje z . La relación anterior obliga, por tanto, a que la orientación en el espacio del plano de las órbitas permitidas no puede ser arbitraria, sino que su normal debe formar con el eje z un ángulo dado por [5.4.35]. A este hecho se le conoce con el nombre de cuantificación espacial. Dada la isotropía de nuestro problema, esta cuantificación no tendrá sentido físico mientras no exista algún campo o agente externo que la rompa, estableciendo alguna dirección privilegiada que nos sirva de referencia en el espacio. Un ejemplo lo constituye la aplicación sobre el átomo de un campo magnético uniforme, dando lugar al denominado efecto Zeeman (véase sección 5.6), de ahí proviene el nombre de número cuántico magnético para m . La isotropía del sistema hace igualmente que la energía total E tampoco dependa explícitamente de m .

Al igual que en la teoría de Bohr, hemos de rechazar la posibilidad de que el momento angular sea nulo, ya que, en tal caso, el electrón describiría una trayectoria rectilínea que pasaría por el núcleo, colisionando frontalmente con él. Por esta razón n_ψ no puede tomar el valor cero. Así pues, se tendrá

$$n_\psi = 1, 2, \dots \quad [5.4.36]$$

y, como consecuencia de la ecuación [5.4.29], se cumplirá

$$n \geq 1 \quad [5.4.37]$$

Así pues, fijado n ,

$$n_\psi = 1, 2, \dots, n \quad [5.4.38]$$

La teoría más rigurosa de la mecánica cuántica demuestra, sin embargo, que realmente el momento angular puede tomar el valor cero (véase el capítulo 11).

Por otro lado, de [5.4.30] y [5.4.31] se infiere que, fijado n_ψ , m puede tomar los valores

$$m = -n_\psi, -n_\psi + 1, \dots, 0, \dots, n_\psi - 1, n_\psi \quad [5.4.39]$$

De lo anterior, se deduce que hay $n(n + 2)$ combinaciones distintas de los números cuánticos n_r , n_ψ y m que dan un mismo n (véase ejercicio 5.5). En términos más físicos, existen $n(n + 2)$ órbitas diferentes con la misma energía total E . Se dice que cada nivel energético está degenerado, y su degeneración es precisamente $n(n + 2)$. Según veremos en próximos capítulos, en realidad el resultado correcto para la degeneración es n^2 . Pero esto sólo podrá demostrarse en el marco de la mecánica cuántica.

Uno de los resultados que más contribuyeron a aceptar las reglas de cuantificación de SWI, poniendo de manifiesto de forma evidente la potencia de este formalismo frente al de Bohr, fue la explicación dada por Sommerfeld en 1916 de la estructura fina del espectro del átomo de hidrógeno: medidas espectroscópicas muy precisas habían encontrado que en realidad cada uno de los niveles de Bohr estaba formado por un conjunto de niveles muy próximos entre sí, en comparación con la separación energética para diferentes valores de n . A esta composición espectral se denominó estructura fina del hidrógeno. En un intento de explicarla, Sommerfeld introdujo correcciones relativistas en el movimiento electrónico. Aunque pequeñas¹¹, las velocidades son suficientemente significativas como para romper la degeneración primaria. En efecto, imponiendo de nuevo las reglas de cuantificación [5.4.14], Sommerfeld obtuvo la siguiente expresión para las energías de los estados estacionarios de un átomo hidrogenoideo

$$E = \mu c^2 \{ [1 + Z^2 \alpha^2 (n - n_\psi + \sqrt{n_\psi^2 - Z^2 \alpha^2})^{-2}]^{-1/2} - 1 \} \quad [5.4.40]$$

que puede desarrollarse en potencias de $(Z\alpha)^2$, quedando

$$E \approx -\frac{1}{2} \mu (Z\alpha c)^2 \frac{1}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{n_\psi} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad [5.4.41]$$

donde, de nuevo, n es un entero positivo y $n_\psi = 1, 2, \dots, n$. En [5.4.41] hemos despreciado las contribuciones del término en $(\alpha Z)^4$ y siguientes. Esto tendrá sentido naturalmente siempre que $\alpha Z \ll 1$. Nótese que el primer término dentro del corchete del miembro de la derecha de [5.4.41] nos da las energías, según Bohr, calculadas en la hipótesis no-relativista. Pero lo más importante es que ahora E depende explícitamente tanto de n como n_ψ . Esto hace que el nivel n -ésimo se desdoble en n niveles muy próximos entre sí. En otras palabras, la degeneración (con respecto a n_ψ) se ha roto¹². Obsérvese, además, que la mag-

¹¹ La velocidad de los electrones es del orden de $Z\alpha c/n$ (véase ecuación [5.2.24]), es decir $Z/137n$ veces la velocidad de la luz.

¹² Si $n = 1$, debe cumplirse forzosamente $n_\psi = 1$, y no habría degeneración (al igual que sucede en el modelo de Bohr).

nitud de los efectos relativistas viene marcada por el factor $(Z\alpha)^2$, de ahí el nombre de constante de estructura fina con que bautizamos a α . Para el hidrógeno, $Z = 1$; por tanto, este factor será muy pequeño, del orden de $(1/137)^2$.

Señalemos, finalmente, que el acuerdo de la fórmula de Sommerfeld [5.4.41] con los datos experimentales para el hidrógeno fue excelente, permitiendo explicar no sólo la estructura fina de dicho átomo, sino también los resultados obtenidos por Paschen para el helio ionizado.

5.5. PRINCIPIO DE CORRESPONDENCIA

En la justificación del cuarto postulado de Bohr hacíamos uso de una hipótesis suplementaria, plasmada en el llamado principio de correspondencia. La idea de partida de dicho principio es ciertamente razonable: las leyes de la física cuántica deben converger a las de la física clásica como caso límite. Sin embargo, surge entonces la pregunta ¿cuál es ese límite? La respuesta de Bohr fue suponer que tal límite se alcanzaba para números cuánticos grandes, de hecho, cuando tienden a infinito. En lo que sigue trataremos de argumentar, que no demostrar, este principio.

Consideremos un sistema periódico con un solo grado de libertad, y sean E_a y E_b las energías de dos de sus estados (no degenerados) asociados a los valores a y b del correspondiente número cuántico. La frecuencia de la radiación emitida en la transición radioactiva entre estos dos estados sería, desde un punto de vista *cuántico*,

$$\nu_{(\text{cuant.})} = \frac{E_a - E_b}{h} = \frac{\Delta E}{h} \quad [5.5.1]$$

Por otro lado, se cumplirá la condición de SWI

$$J = \oint p dq = nh \quad [5.5.2]$$

donde p y q denotan la coordenada y el momento generalizado del sistema. En particular, para los estados a y b ,

$$J_a = ah \quad ; \quad J_b = bh \quad [5.5.3]$$

de manera que si elegimos $a - b = 1$, es decir, tomamos estados consecutivos, se tendrá

$$J_a - J_b = \Delta J = h \quad [5.5.4]$$

Sustituyendo esta ecuación en [5.5.1], escribiremos formalmente

$$\nu_{(\text{cuant.})} = \frac{\Delta E}{\Delta J} \quad [5.5.5]$$

Evaluemos ahora *clásicamente* la frecuencia de la radiación emitida. Considerando que se trata de una partícula que ejecuta oscilaciones periódicas lineales sometida a un potencial V , su energía total valdrá

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad [5.5.6]$$

de donde

$$p = \sqrt{2m(E - V)} \quad [5.5.7]$$

La variable de acción J se calculará entonces mediante la integral

$$J = \oint p \, dx = \oint \sqrt{2m(E - V)} \, dx \quad [5.5.8]$$

Dado que, clásicamente, la energía E varía de forma continua, tendrá sentido calcular dJ/dE , encontrándose

$$\frac{dJ}{dE} = \oint \frac{m}{\sqrt{2m(E - V)}} \, dx = \oint \frac{m}{p} \, dx = \oint \frac{dx}{v} = \oint \frac{dx}{\left(\frac{dx}{dt}\right)} = \oint dt \quad [5.5.9]$$

siendo v la velocidad de la partícula. La última integral de [5.5.9] extendida sobre un período será, en consecuencia, igual a T , el período de la oscilación, con lo que nos queda finalmente

$$\frac{1}{T} = v_{(\text{clás.})} = \frac{dE}{dJ} \quad [5.5.10]$$

siendo $v_{(\text{clás.})}$ la frecuencia clásica del movimiento. Con carácter general, se demuestra rigurosamente en mecánica clásica que la relación anterior es válida para *cualquier* sistema periódico con un grado de libertad. El parecido entre las ecuaciones [5.5.5] y [5.5.10], obtenidas cuántica y clásicamente, es evidente. Sin embargo, en [5.5.5] los incrementos son finitos, mientras que en la expresión anterior se trata de elementos infinitesimales. Esta diferencia puede ponerse de manifiesto más claramente mediante el ejemplo mostrado en la figura 5.8: en ella hemos representado la función $E(J)$ para un átomo hidrogenoideo (considerando órbitas circulares), la cual obedece a una expresión del tipo¹³

$$E(J) \propto -\frac{1}{J^2} \quad [5.5.11]$$

¹³ La relación [5.5.11] puede justificarse recordando que, para átomos hidrogenoideos, $E \propto -1/n^2\hbar^2$, que, junto con la fórmula de SWI, $J = nh$, implica $E \propto -1/J^2$ (para más detalles véase, por ejemplo, el libro de Chpolski citado en la bibliografía).

Clásicamente, cualquier punto de la curva corresponde a un estado del sistema, mientras que, cuánticamente, sólo los puntos señalados pueden asociarse a estados cuánticos reales. Es claro de la figura que

$$v_{(\text{clás.})} = \text{tg } \beta \quad [5.5.12]$$

y

$$v_{(\text{cuánt.})} = \text{tg } \alpha \quad [5.5.13]$$

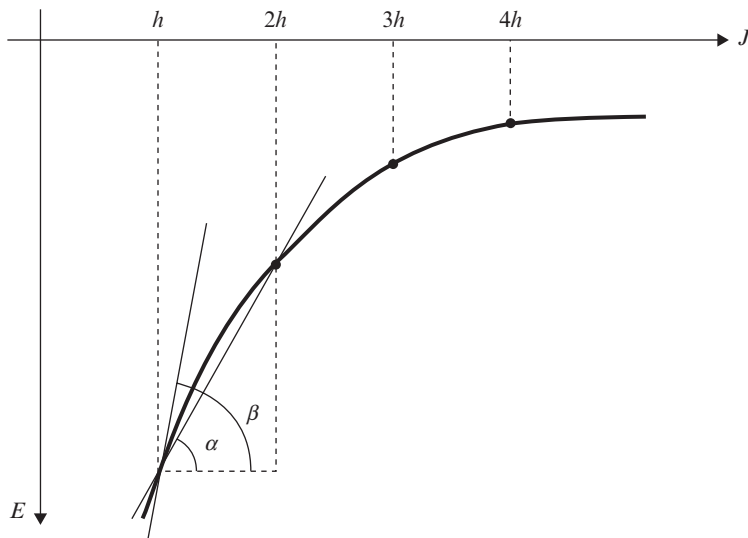


Figura 5.8. Gráfica de la energía E en función de la variable de acción J para un átomo hidrogenoideo. La curva continua representa la situación clásica, mientras que los puntos gruesos denotan los estados estacionarios cuánticos.

La pregunta que nos planteábamos al comienzo de esta sección era, recordemos, en qué límite la física cuántica coincidía con la clásica. Trasladada al ejemplo que estamos analizando, equivaldría a determinar cuándo $v_{(\text{cuánt.})}$ coincide prácticamente con $v_{(\text{clás.})}$. La respuesta se infiere observando la figura 5.8: eso ocurrirá cuando $\alpha \approx \beta$, lo cual se logrará para valores grandes de J , donde la pendiente se hace muy pequeña. Ahora bien, $J = nh$, luego $v_{(\text{clás.})}$ coincidirá con $v_{(\text{cuánt.})}$ en el límite $n \rightarrow \infty$. Esto es justamente lo que propone el principio de correspondencia. Naturalmente, dicho principio extiende este resultado a cualquier ley física, pero lo anterior puede servir para comprender intuitivamente la base conceptual en la que se asienta.

La aplicación del principio de correspondencia permitió determinar, al menos a nivel cualitativo, intensidades de líneas espectrales, tiempos empleados en las transiciones y polarización de la radiación resultante. Por otro lado, se había observado experimentalmente que no todas las transiciones, en principio posibles, a juzgar por el diagrama de

niveles, se producían realmente. Podíamos hablar, de hecho, de verdaderas *reglas de selección* para las transiciones, a partir de las cuales se deducía cuáles eran posibles y cuáles no. En este sentido, el principio de correspondencia proporcionó un método aceptable, aunque a veces un tanto artificioso, de obtener algunas (no todas) de dichas reglas¹⁴.

Finalmente, es preciso subrayar la importancia del papel desarrollado por este principio, no sólo en la fundamentación de la antigua teoría cuántica, sino también en lo que constituyó el inicio de la mecánica cuántica actual, tal y como fue desarrollada por Heisenberg en 1925¹⁵. Dejaremos para los siguientes capítulos la revisión de tales ideas.

5.6. INSUFICIENCIA DE LA TEORÍA CUÁNTICA ANTIGUA

En las secciones anteriores hemos dado cuenta de algunos de los principales éxitos de la denominada teoría cuántica antigua. Con todo ello se puso de manifiesto de forma evidente la inadecuación de la física clásica cuando se manejan fenómenos a escala atómica y la necesidad de cuantificar determinadas magnitudes físicas. Sin embargo, y pese a sus innegables méritos, esta teoría presentaba un buen número de defectos:

1. Adolece de consistencia interna, ya que hace uso de conceptos y leyes clásicas con ideas y postulados puramente cuánticos¹⁶.
2. No justifica la existencia de estados estacionarios en los átomos. Simplemente la postula.
3. Parece incompatible la determinación de las órbitas de los electrones con el principio de incertidumbre de Heisenberg.
4. Sólo trata sistemas periódicos y multiperiodicos, pero se muestra incapaz de manejar estados de colisión.
5. Proporciona resultados correctos en el caso de átomos monoeléctricos, y aproximados para los elementos alcalinos (Li, Na, K, Rb y Cs), pero falla estrepitosamente si se consideran átomos más complejos. De hecho, no fue posible construir una teoría adecuada para el átomo de helio.
6. No da ninguna explicación acerca de la dualidad onda-corpúsculo de la radiación o de la materia.
7. Sólo se consigue un acuerdo *cualitativo* con el experimento en la determinación de ciertas reglas de selección, intensidades de línea o polarización de las mismas. En muchos casos, la aplicación del principio de correspondencia resultó infructuosa.
8. No puede explicar la aparición del efecto Zeeman anómalo.

¹⁴ Por ejemplo, se dedujo que las transiciones permitidas (dipolares eléctricas) en el átomo de hidrógeno son aquellas en las que la diferencia entre los números n_{ψ} y m de los estados inicial y final cumple la siguiente regla de selección: $\Delta n_{\psi} = \pm 1$; $\Delta m = 0, \pm 1$. Si estas condiciones no son satisfechas, la transición no se produce.

¹⁵ Efectivamente, Heisenberg se apoyó en el principio de correspondencia y en las reglas de SWI para postular y elaborar su mecánica cuántica de matrices.

¹⁶ Parafraseando la sarcástica afirmación de Bragg, es como si hubiera que aplicar las leyes clásicas los lunes, miércoles y viernes, y las cuánticas los martes, jueves y sábados.

En 1897, Zeeman observó que al aplicar un campo magnético la línea azul del cadmio se desdoblaba en tres líneas equidistantes, coincidiendo la del centro con la línea de partida. Este efecto, descubierto después en otras sustancias, resulta ser proporcional a la intensidad del campo e independiente del elemento en cuestión, y se conoce con el nombre de efecto Zeeman «normal». No fue necesario recurrir a ningún postulado cuántico para comprenderlo, ya que fue explicado clásicamente por Lorentz. El problema surgió cuando nuevas medidas demostraron que el desdoblamiento no era, en muchos casos, el apreciado por Zeeman. De hecho, las distintas líneas espectrales que forman la estructura fina dan origen a diferentes desdoblamientos, de manera que, aunque las rayas originadas siguen siendo equidistantes, la separación mutua depende de la línea considerada. A este tipo de efecto se le denominó efecto Zeeman «anómalo». La teoría clásica de Lorentz fue incapaz de encontrarle justificación, al igual que ocurrió con cualquier intento basado en las reglas de cuantificación de SWI. Para lograrlo, fue necesario introducir, como sugirió Pauli en 1925, un nuevo número cuántico. Pero ésa es una cuestión sobre la que volveremos en capítulos más avanzados.

La teoría cuántica antigua no resultaba, por consiguiente, completamente satisfactoria ni desde un punto de vista teórico ni experimental, y tampoco se veía claro cómo podía mejorarse internamente manteniendo intactos sus postulados básicos. Para resolver esta difícil situación fue necesario, por tanto, un nuevo y revolucionario enfoque conceptual. el cual fue llevado a cabo en sus comienzos por Schrödinger y Heisenberg a través de la formulación de la denominada Mecánica Cuántica. Este cuerpo de doctrina será precisamente objeto de estudio en los próximos capítulos.

EJERCICIOS

5.1. Determinar la corrección que habría que introducir en el tercer postulado de Bohr (ecuación [5.2.1]) si se tuviera en cuenta el retroceso del átomo en los procesos de absorción y emisión de radiación.

5.2. Demostrar, haciendo uso del postulado IV, que el momento angular del electrón, L , está también cuantificado a través de la relación $L = n\hbar$ (ecuación [5.2.21]).

5.3. Una partícula de masa m se desplaza libremente con velocidad (en módulo) v dentro de una cavidad monodimensional (eje x) de lado d , rebotando elásticamente en sus extremos, situados en $x = \pm d/2$. ¿Podremos aplicar las reglas de cuantificación de SWI? En caso afirmativo, encontrar los valores permisibles del momento lineal y de la energía de dicha partícula, así como las frecuencias del espectro de emisión.

5.4. A partir de las ecuaciones [5.4.26] a [5.4.28] y de las definiciones de los números cuánticos n , n_ψ y m , obtener los valores discretos de la energía, el módulo del momento angular y su tercera componente según la teoría de Bohr.

5.5. Demostrar que la degeneración del nivel n -ésimo del átomo de hidrógeno es, según la teoría de Bohr, $n(n + 2)$.

5.6. Supóngase que un protón y un electrón se encuentran ligados únicamente por atracción gravitatoria. Hallar cuál sería en tal caso el radio de la órbita y la energía de ligadura del estado fundamental de tal sistema.

5.7. En un experimento de tipo Franck-Hertz, en el que hemos sustituido el vapor de mercurio por hidrógeno atómico, se aprecian máximos pronunciados en la corriente que circula por el galvanómetro para los valores del potencial acelerador $V_1 = 10.2$ eV y $V_2 = 12.09$ V, y si se analiza espectroscópicamente la radiación emergente, se observan tres líneas espectrales. Explicar estos resultados.

5.8. Un sólido rígido gira libremente alrededor de un eje fijo. Mediante las reglas de cuantificación de SWI, determinar las energías posibles del sistema. *Dato:* se supone conocido el momento de inercia del sólido.

5.9. Una partícula de masa m se encuentra sometida al potencial unidimensional $V(x) = \alpha|x|$, ($\alpha > 0$). Aplicando las reglas de cuantificación de SWI, hallar las energías permitidas.

Soluciones a los ejercicios (capítulos 1 a 5)

- 1.1. Como la radiación de un cuerpo negro es isotrópica, la densidad espectral de energía por unidad de ángulo sólido valdrá $\rho_\nu(T)/4\pi$. La energía radiada en la unidad de tiempo por el agujero dentro de un ángulo sólido $d\Omega$ centrado en la dirección especificada por sus coordenadas esféricas θ, φ será igual a la energía contenida en un cilindro cuya base sea dicho agujero y cuya generatriz posea una longitud igual a c , paralela a la dirección θ, φ , es decir, $[\rho_\nu(T)/4\pi]c \cos \theta d\Omega = [\rho_\nu(T)/4\pi] c \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi$. La emitancia espectral es la potencia radiada por unidad de área en todas direcciones; luego al ser el agujero de área unidad, se obtendrá integrando la expresión anterior en todas direcciones dentro del hemisferio, esto es

$$R_\nu(T) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \frac{\rho_\nu(T)}{4\pi} c \cos \theta \sin \theta = \frac{c}{4} \rho_\nu(T)$$

- 1.2. Si escribimos $v_2 = T_2 v_1 / T_1$, aplicando la fórmula de Wien tendremos

$$\rho(v_2, T_2) = v_2^3 f\left(\frac{v_2}{T_2}\right) = v_2^3 f\left(\frac{v_1}{T_1}\right) = \frac{T_2^3}{T_1^3} v_1^3 f\left(\frac{v_1}{T_1}\right) = \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^3 \rho(v_1, T_1)$$

- 1.3. Si a la función que designa el número de modos en el intervalo de longitudes de onda $\lambda, \lambda + d\lambda$ la denotamos por $N(\lambda)$, se cumplirá: $N(\lambda) d\lambda = A f(\lambda) V d\lambda$, donde $f(\lambda)$ es una función desconocida a ajustar a posteriori y A es un número constante. Como $N(\lambda) d\lambda$ es una cantidad adimensional, $f(\lambda)$ debe tener dimensiones de $(\text{longitud})^{-4}$, por lo que podremos escribir: $N(\lambda) d\lambda = B \lambda^{-4} V d\lambda$. Si multiplicamos por la energía promedio ($k_B T$) de cada modo según el teorema de equipartición y dividimos entre el volumen de la cavidad, V , la densidad espectral de energía, expresada en términos de λ , nos queda: $\tilde{\rho}(\lambda, T) d\lambda = B k_B T \lambda^{-4} d\lambda$, que es justamente (salvo factor numérico) la expresión de Rayleigh-Jeans.

- 1.4. Si hacemos $v \rightarrow 0$, entonces $\exp(hv/k_B T) \rightarrow 1 + (hv/k_B T)$, y nos queda $\rho(\lambda, T) = (8\pi v^2/c^3) k_B T$.

- 1.5. Recordando las ecuaciones [1.7.19] y [1.2.5] e introduciendo el cambio de variables $x = hv/k_B T$, se tiene

$$R(T) = \frac{c}{4} \int_0^\infty \rho(\nu, T) d\nu = T^4 \frac{2\pi}{c^2} \frac{k_B^4}{h^3} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

El valor de la integral es 6.4938, por lo que la constante de Stefan-Boltzmann nos quedará $\sigma = 6.4938(2\pi k_B^4/c^2 h^3)$.

- 1.6. Escribiendo la densidad espectral de energía de Planck en términos de la longitud de onda

$$\tilde{\rho}(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1}$$

y aplicando la condición $d\tilde{\rho}/d\lambda = 0$ (con el cambio de variables $x \equiv hc/\lambda k_B T$), se llega a la siguiente ecuación trascendente para el máximo:

$$e^{-x} + \frac{1}{5}x - 1 = 0$$

Su resolución por aproximaciones sucesivas da $x = 4.9651$. Por tanto, se obtiene $\lambda_{\text{máx}} T = hc/4.9651 k_B$.

- 1.7. Al ser un sistema oscilatorio armónico, la energía cambiará mediante saltos discretos, cuyo valor mínimo ΔE será $h\nu$, siendo ν la frecuencia de oscilación del péndulo. Como $\nu = (1/2\pi)(g/l)^{1/2}$, donde g es la aceleración de la gravedad y l la longitud del péndulo, se tendrá $\nu = 0.498 \text{ s}^{-1}$. Por tanto, $\Delta E = 3.3 \times 10^{-34} \text{ J}$. Por otro lado, su energía potencial máxima es $mg l(1 - \cos \theta) = 0.147 \text{ J}$. De la comparación entre ambos valores se desprende que la discretización de la energía es completamente inobservable con respecto a su energía total macroscópica.
- 1.8. Si se cumpliera $\rho(\nu, T)_{R-J} = 8\pi\nu^2 k_B T/c^3$, expresándola en longitudes de onda, se tendría $\tilde{\rho}(\lambda, T)_{R-J} = \rho(\nu, T)_{R-J} |d\nu/d\lambda| = 8\pi\lambda^{-4} k_B T$, que es una función monótona decreciente en λ y, por consiguiente, no presenta ningún máximo para $\lambda > 0$.
- 1.9. A partir de la ley de Stefan-Boltzmann, la potencia total radiada en todas direcciones por una esfera de área $4\pi R_s^2$ será $(4\pi R_s^2)\sigma T^4$, por lo que la energía radiada durante un año valdrá $E = (4\pi R_s^2)\sigma T^4 \times 365 \times 24 \times 60 \times 60 \sim 1.15 \times 10^{34} \text{ J}$.
- 1.10. Bastará aplicar la ley de desplazamiento de Wien para $T = 2.7 \text{ K}$. Obtendremos $\lambda_{\text{máx}} = 1.073 \text{ mm}$, que pertenece al dominio de las microondas.

2.1. Como la fuente emite radiación isotrópamente en todas direcciones, y teniendo en cuenta que, según la teoría clásica, la energía se distribuye uniformemente a lo largo de todo el frente de ondas (en este caso una esfera, ya que la fuente es puntual), la intensidad (potencia incidente por unidad de área) sobre el metal valdrá $I = P/4\pi R^2$, donde P denota la potencia de la fuente (1 W) y R la distancia entre dicha fuente y el metal (1 m). El electrón absorberá entonces una energía por unidad de tiempo igual a $\pi r_A^2 I$, donde hemos tomado $r_A \sim 1 \text{ \AA}$. Por consiguiente, el tiempo t necesario para que el electrón acumule energía suficiente para escapar del metal será $t \sim 2.1 \text{ eV}/\pi r_A^2 I \sim 134 \text{ s}$, es decir, muchos órdenes de magnitud por encima de lo previsible experimentalmente.

2.2. Aplicando las leyes de conservación del momento lineal y la energía, nos queda $p_f = p_e$; $p_f c + m_e c^2 = (p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4)^{1/2}$, donde p_f y p_e designan los momentos del fotón incidente y del electrón después de absorber el fotón. De las ecuaciones anteriores se obtiene $2p_f c m_e = 0$, que no puede cumplirse ya que m_e , c y p_f son estrictamente mayores que cero (no tiene sentido un fotón en reposo).

2.3. Aplicando la ley de desplazamiento de Wien se tendrá: $\lambda_{\text{máx}} = c_w/T_0$, donde c_w denota la constante de Wien. La energía del fotón incidente sobre el material será $E = hc/\lambda_{\text{máx}}$, luego la energía cinética máxima de los electrones arrancados valdrá $K_{\text{máx}} = (hc/\lambda_{\text{máx}}) - w_0 = (m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2)^{1/2} - m_e c^2$, lo que implica

$$(p_e)_{\text{máx}} = \frac{1}{c} \left[\left(\frac{hcT_0}{c_w} - w_0 + m_e c^2 \right)^2 - m_e^2 c^4 \right]^{1/2}$$

2.4. Se cumplirá $hc/\lambda_1 = w_0 + ef_1$; $hc/\lambda_2 = w_0 + ef_2$, de donde

$$h = (f_2 - f_1) \frac{e\lambda_1\lambda_2}{c(\lambda_1 - \lambda_2)} \quad \text{y} \quad w_0 = \frac{hc}{\lambda_1} - ef_1$$

2.5. Se cumplirá $mc^2 + p_0 c = p_1 c + E$, donde p_0 y p_1 denotan los momentos del fotón antes y después de la colisión. Esto implica $p_0 c = 2.07 \text{ MeV} \Rightarrow \lambda_0 = 5.98 \times 10^{-3} \text{ \AA}$. Por otro lado, como $\lambda_1 = 10^{-2} \text{ \AA}$ y $\lambda_1 - \lambda_0 = \lambda_c(1 - \cos \theta)$, se tiene $\theta = 0.58 \text{ rad}$.

2.6. Será válida la deducción que se hizo para obtener $\Delta\lambda$ en el caso de electrones, sólo que ahora, en lugar de m_e , habrá que emplear la masa del protón m_p . Como el máximo desplazamiento se produce en cualquier caso cuando $\theta = 180^\circ$, se obtiene $\Delta\lambda_{\text{máx}} = 2h/m_p c = 2.64 \times 10^{-5} \text{ \AA}$. Como vemos, mucho más pequeño que para el electrón.

2.7. Aplicando la ley de conservación del momento lineal:

$$\frac{hv}{c} = \frac{hv'}{c} \cos 30^\circ + p_e \cos 70^\circ$$

$$0 = \frac{hv}{c} \sin 30^\circ - p_e \sin 70^\circ \quad \Rightarrow \quad p_e = \frac{hv' \sin 30^\circ}{c \sin 70^\circ}$$

que sustituido en la anterior ecuación nos da $h\nu/c = 1.046 h\nu'/c$. De aquí se obtiene $1/\lambda = 1.046/\lambda'$. Ahora bien, como se cumple, al tratarse de una colisión Compton, $\lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - \cos 30^\circ)$, se encuentra finalmente $\lambda = 0.07 \text{ \AA}$ y $\lambda' = 0.0632 \text{ \AA}$. La energía del fotón incidente será, pues, $E = hc/\lambda = 176 \text{ keV}$.

- 2.8.** La longitud de onda λ' del fotón dispersado será $\lambda' = \lambda_0 + \lambda_c(1 - \cos 180^\circ) = \lambda_0 + 2\lambda_c$. Por otro lado, como el fotoelectrón es emitido con velocidad nula, se cumplirá $hc/\lambda' = w_0$, de donde se deduce $\lambda_0 = (hc/w_0) - 2\lambda_c = 5904 \text{ \AA}$.
- 3.1.** Para la radiación se cumple $c = \lambda\nu$, lo que implica $\omega = 2\pi\nu = 2\pi c/\lambda = kc$. Para la materia, sin embargo, se tiene $E = h\nu = p^2/2m$. Pero, por otra parte, la relación de Broglie $p = h/\lambda$ permite escribir $E = \hbar\omega = (\hbar k)^2/2m$, de donde $\omega = \hbar k^2/2m$.
- 3.2.** Los momentos de ambas partículas son iguales: $p = h/\lambda_0$. La energía total del fotón E_f vale $E_f = pc$. La del electrón se calculará a partir de la expresión $E_e = (m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2)^{1/2} = [m_e^2 c^4 + (hc/\lambda_0)^2]^{1/2}$. La energía cinética del fotón será $K_f = pc = hc/\lambda$, y la del electrón $K_e = E_e - m_e c^2$.
- 3.3.** En términos del momento, la energía cinética se escribirá $K = p^2/2m$ en el caso no relativista y $K = (m^2 c^4 + p^2 c^2)^{1/2} - mc^2$ en el relativista. Como $p = h/\lambda$, se tendrá $\lambda = [h/(2m)^{1/2}](1/K^{1/2})$ cuando $v \ll c$, y $\lambda = hc/[K(K + 2mc^2)]^{-1/2}$ en el caso general. Si $v \sim c$, entonces $K \gg 2mc^2$, de donde $\lambda \approx hc/K$.
- 3.4.** El ángulo de Bragg correspondiente a la reflexión de orden n se determinará resolviendo la ecuación $2d \sin \theta = n\lambda$, $n = 1, 2, \dots$ En nuestro caso λ puede hallarse de las expresiones deducidas en el ejercicio anterior, obteniéndose $\lambda = 0.286 \text{ \AA}$. Nos quedará, por tanto, $\sin \theta = 0.075 n$, que sólo tiene solución si $n \leq 13$. En consecuencia, se observarán trece órdenes.
- 3.5.** La máxima incertidumbre en la posición del electrón será, obviamente, $(\Delta x)_{\text{máx}} = l$, ya que éste no puede estar fuera de la cavidad. Por consiguiente, la relación de indeterminación $\Delta x \Delta p \geq h$ obliga a que $(\Delta p)_{\text{mín}} \geq h/(\Delta x)_{\text{máx}} = h/l$. Pero, por otra parte, la energía cinética mínima está relacionada con $(\Delta p)_{\text{mín}}$ mediante la expresión $K_{\text{mín}} \sim (m_e^2 c^4 + (\Delta p)_{\text{mín}}^2 c^2)^{1/2} - m_e c^2 = (m_e^2 c^4 + (h/l)^2 c^2)^{1/2} - m_e c^2$. En el caso particular $l \sim 1 \text{ \AA}$ se obtiene $K \sim 155 \text{ eV}$.
- 3.6.** Si llamamos $E = hc/\lambda$ a la energía de un fotón, del enunciado se desprende que la indeterminación introducida en la energía ΔE en el proceso de contaje de dicho fotón debe ser inferior a $E/10^6$, es decir, $\Delta E \leq hc/10^6 \lambda$. Pero, por otro lado, de la relación de Heisenberg $\Delta E \Delta t \geq h$ se tiene que el tiempo Δt necesario para identificar al fotón será como mínimo igual a $h/\Delta E = 10^6 \lambda/c$, luego el número de fotones N que podrán contarse como máximo en un segundo es $N \sim 1/(10^6 \lambda/c) \sim 10^9$ fotones.

- 3.7. Suponiendo que el electrón se encuentra a una distancia media del núcleo $\Delta r = l$, la relación de Heisenberg $\Delta r \Delta p \geq \hbar$ conlleva una indeterminación en el momento $\Delta p \sim \hbar/\Delta r = \hbar/l$ en torno al valor medio $p = 0$. La energía total podrá escribirse, por tanto, en la forma

$$E \sim \frac{1}{2m_e} \left(\frac{\hbar}{l} \right)^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{l}$$

El valor mínimo de la energía se determinará de la condición $dE/dl = 0$, obteniéndose $l = 0.529 \text{ \AA}$. Sustituyendo este valor en la ecuación de la energía se llega a $E_{\min} = -13.6 \text{ eV}$, idéntico al valor experimental. Esta coincidencia se debe a haber escrito la relación de Heisenberg con \hbar en el miembro de la derecha. No debemos olvidar que el razonamiento anterior constituye simplemente una estimación.

- 3.8. Razonando de manera similar al ejercicio anterior se tendrá $\Delta x \sim 1 \Rightarrow \Delta p \sim \hbar/2\Delta x = \hbar/2l$. La energía total se escribirá:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 \sim \frac{\hbar^2}{8ml^2} + \frac{1}{2} kl^2$$

ya que el valor medio de p es cero. Minimizando E resolviendo la ecuación $dE/dl = 0$ se obtiene finalmente (recordando que $\omega = (k/m)^{1/2}$)

$$E_{\min} = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

en completo acuerdo con el experimento. Esta coincidencia ha sido de nuevo posible por haber escrito convenientemente la relación de Heisenberg. La determinación rigurosa se verá en capítulos posteriores.

- 4.1. A partir de [4.2.3], [4.2.4] y la definición de $k \equiv \rho e/3\epsilon_0$, se obtiene inmediatamente $v = [e/4\pi(\pi\epsilon_0 m_e)^{1/2}] r_A^{-3/2}$, donde r_A denota el radio atómico.
- 4.2. El cociente p_f/p_i debe ser, obviamente, una cantidad positiva. Pero para ello es preciso que el radicando que aparece en el miembro de la derecha de [4.2.7] sea positivo, lo que implica $\cos^2 \theta \geq 1 - (m_e/m_\alpha)^2$. Teniendo en cuenta que $m_e/m_\alpha \approx 1/7344$, se obtiene, finalmente, $\theta \sim 10^{-4}$ rad.
- 4.3. Basta integrar la distribución angular dada entre 90° y 180° , y dividir entre I_0 , es decir,

$$\int_{90^\circ}^{180^\circ} \frac{2\theta}{a^2} e^{-\theta^2/a^2} d\theta = -e^{-\theta^2/a^2} \Big|_{90^\circ}^{180^\circ} \approx e^{-8100}$$

que es una cantidad completamente despreciable en comparación con el valor experimental (0.01%).

- 4.4. A la distancia de máximo acercamiento, $r_{\text{máx}}$, con parámetro de impacto nulo, la energía cinética inicial asintótica de la partícula α , $Mv^2/2$ se habrá convertido en energía potencial, $(1/4\pi\epsilon_0)(2Ze^2/r_{\text{máx}})$, de donde, igualando ambas, se obtiene $r_{\text{máx}} = Ze^2/\pi\epsilon_0 Mv^2 = D$.
- 4.5. Obsérvese que la coordenada radial r coincide con D_θ cuando se cumple $\varphi = (\pi - \theta)/2$. Sustituyendo estos valores en [4.3.14] y teniendo en cuenta que $\cotg(\theta/2) = \text{tg}[(\pi - \theta)/2]$, obtenemos finalmente, haciendo uso de [4.3.17]

$$D_\theta = \frac{D}{2} \left[1 + \frac{1}{\cos\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right)} \right]$$

que conduce inmediatamente a [4.3.15].

- 4.6. En tal caso se cumplirá $e^{-\sigma\rho z} = 1/2$, de donde $z = -(\ln 0.5)/\sigma\rho = 0.69/\sigma\rho$.
- 4.7. La fórmula general es $1/\lambda = R_H(1/m^2 - 1/n^2)$, con $n > m$. La línea de mayor longitud de onda se obtendrá haciendo $n = m + 1$, con lo que nos queda $\lambda_{\text{máx}} = (1/R_H)[m^2(m + 1)^2/(2m + 1)]$, y la línea límite de la serie m se hallará haciendo tender n a infinito, esto es, $\lambda_{\text{lim}} = (1/R_H)m^2$. Nos queda, por tanto,

serie de Lyman: $m = 1$, $\lambda_{\text{máx}} = 1.216 \times 10^3 \text{ \AA}$; $\lambda_{\text{lim}} = 9.118 \times 10^2 \text{ \AA}$

serie de Balmer: $m = 2$, $\lambda_{\text{máx}} = 6.565 \times 10^3 \text{ \AA}$; $\lambda_{\text{lim}} = 3.647 \times 10^2 \text{ \AA}$

serie de Paschen: $m = 3$, $\lambda_{\text{máx}} = 1.876 \times 10^4 \text{ \AA}$; $\lambda_{\text{lim}} = 8.206 \times 10^3 \text{ \AA}$

- 5.1. Las leyes de conservación del momento y la energía exigen que

$$m_f v = \frac{h\nu}{c}$$

$$E_i = E_f + \frac{1}{2} m_f v^2 + h\nu$$

donde m_f es la masa del átomo en el estado final y v su velocidad de retroceso. De ambas ecuaciones, despreciando términos del orden de $[|E_i - E_f|/m_f c^2]^3$ y superiores se obtiene, finalmente,

$$h\nu \approx \Delta E \left(1 - \frac{\Delta E}{2m_f c^2} \right) \quad , \quad (\Delta E = |E_i - E_f|)$$

- 5.2. Basta recordar la expresión de L en coordenadas polares planas: $L = mr^2 d\theta/dt = 2\pi mr^2 f$ y sustituir los valores de r y f de las ecuaciones [5.2.4], [5.2.12] y [5.2.20] con $\alpha = 1/2$.
- 5.3. Al ser un movimiento periódico, son aplicables las reglas de SWI. En nuestro caso existe un solo grado de libertad, por lo que se tendrá

$$J = \oint p dx = p \oint dx = 2pd = nh, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

ya que al propagarse libremente el momento p es constante en módulo. Se obtiene así $p = nh/2d$ (ecuación [5.4.15]) y $E = p^2/2m = n^2 h^2/8md^2$. Las frecuencias del espectro de emisión serán

$$\nu = \frac{\pi \hbar}{4md^2} (n_2^2 - n_1^2) \quad , \quad n_2 > n_1$$

- 5.4. A partir de las ecuaciones [5.4.26] a [5.4.28] se llega a las siguientes expresiones:

$$|L_z| = \frac{1}{2\pi} J_\phi \quad ; \quad L = \frac{1}{2\pi} (J_\theta + J_\phi) \quad ; \quad E = -\frac{2\pi^2 \mu Z^2 e^4}{(J_r + J_\theta + J_\phi)^2}$$

Recordando ahora que $J_r = n_r h$, $J_\theta = n_\theta h$ y $J_\phi = n_\phi h$, y teniendo en cuenta las definiciones de los números cuánticos n , n_ψ y m se obtienen inmediatamente las ecuaciones [5.4.32] a [5.4.34].

- 5.5. La degeneración se calculará a partir de la siguiente suma:

$$\sum_{n_\psi=1}^n (2n_\psi + 1) = 2 \sum_{n_\psi=1}^n n_\psi + n = n(n+2)$$

- 5.6. Desde un punto de vista mecánico, se trata de un problema enteramente análogo al que se presenta con fuerzas coulombianas, ya que ambos potenciales (centrales) son idénticos (salvo constante de proporcionalidad). Por consiguiente, puede seguirse un razonamiento completamente similar al empleado por Bohr, sólo que sustituyendo la constante electromagnética $e^2/4\pi\epsilon_0$ por la gravitatoria $Gm_p m_e$, donde G es la constante de gravitación universal y m_p y m_e denotan las masas respectivas del protón y del electrón. Las expresiones para el radio de la órbita y la energía de ligadura del estado fundamental serán, pues, las mismas que las propuestas por Bohr, pero con la sustitución antes indicada. Se tiene, en consecuencia, para $n = 1$, $r = 1.2 \times 10^{29}$ m y $E = 2.6 \times 10^{-78}$ eV.

- 5.7. Las energías de los tres primeros niveles del átomo de hidrógeno son $E_1 = -13.6$, $E_2 = -3.4$ y $E_3 = -1.51$ eV, y se cumple, por tanto, $E_2 - E_1 = 10.2$ eV, $E_3 - E_1 = 12.09$ eV. En consecuencia, los potenciales V_1 y V_2 aceleran los electrones de bombardeo de manera que éstos excitan el electrón del átomo de hidrógeno desde el estado fundamental a los estados $n = 2$ y $n = 3$. Las tres líneas corresponderán a la radiación emitida resultante de las transiciones $E_3 \rightarrow E_2$, $E_3 \rightarrow E_1$ y $E_2 \rightarrow E_1$.
- 5.8. En este caso, la única coordenada generalizada será el ángulo de rotación θ . Como la energía potencial es nula, la lagrangiana valdrá $\mathcal{L} = K = (1/2)I\dot{\theta}^2$, siendo I el momento de inercia. Tendremos entonces $p_\theta = \partial\mathcal{L}/\partial\dot{\theta} = I\dot{\theta}$. Expresando ahora p_θ en términos de la energía del sistema $E(=K)$, nos queda $p_\theta = \sqrt{2IE}$. Fijada E , vemos que el momento generalizado no depende de θ , por lo que, aplicando la regla de SWI, obtenemos:

$$\oint p_\theta d\theta = p_\theta \oint d\theta = 2\pi p_\theta = nh \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

- 5.9. El momento lineal puede escribirse en la forma $p = [2m(E - \alpha|x|)]^{1/2}$, por lo que, aplicando la regla de SWI, tendremos

$$\oint p dx = 2 \int_{-x_0}^{x_0} p dx = 2 \int_0^{x_0} [2m(E - \alpha x)]^{1/2} dx = nh$$

siendo $x_0 = E/\alpha$ el punto de elongación máxima en el estado de energía total E .

Fijada ésta, la integral anterior no presenta dificultad, y se obtiene finalmente:

$$E_n = \frac{3^{2/3}}{2^{7/3}} \left(\frac{\alpha h}{m^{1/2}} \right)^{2/3} n^{2/3}$$

Nótese que las relaciones de indeterminación de Heisenberg no permiten el valor $n = 0$.

PARTE SEGUNDA

Mecánica cuántica

- Ecuación de Schrödinger e introducción a la interpretación probabilística.
- Desarrollo de la interpretación probabilística.
- Estados ligados en una dimensión.
- Coeficientes de reflexión y transmisión.
- Sistemas tridimensionales.
- Momento angular.
- Potencias centrales.
- Espín.
- Métodos de aproximación.
- Partículas idénticas. Fotones.
- Introducción a la Mecánica Estadística Cuántica.
- Aplicaciones de las estadísticas cuánticas.
- Introducción a la teoría cuántica de la dispersión.

BIBLIOGRAFÍA

- Alonso, M. y Finn, E. (1971). *Física*, vol. III: Fundamentos cuánticos y estadísticos. Fondo Educativo Interamericano.
Libro de nivel introductorio que trata de diversas partes de la Física Cuántica. En particular, presenta un tratamiento interesante y accesible de la Mecánica Estadística Cuántica.
- Ballentine, L. E. (1998). *Quantum Mechanics. A Modern Development*. Singapur: World Scientific.
Es un libro de nivel superior. Contiene numerosos y cuidadosos análisis y discusiones de carácter conceptual.
- Fernández Álvarez-Estrada, R. y Sánchez Gómez, J. L. (1996). *100 problemas de Física Cuántica*. Madrid: Alianza.
Selección de problemas que, en su gran mayoría, pueden servir de extensión natural (evitando duplicaciones) a diversos ejercicios y ejemplos ofrecidos en el presente libro.
- Cohen, C., Diu, B. y Laloe, F. (1973). *Mecanique Quantique*, vols. 1 y 2. París: Hermann.
Libros de introducción general a la Mecánica Cuántica, de carácter amplio y, a la vez, pedagógico.
- Galindo, A. y Pascual, P. (1989). *Mecánica Cuántica*, vols. 1 y 2. Madrid: Eudema.
Obras muy completas que ofrecen una panorámica muy amplia de la Mecánica Cuántica. Su nivel es superior y su enfoque matemáticamente riguroso.
- Galindo, A. y Pascual, P. (1989). *Problemas de Mecánica Cuántica*. Madrid: Eudema.
Obras muy completas que ofrecen una panorámica muy amplia de la Mecánica Cuántica. Su nivel es superior y su enfoque matemáticamente riguroso.
- Rusk, R. D. (1965). *Introduction to Atomic and Molecular Physics*. Nueva York: London Iliffe Books. Ltd, Nueva York.
Libro de carácter descriptivo y nivel más bien elemental. Contiene discusiones simplificadas de numerosos fenómenos y experimentos en el ámbito de la Física Cuántica.
- Ynduráin, F. J. (1988). *Mecánica Cuántica*. Madrid: Alianza.
Libro de nivel intermedio, superior al del presente texto. Trata, más ampliamente que éste, diversos aspectos de la Mecánica Cuántica (discutiendo, en detalle, numerosos pasos intermedios de los desarrollos). Presenta también temas que no hemos abordado aquí.

6

Ecuación de Schrödinger e introducción a la interpretación probabilística

Ramón F. Álvarez-Estrada

6.1. FENÓMENOS ONDULATORIOS Y ECUACIONES DE ONDAS EN FÍSICA CLÁSICA

Recordemos algunos fenómenos ondulatorios en el espacio tridimensional importantes en Física Clásica, las magnitudes físicas asociadas a ellos y su propagación (es decir, sus ecuaciones de ondas).

Sonido en un fluido

Imaginemos un medio fluido homogéneo (aire, por ejemplo) en equilibrio y sea P_0 el valor constante de la presión en el fluido. Supongamos que, en cierta región del fluido, y mediante un agente externo, se produce en el instante $t = 0$ una perturbación que genera *pequeñas* alteraciones del estado de equilibrio (un grito, por ejemplo). La perturbación se propaga en forma de onda sonora al resto del fluido: así, en el instante t , en un punto \mathbf{r} al que aquella haya llegado, la presión es $P_0 + p'(\mathbf{r}, t)$, donde p' es la pequeña perturbación sonora de la presión: $|p'(\mathbf{r}, t)| \ll P_0$. Puede justificarse que esa perturbación se propaga, en el espacio ocupado por el fluido a lo largo del tiempo, de forma que satisface la ecuación de ondas [$\mathbf{r} = (x, y, z)$]

$$\Delta p'(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} p'(\mathbf{r}, t) \quad [6.1.1]$$

donde

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad [6.1.2]$$

es la laplaciana, y v es la velocidad de propagación de la onda sonora en el fluido.

Ondas electromagnéticas en vacío dentro de una cavidad

Consideremos radiación electromagnética que se propaga libremente en vacío, dentro de una cavidad como la representada en la figura 1.6. Así, en el punto $\mathbf{r} = (x, y, z)$ en el instante t , existe un campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = (E_x, E_y, E_z)$ y uno magnético $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = (B_x, B_y, B_z)$ que constituyen las magnitudes características de la perturbación electromagnética que se está propagando. En la Teoría Electromagnética Clásica, se justifica que la componente E_x verifica la ecuación de ondas [1.5.1], donde c es la velocidad de propagación de las ondas electromagnéticas en el vacío (es decir, la velocidad de la luz). Análogas ecuaciones son satisfechas por E_y, E_z y por las componentes de \mathbf{B} .

Algunas de las propiedades fundamentales de las ecuaciones de ondas [6.1.1] y [1.5.1] son:

- a) Las velocidades de propagación (v, c) que en ellas aparecen son independientes de la longitud de onda y de la frecuencia. Por tanto, la ecuación de ondas ([6.1.1] o [1.5.1]) correspondiente a cada fenómeno es satisfecha por todas las perturbaciones ondulatorias de ese tipo (sonora o electromagnética), cualesquiera que sean su longitud de onda y su frecuencia. El siguiente análisis clarificará esta propiedad. Imaginemos un frente de ondas sonoro plano (o aproximadamente plano en una cierta región y durante cierto intervalo temporal) que se propaga en la dirección dada por el vector unitario \mathbf{u} ($|\mathbf{u}| = 1$) con longitud de onda λ y frecuencia ν . Nótese que la velocidad del sonido v que aparece en [6.1.1] cumple:

$$v = \lambda \nu \quad [6.1.3]$$

p' es entonces una función de $(\mathbf{r}\mathbf{u}/\lambda) - vt \equiv \sigma$ solamente, es decir,

$$p' = p'(\sigma) \quad [6.1.4]$$

Por ejemplo, $p' = a \cos 2\pi\sigma$ siendo a una constante. Calculando las derivadas

$$\Delta p' = \frac{d^2 p'}{d\sigma^2} \frac{1}{\lambda^2}, \quad \frac{\partial^2 p'}{\partial t^2} = \frac{d^2 p'}{d\sigma^2} (-v)^2 \quad [6.1.5]$$

es inmediato comprobar, usando [6.1.3], que [6.1.4] es solución de [6.1.1] cualesquiera que sean λ y ν (puesto que ν es constante y no depende de estas últimas). Análisis y resultados similares son válidos para el caso de las ondas electromagnéticas.

- b) Consideremos dos perturbaciones sonoras descritas por dos funciones $p'_1(\mathbf{r}, t)$ y $p'_2(\mathbf{r}, t)$, soluciones ambas de [6.1.1]. Pues bien, la nueva función

$$p'(\mathbf{r}, t) = \lambda_1 p'_1(\mathbf{r}, t) + \lambda_2 p'_2(\mathbf{r}, t) \quad [6.1.6]$$

donde λ_1 y λ_2 son constantes reales, es otra posible solución de [6.1.1], y representa una nueva perturbación sonora que puede propagarse realmente en el medio. Véase el ejercicio 6.1. Esta propiedad recibe el nombre de principio de superposición, y es válida también para el caso electromagnético (por ejemplo, para [1.5.1]).

Parece innecesario advertir que, en los fenómenos de Física Clásica que acabamos de recordar, p' y E_x son magnitudes físicas descritas por funciones reales, es decir, sin parte imaginaria. Por ejemplo, $p' = a \cos 2\pi(\mathbf{r}\mathbf{u}/\lambda - \nu t)$, siendo a una constante real. En la sección 6.2 encontraremos una magnitud ondulatoria asociada a fenómenos microscópicos, concretamente la función de onda correspondiente a las ondas de De Broglie, que será *compleja*, esto es, vendrá descrita por *dos* funciones reales (en cada \mathbf{r}, t): la parte real y la parte imaginaria.

6.2. FUNCIÓN DE ONDA Y ECUACIÓN DE ONDAS DE SCHRÖDINGER

Por hipótesis, todos los objetos materiales microscópicos (electrones, protones, neutrones, átomos...) bajo estudio se moverán a velocidades pequeñas comparadas con la de la luz (c), así que será válida la cinemática no-relativista, y sus evoluciones a lo largo del tiempo serán analizadas respecto a un sistema de referencia inercial¹, salvo mención explícita de lo contrario. Así, para una partícula microscópica de masa m libre en el espacio tridimensional con momento \mathbf{p} y energía cinética E se tiene:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad [6.2.1]$$

Según se ha establecido en el capítulo 3, la partícula lleva asociada una onda (onda de materia o de De Broglie) que viaja acompañándola. Dicha onda es plana aproximadamente en una región R en la cual se encuentra la partícula durante un intervalo (t_1, t_2) (véase figura 6.1). En R , la onda se propaga en la dirección de \mathbf{p} (también determinada por el vector unitario \mathbf{u}), con vector de onda \mathbf{k} , longitud de onda λ y frecuencia ν . Se tiene:

$$\lambda|\mathbf{k}| = 2\pi, \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} = \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} = \mathbf{u}, |\mathbf{u}| = 1 \quad [6.2.2]$$

así como las relaciones de De Broglie (compárese con [3.3.3-4]):

$$\lambda = \frac{h}{|\mathbf{p}|}, \quad E = h\nu \quad [6.2.3]$$

¹ Se dice que un sistema de referencia es inercial si el movimiento respecto a él de cualquier cuerpo o partícula libres (no sometidos a fuerzas externas) es rectilíneo y uniforme.

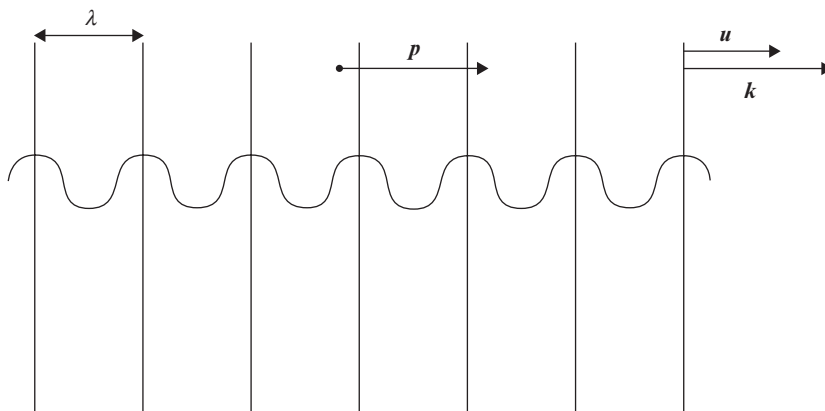


Figura 6.1. Onda de materia (aproximadamente plana en R) asociada a una partícula microscópica libre.

Supondremos que las dimensiones de la región R son mucho mayores que λ .

Recordemos los fenómenos ondulatorios *clásicos* mencionados en la sección 6.1. Resulta natural aceptar que en el fenómeno ondulatorio *microscópico* correspondiente a las ondas de De Broglie existe también, en cada punto \mathbf{r} y en cada instante t una magnitud física asociada, que llamaremos función de onda y que representaremos por $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Claramente, Ψ debe de variar de forma aproximadamente periódica en t (si $t_1 < t < t_2$) y en \mathbf{r} (dentro de R) con períodos $1/\nu$ y λ , respectivamente, es decir, será un frente de ondas aproximadamente plano.

Dos cuestiones fundamentales se plantean:

1. ¿Cómo se propaga la magnitud ondulatoria $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en el espacio y en el tiempo? Esto es, ¿cuál es la ecuación de ondas general satisfecha por $\Psi(\mathbf{r}, t)$, cualesquiera que sean λ y ν ?
2. ¿Cuál es el significado físico de $\Psi(\mathbf{r}, t)$?

Históricamente, se respondió a la cuestión 1 (por E. Schrödinger) antes que a la 2, y éste será el orden en el que procederemos en esta introducción. Así pues, obtendremos la ecuación de ondas en esta sección y en la 6.4, dejando el significado físico de Ψ para la 6.6. Advertiremos que la obtención de dicha ecuación de ondas (conocida como la ecuación de Schrödinger) *no* será una demostración rigurosa. Constituirá, más bien, un proceso inductivo, en el que se incluirán, en «los momentos oportunos», ciertas «hipótesis naturales». Estas últimas se justificarán por

- i) Ser consistentes con las ideas subyacentes.
- ii) Conducir a predicciones físicas de acuerdo con resultados experimentales en todos los casos conocidos hasta el presente.

Ecuación de Schrödinger e introducción a la interpretación probabilística

Hagamos un primer ensayo.

Sea el frente de ondas de materia aproximadamente plano ya mencionado

$$\Psi = \Psi(\sigma) \quad , \quad \sigma = \frac{ru}{\lambda} - vt \quad [6.2.4]$$

donde λ , v satisfacen las ecuaciones [6.2.1-3]. Se sobreentiende que $\Psi(\sigma)$ es una función real. Un cálculo análogo al que condujo a que [6.1.4] satisfacía [6.1.1] muestra que la función de onda $\Psi(\sigma)$ verifica la ecuación de ondas

$$\Delta\Psi = \frac{1}{\omega^2} \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} \quad , \quad \omega = \lambda v \quad [6.2.5]$$

Comparando con [6.1.1], vemos que ω desempeña el papel de la velocidad de propagación de la onda de De Broglie. Estudiemos ahora si ω es la misma para cualesquiera λ , v . Las siguientes ecuaciones son consecuencia directa de [6.2.1-3] (compárese con el problema 3.2):

$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \quad , \quad v = \frac{h}{2m\lambda^2} \quad [6.2.6]$$

Por tanto

$$\omega = \frac{h}{2m\lambda} = \left(\frac{E}{2m} \right)^{1/2} \quad [6.2.7]$$

Así pues, ω depende de λ , y, por tanto, [6.2.5] *no* es la ecuación de ondas general válida para todas las ondas de materia que buscamos. Por el contrario, para cada λ hay una ecuación del tipo [6.2.5].

De otra forma, estudiaremos las posibilidades

$$\Psi(\sigma) = a \cos 2\pi\sigma \quad [6.2.8]$$

$$\Psi(\sigma) = a \operatorname{sen} 2\pi\sigma \quad [6.2.9]$$

siendo a una constante real. Continuamos, así, suponiendo que $\Psi(\sigma)$ es real. Es imposible encontrar ninguna ecuación de ondas del tipo

$$b\Delta\Psi = b_2 \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} + b_1 \frac{\partial\Psi}{\partial t} + b_0\Psi \quad [6.2.10]$$

donde b , b_0 , b_1 y b_2 son constantes independientes de λ y no todas nulas a la vez, que tenga como soluciones [6.2.8] o [6.2.9]. Supongamos que se añade un número finito de derivadas de orden superior respecto a t a [6.2.10] (con nuevos coeficientes b_3 , ...): puede

comprobarse que [6.2.8] y [6.2.9] tampoco son soluciones de la nueva ecuación de ondas resultante. La justificación de estos resultados negativos constituye el ejercicio 6.2.

Realicemos una nueva y, afortunadamente, última tentativa. Supongamos que

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = a \exp i2\pi\sigma \quad [6.2.11]$$

siendo a una constante real o compleja. La novedad de [6.2.11] consiste en que, ahora, se da cabida a funciones complejas. Se tiene:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i2\pi\nu\Psi \quad , \quad \Delta\Psi = -\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\Psi \quad [6.2.12]$$

Utilizando [6.2.12] y [6.2.6], es inmediato observar que [6.2.11] satisface

$$i\frac{h}{2\pi}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m(2\pi)^2}\Delta\Psi \quad [6.2.13]$$

Llegamos así al siguiente resultado fundamental: [6.2.13] es la ecuación de ondas buscada, puesto que en ella los coeficientes *no* dependen de λ ni de ν y es satisfecha por [6.2.11] para todas λ, ν (tales que [6.2.6] se verifique). [6.2.13] es la ecuación de Schrödinger. Como se ve, aunque las ideas expuestas en la sección 6.1, basadas en los fenómenos ondulatorios clásicos, *no han sido aplicables de forma estricta* para llegar a la ecuación de ondas [6.2.13], *es innegable que han marcado la pauta* para obtenerla. La cuestión fundamental pendiente es cómo interpretar físicamente esta función de onda Ψ que tiene no sólo parte real, sino también imaginaria.

Introduciremos por conveniencia la constante reducida de Planck

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad [6.2.14]$$

que permite reescribir la ecuación de Schrödinger [6.2.13] en la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad [6.2.15]$$

6.3. PRINCIPIO DE SUPERPOSICIÓN PARA ONDAS DE MATERIA

Una propiedad fundamental de [6.2.15] es su linealidad. Así, sean $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ y $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ dos ondas de materia asociadas a la partícula en dos situaciones distintas que son soluciones de [6.2.15]. Si λ_1 y λ_2 son constantes complejas independientes de \mathbf{r}, t , entonces

$$\lambda_1\Psi_1(\mathbf{r}, t) + \lambda_2\Psi_2(\mathbf{r}, t) \quad [6.3.1]$$

es también solución de [6.2.15]. En efecto

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] (\lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2) = \\ & = \lambda_1 \left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi_1 \right\} + \lambda_2 \left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi_2 \right\} = 0 \end{aligned} \quad [6.3.2]$$

puesto que el interior de cada llave se anula al ser Ψ_1 y Ψ_2 soluciones de [6.2.15]. Todo ello es posible dado que los coeficientes en [6.3.1] son independientes de la longitud de onda.

Supongamos ahora que en vez de la onda plana [6.2.11] tenemos un grupo o paquete de ondas, es decir, una superposición infinita y continua de ellas, tal como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3\mathbf{k} A(\mathbf{k}) \exp i[\mathbf{k}\mathbf{r} - 2\pi\nu t] \quad [6.3.3]$$

Por conveniencia, hemos usado el vector de onda \mathbf{k} (véase [6.2.2]) en lugar de λ , \mathbf{u} . En virtud de [6.2.2-3], ν es función de \mathbf{k} , esto es:

$$\nu = \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{4\pi m} \quad [6.3.4]$$

Por otra parte, $A(\mathbf{k})$ es una función de \mathbf{k} , pero independiente de \mathbf{r} , t , que indica cómo se superponen las diversas ondas para formar el paquete. [6.3.3] también satisface la ecuación [6.2.15], cualquiera que sea $A(\mathbf{k})$: la justificación constituye el ejercicio 6.3.

Aceptaremos que [6.3.1] y [6.3.3] representan posibles ondas de materia que pueden existir físicamente. En general, haremos la hipótesis de que la función de onda obtenida al formar combinaciones lineales de ondas de materia representa una nueva onda de materia, que puede existir también realmente asociada a la partícula. Esta nueva hipótesis, junto con la linealidad de [6.2.15], constituyen el llamado principio de superposición en Mecánica Cuántica: éste es el análogo para [6.2.15] del principio de superposición para fenómenos ondulatorios clásicos mencionado en la sección 6.1.

6.4. PARTÍCULA EN POTENCIAL EXTERIOR: ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

Consideremos una partícula microscópica que *no* está libre sino sometida a un potencial exterior $V(\mathbf{r})$ independiente del tiempo. Por hipótesis, $V(\mathbf{r})$ varía lentamente con \mathbf{r} , en

un sentido que precisaremos más abajo. Supondremos que la partícula tiene momento $\mathbf{p} = \mathbf{p}(r)$ cuando está en r y energía total constante E , así que:

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

Por tanto, la partícula lleva asociada una onda que, en cada instante de un intervalo de tiempo y en una cierta región R , es aproximadamente plana. De acuerdo con la hipótesis de De Broglie, la longitud de onda es

$$\lambda = \frac{h}{|\mathbf{p}|} = \frac{h}{\sqrt{2m[E - V(r)]}} \quad [6.4.1]$$

y, en consecuencia, varía con r : $\lambda = \lambda(r)$. La frecuencia ν , el vector de onda \mathbf{k} y el vector unitario de propagación \mathbf{u} , aunque dependen también de r , continúan verificando [6.2.2-3]: véase la figura 6.2. Supondremos que:

- i) $|\lambda(r)|$, al variar r en la región R , es mucho menor que las dimensiones de dicha región.
- ii) V varía con r en toda la región R muy lentamente, de forma que

$$|r\nabla\lambda(r)| \ll |\lambda(r)| \quad [6.4.2]$$

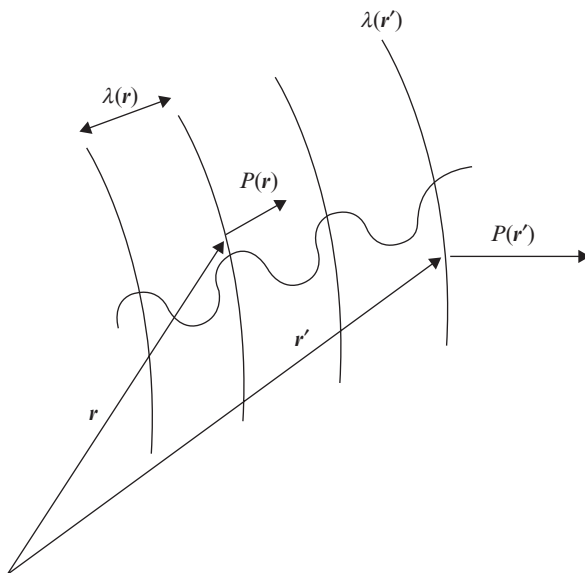


Figura 6.2. Onda de materia asociada a una partícula sometida a un potencial $V(r)$ lentamente variable. λ , \mathbf{p} , etc., varían (suavemente) al pasar de un punto a otro.

donde

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad [6.4.3]$$

denota el gradiente.

El estudio del caso libre en la sección 6.2 sugiere que, ahora, la función de onda asociada a la partícula en la región R es también *compleja*, y viene dada por (comparar con [6.2.11])

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \sim \exp i2\pi \left[\frac{\mathbf{r}\mathbf{u}}{\lambda} - vt \right] \quad [6.4.4]$$

Nuestra tarea consiste en hallar la ecuación de ondas satisfecha por [6.4.4] siguiendo la pauta de la sección 6.2. Se tiene

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i2\pi v \Psi \quad [6.4.5]$$

$$\nabla \Psi = \frac{i2\pi}{\lambda} \left[\mathbf{u} - (\mathbf{u}\mathbf{r}) \frac{\nabla \lambda}{\lambda} \right] \Psi \sim \frac{i2\pi}{\lambda} \mathbf{u} \Psi \quad [6.4.6]$$

en virtud de [6.4.2], es decir, de la hipótesis ii). Por tanto,

$$\Delta \Psi = \nabla[\nabla \Psi] \sim -\left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \Psi \quad [6.4.7]$$

En consecuencia, utilizando [6.4.7], [6.4.5], [6.2.2-3], [6.4.1] y [6.2.14], es inmediato obtener la ecuación de ondas, válida para todas λ, v

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad [6.4.8]$$

Más en general, supongamos una partícula microscópica no-relativista que puede estar en cualquier punto del espacio, sometida al potencial $V(\mathbf{r}, t)$ (dependiente de \mathbf{r}, t , en general) y que lleva una onda de materia asociada $\Psi = \Psi(\mathbf{r}, t)$. Aceptaremos como un postulado general que esta última se propaga según la ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}, t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad [6.4.9]$$

El hecho de haber llegado a [6.4.8] a partir de [6.4.4] mediante las aproximaciones [6.4.6-7] podría suscitar en el lector dudas como las siguientes: ¿no habría una ecuación de ondas para la partícula no-relativista más exacta que [6.4.8], debida a los términos despreciados en [6.4.6-7]? ¿No sería esa nueva ecuación más precisa que [6.4.8] cuando el potencial $V(\mathbf{r})$ fuese tal que la condición [6.4.2] se violase? Las respuestas son claras: i) cuando [6.4.2] no se satisface, [6.4.4] deja de ser válida como solución aproximada, pese a lo cual, ii) [6.4.8], así como su generalización [6.4.9], continúan siendo las ecuaciones de ondas correctas para una partícula microscópica no-relativista en un potencial V , aunque éste no sea de variación lenta. Casi 90 años de concordancia entre las predicciones extraídas de [6.4.8-9] y resultados experimentales avalan esas respuestas.

Si $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ y $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ satisfacen [6.4.9], su superposición lineal con coeficientes complejos λ_1, λ_2 (independientes de \mathbf{r}, t), análoga a [6.3.1], también verifica [6.4.9]. La justificación de esta propiedad constituye el ejercicio 6.4. Haremos la hipótesis de que dicha superposición es una nueva onda de materia que puede también existir realmente en otra situación cuántica: esto es, de nuevo, el principio de superposición en Mecánica Cuántica (ahora, para la ecuación [6.4.9]).

6.5. EVOLUCIÓN DE UN PAQUETE DE ONDAS LIBRE

Consideremos una partícula *libre* a la cual va asociado el paquete [6.3.3] con una cierta función $A(\mathbf{k})$ independiente de \mathbf{r}, t .

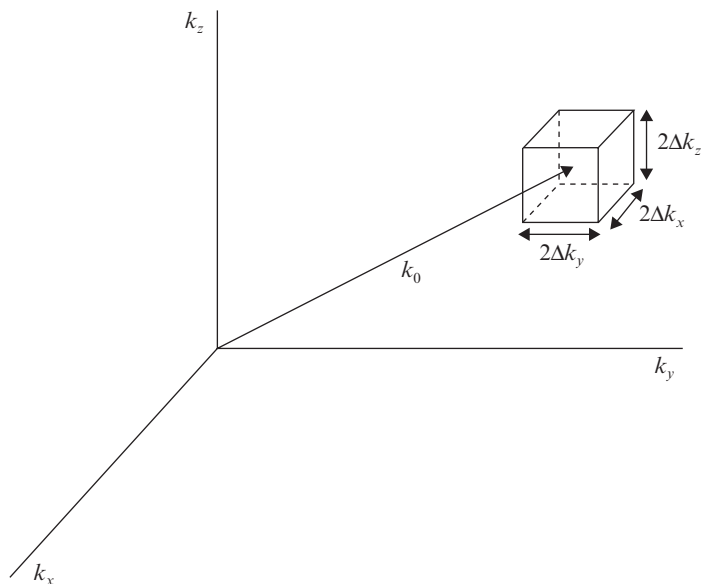


Figura 6.3. La función $|A(\mathbf{k})|$ tiene su máximo si $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ es apreciable dentro del paralelepípedo indicado (correspondiente a [6.5.2]) y prácticamente nula fuera de él.

Ecuación de Schrödinger e introducción a la interpretación probabilística

Supongamos que:

- i) Por sencillez, $A(\mathbf{k})$ es real positiva, es decir

$$A(\mathbf{k}) = |A(\mathbf{k})| \quad [6.5.1]$$

Un caso más general se verá en la sección 9.4.

- ii) $A(\mathbf{k})$ tiene un máximo agudo si $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 = (k_{0x}, k_{0y}, k_{0z})$.
 iii) $A(\mathbf{k})$ toma valores apreciables solamente si $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ verifica

$$|k_x - k_{0x}| < \Delta k_x, \quad |k_y - k_{0y}| < \Delta k_y, \quad |k_z - k_{0z}| < \Delta k_z \quad [6.5.2]$$

- iv) $\Delta k_x, \Delta k_y, \Delta k_z$ son constantes positivas tales que

$$\Delta k_x \ll |k_{0x}|, \quad \Delta k_y \ll |k_{0y}|, \quad \Delta k_z \ll |k_{0z}| \quad [6.5.3]$$

Así, si, al menos, una componente de \mathbf{k} no verifica la correspondiente restricción dada en [6.5.2], $|A(\mathbf{k})|$ es muy pequeño (comparado con su magnitud en $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$) o nulo. Véase la figura 6.3. Hagamos

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{k}' \quad , \quad v_0 = \frac{\hbar \mathbf{k}_0^2}{4\pi m} \quad [6.5.4]$$

En virtud de [6.5.2-3], la magnitud de \mathbf{k}'^2 es mucho menor que la de \mathbf{k}_0^2 . Por tanto,

$$v = \frac{\hbar}{4\pi m} (\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}')^2 \simeq v_0 + \frac{\hbar \mathbf{k}_0 \mathbf{k}'}{2\pi m} \quad [6.5.5]$$

Efectuando el cambio de variables de integración $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ en la integral que aparece en [6.3.3] y utilizando la aproximación [6.5.5], se obtiene fácilmente

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \simeq \exp i(\mathbf{k}_0 \mathbf{r} - 2\pi v_0 t) G(\mathbf{r} - \mathbf{v} t) \quad [6.5.6]$$

donde

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{v} t) = \int d^3 \mathbf{k}' |A(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}')| \exp i[\mathbf{k}'(\mathbf{r} - \mathbf{v} t)] \quad [6.5.7]$$

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar \mathbf{k}_0}{m} \quad [6.5.8]$$

Nótese que la integral en [6.5.7] está esencialmente extendida al dominio ($\mathbf{k}' = k'_x, k'_y, k'_z$)

$$|k'_x| < \Delta k_x, \quad |k'_y| < \Delta k_y, \quad |k'_z| < \Delta k_z \quad [6.5.9]$$

[6.5.6] muestra que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ es, aproximadamente, el producto de una onda plana, $\exp i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - 2\pi\nu_0 t)$ multiplicada por otra función $G(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)$, que llamaremos «factor de modulación». Las características más interesantes de $G(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)$, en todo instante t para el que es válida la aproximación [6.5.6], son las siguientes:

1. Dado t , G adquiere su módulo máximo si

$$\mathbf{r} = \mathbf{v}t = \mathbf{r}_{\text{cg}}(t) = [x_{\text{cg}}(t), y_{\text{cg}}(t), z_{\text{cg}}(t)] \quad [6.5.10]$$

En efecto, en tal caso, la exponencial en [6.5.7] se reduce a la unidad y no hay interferencias (es decir, cancelaciones entre cantidades positivas y negativas) que reduzcan el valor de la integral con integrando no negativo en [6.5.7]. Los vectores $\mathbf{r}_{\text{cg}}(t)$ y \mathbf{v} dados en [6.5.10] y [6.5.8] se denominan centro del paquete (o del grupo de ondas) y velocidad de grupo, respectivamente. Recuérdesse la ecuación [3.3.9]².

2. Dado t , G toma valores apreciables en los puntos $\mathbf{r} = (x, y, z)$ tales que

$$|x - x_{\text{cg}}(t)| < \Delta x, \quad |y - y_{\text{cg}}(t)| < \Delta y, \quad |z - z_{\text{cg}}(t)| < \Delta z \quad [6.5.11]$$

donde las cantidades Δx , Δy , Δz cumplen

$$\Delta x \Delta k_x \sim 1, \quad \Delta y \Delta k_y \sim 1, \quad \Delta z \Delta k_z \sim 1 \quad [6.5.12]$$

Dado que k'_x , k'_y y k'_z varían en las regiones indicadas en [6.5.9], si x , y , z lo hacen en las caracterizadas mediante [6.5.11] y [6.5.12], entonces $\exp i\mathbf{k}'(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)$ no tiene oscilaciones apreciables. En todo caso, éstas no implican cambios de signo en la parte real de dicha exponencial. Por tanto, no hay cancelaciones importantes entre cantidades positivas y negativas al realizar la integral [6.5.7], y esta última tiene un valor absoluto que no es drásticamente inferior al máximo, considerado en 1.

3. Dado t , G es muy pequeño o despreciable en los puntos $\mathbf{r} = (x, y, z)$ tales que, al menos, una de las componentes no verifica la correspondiente condición dada en [6.5.11]. En efecto, al ser violada al menos una de las restricciones [6.5.11] por la correspondiente componente de \mathbf{r} , entonces $\exp i\mathbf{k}'(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)$ sí tiene oscilaciones importantes y sus partes real e imaginaria tienen cambios de signo al variar \mathbf{k}' en el dominio de integración [6.5.9]. Entonces, hay interferencias destructivas y cancelaciones importantes en la integral [6.5.7], y la magnitud o valor absoluto de ésta es muy inferior el valor que toma en el máximo.

El paquete [6.3.3] o [6.5.6] ilustra, incluso en el caso simple de una partícula no sometida a interacción, situaciones físicas nuevas en el dominio microscópico, que no aparecen

² También puede decirse que el centro del paquete se ha obtenido anulando las tres derivadas de la fase $\mathbf{k}\mathbf{r} - 2\pi\nu t$ en el lado derecho de [6.3.3] respecto a las tres componentes de \mathbf{k} . Este procedimiento se conoce genéricamente como método de la fase estacionaria, y será utilizado posteriormente en las secciones 9.4 y 18.6.

Ecuación de Schrödinger e introducción a la interpretación probabilística

en el caso macroscópico. De hecho, tales situaciones ya estaban implícitamente anunciadas por el principio de superposición en Mecánica Cuántica. Así, la energía de la partícula a la cual va asociado el paquete [6.3.3] o [6.5.6] no está determinada ahora, sino que toma una serie de valores

$$h\nu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx E_0 + \frac{\hbar^2 k' k_0}{m} \quad , \quad E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \quad [6.5.13]$$

en torno a E_0 , al variar k' . Por otra parte, el momento de la partícula tampoco está determinado, sino que varía según

$$\hbar k \approx \hbar k_0 + \hbar k' = p_0 + \hbar k' \quad [6.5.14]$$

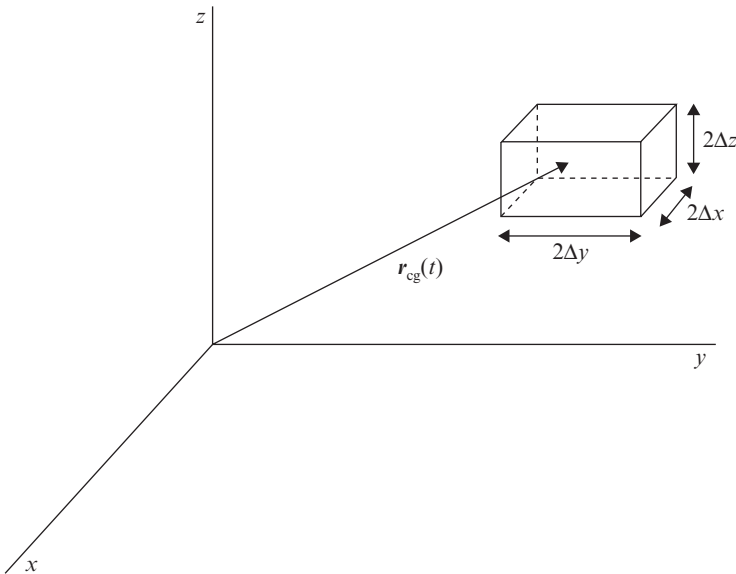


Figura 6.4. En el instante t , el centro del paquete está en $r_{cg}(t)$, y el factor de modulación [6.5.7] es apreciable dentro del paralelepípedo indicado (correspondiente a [6.5.11]), siendo despreciable fuera de él.

en torno a p_0 al variar k' . Esta situación es más general que la correspondiente a [6.2.11], en que la energía y el momento de la partícula sí estaban determinados.

Las relaciones [6.5.12] tienen una importancia fundamental: de hecho, son similares a las que han aparecido en el capítulo 3. [6.5.2-3] y [6.5.11-12] deben entenderse y utilizarse como relaciones aproximadas válidas solamente en orden de magnitud, es decir, en un sentido cualitativo o, a lo sumo, semicuantitativo. Una forma más cuantitativa de [6.5.12] (en forma de desigualdades) se verá en el capítulo siguiente.

Nótese que [6.5.10] es similar a una ley de movimiento de una partícula macroscópica. Específicamente, [6.5.10] y [6.5.8] muestran que el centro del paquete sigue una ecuación clásica de movimiento rectilíneo y uniforme, con una velocidad igual a la velocidad de grupo, que es precisamente p_0/m .

Para todo t tal que la aproximación [6.5.6] es válida, el paquete no cambia de forma ni de tamaño como consecuencia inmediata de los resultados 1, 2 y 3: únicamente tiene el movimiento rectilíneo y uniforme descrito por [6.5.10]. Insistiremos en que, con seguridad, [6.5.6] *no* es válida para todo tiempo. En efecto, puede justificarse que el término

$$\frac{\hbar}{4\pi m} k'^2$$

omitido en [6.5.5], tiene influencia si $|t|$ es suficientemente grande. Al tener en cuenta dicho término, el paquete se ensancha para tiempos grandes, según puede justificarse. Para un estudio cuantitativo y detallado de este ensanchamiento de paquetes libres, remitimos al lector al capítulo 9 y a las notas 3 y 4.^{3,4}

6.6. INTERPRETACIÓN PROBABILÍSTICA DE LA FUNCIÓN DE ONDA

Sea una partícula microscópica libre o sometida a un potencial general, $V(\mathbf{r}, t)$. ¿Cuál es el significado físico de su función de onda? Recuerdese que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ tiene parte real [$\text{Re } \Psi(\mathbf{r}, t)$] e imaginaria [$\text{Im } \Psi(\mathbf{r}, t)$], es decir,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \text{Re } \Psi(\mathbf{r}, t) + i \text{Im } \Psi(\mathbf{r}, t) \quad [6.6.1]$$

Dado que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ va asociada a la partícula, parece físicamente natural que, en cada instante t , la magnitud de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ [es decir, las de $|\text{Re } \Psi(\mathbf{r}, t)|$ e $|\text{Im } \Psi(\mathbf{r}, t)|$]:

- i) Será apreciable en un entorno de la partícula.
- ii) Tenderá a cero en zonas cada vez más alejadas de aquélla.

Una medida de la magnitud de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en el punto \mathbf{r} en el instante t viene dada por su módulo cuadrado

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\text{Re } \Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + |\text{Im } \Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad [6.6.2]$$

la cual es no negativa. También parece razonable aceptar que la magnitud de Ψ en un dominio finito R o en todo el espacio tridimensional viene dada por la integral de [6.6.2]

³ A. Galindo y P. Pascual, *Mecánica Cuántica*, vol. 1. Eudema Universidad, Madrid, 1989.

⁴ F. J. Ynduráin, *Mecánica Cuántica*. Alianza Universidad Textos, Madrid, 1988.

Ecuación de Schrödinger e introducción a la interpretación probabilística

en dichas regiones, respectivamente. Haremos la hipótesis de que, en cada t , la integral de $|\Psi|^2$ extendida a todo el espacio tridimensional es finita (es decir, Ψ es de cuadrado integrable):

$$N = \int d^3\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 < +\infty \quad [6.6.3]$$

Siguiendo a M. Born se atribuye el siguiente significado físico a Ψ . Sea $d^3\mathbf{r}$ un pequeño elemento de volumen en torno a \mathbf{r} . Se aceptan como postulados que:

a)
$$\frac{1}{N} d^3\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad [6.6.4]$$

es la probabilidad de encontrar a la partícula en el volumen $d^3\mathbf{r}$ en torno a \mathbf{r} en el instante t (véase figura 6.5).

b) La probabilidad de que la partícula se encuentre en la región R en el instante t es

$$\frac{1}{N} \int_R d^3\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad [6.6.5]$$

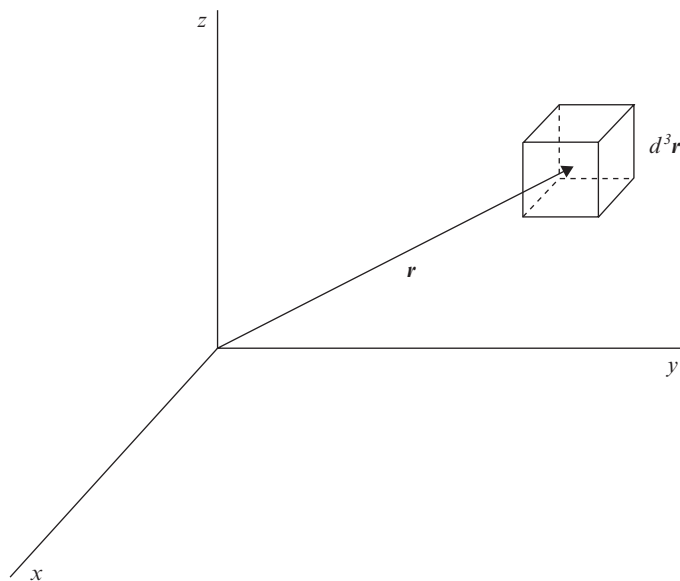


Figura 6.5. La probabilidad de que en el instante t la partícula microscópica se encuentre en $d^3\mathbf{r}$ viene dada, en términos de $\Psi(\mathbf{r}, t)$, por [6.6.4].

(es decir, es la medida de la magnitud de Ψ en R relativa a su magnitud, N , en todo el espacio)⁵.

Como, en el instante t , la partícula ha de estar en algún lugar del espacio, la suma de todas las probabilidades de encontrarla en cualquier punto debe ser la certeza, que tomamos igual a la unidad. Veremos que [6.6.4-5] satisfacen este requisito de consistencia. En efecto, si R coincide con todo el espacio tridimensional, [6.6.5] implica:

$$\frac{1}{N} \int d^3\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \frac{N}{N} = 1 \quad [6.6.6]$$

Al correlacionar la magnitud de Ψ (es decir, $|\Psi|^2$) con la presencia de la partícula, esta interpretación tiene un marcado carácter corpuscular y, a la vez, refuerza la dualidad onda-corpúsculo. De acuerdo con esta interpretación, las ondas de materia son ondas de probabilidad. La ecuación de Schrödinger y la interpretación probabilística constituyen la base de la Mecánica de las partículas microscópicas, o Mecánica Cuántica, de la misma forma que las leyes de Newton son el fundamento de la Mecánica Clásica, de los cuerpos macroscópicos.

Una onda plana tal como [6.2.11] *no* satisface [6.6.3], pues $N = +\infty!$. Así pues, la interpretación probabilística expuesta mediante [6.6.4-5] no es estrictamente aplicable a una onda plana, pero sí lo es a paquetes del tipo [6.3.3], a condición de que la función $A(\mathbf{k})$ sea tal que [6.6.3] se cumpla.

La interpretación probabilística de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ es consistente, claramente, con las consecuencias del estudio realizado en 6.5 sobre un paquete de ondas libre. Así, es natural pensar que la partícula tiene:

- i) Mayor posibilidad de encontrarse, en t , en el dominio caracterizado en [6.5.11], donde es grande o apreciable el factor de modulación [6.5.7] (es decir, la magnitud de Ψ).
- ii) Pequeña posibilidad de estar fuera de dicho dominio (donde el factor de modulación y la magnitud de Ψ son muy pequeños).

Por otra parte, decir que la partícula tiene mayor o menor posibilidad de estar en una región en un cierto instante induce a pensar que es más o menos *probable* encontrarla ahí y entonces, es decir, a introducir conceptos probabilísticos. Una explicación algo más detallada del concepto de probabilidad utilizado en los postulados *a*), *b*) y algunos comentarios adicionales se ofrecen en la sección 6.9.

Para Born y la mayoría de los físicos, la probabilidad microscópica inherente a la función de onda, así como esta última, no son meramente nociones matemáticas que re-

⁵ Esta interpretación está inspirada en la de Einstein para fotones (específicamente, para el número promedio de éstos por unidad de volumen y para la probabilidad de detección de un fotón), expuesta en la sección 3.2. No obstante, volveremos a analizar la interpretación probabilística para fotones en la sección 15.7.

flejan un conocimiento (incompleto) que un observador posee respecto a la partícula, sino que tienen realidad física. Más aún, la gran mayoría de los físicos (aunque con algunas excepciones) acepta que la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ contiene toda la información física que es posible obtener acerca de la partícula microscópica en el instante t . Por esa razón, también se dice con frecuencia, y así se hará en otras partes de este libro, que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ es o representa el estado de la partícula en t . Los científicos discrepantes de estas ideas han dado lugar a un debate, iniciado ya en la época de creación de la Mecánica Cuántica, que ha llevado a profundizar y clarificar los aspectos más básicos de ésta. Este debate, aún no concluido, ha conducido también a realizar numerosos experimentos cuyos resultados están, en general, en muy buen acuerdo con las predicciones de la Mecánica Cuántica. Un resumen de buena parte de esos experimentos se ofrecerá en los Apéndices E, F y G. La sección 6.9 presentará una discusión complementaria.

Una reflexión, a posteriori: ¿por qué ha desempeñado el módulo cuadrado de Ψ un papel tan privilegiado en [6.6.4-5]?, ¿y si se hubiera utilizado otra medida de la magnitud de Ψ , por ejemplo, $|\Psi|$, en vez de $|\Psi|^2$? En las secciones 6.7 y 6.8 veremos que la probabilidad de presencia de la partícula se esparce y propaga en el espacio, a lo largo del tiempo, de una forma físicamente muy natural, y que tal interpretación se refuerza y garantiza, precisamente, gracias a que dicha probabilidad se expresa en términos de $|\Psi|^2$.

Es interesante recordar que, históricamente, M. Born vio apoyada y reforzada su interpretación probabilística al aplicarla al análisis de experimentos de dispersión de partículas microscópicas (específicamente, dispersiones de electrones por átomos). Con un propósito pedagógico similar, se ofrecerá una introducción elemental al fenómeno de la dispersión en Mecánica Cuántica en el capítulo 18.

6.7. IMAGEN HIDRODINÁMICA: CORRIENTE DE PROBABILIDAD Y ECUACIÓN DE CONTINUIDAD

Antes de tratar la propagación de la probabilidad será muy útil mencionar algunos conceptos elementales de Física Clásica (hidrodinámica) relativos a la evolución de un fluido (por ejemplo, agua) en movimiento.

Sea $\rho(\mathbf{r}, t)d^3\mathbf{r}$ la cantidad de masa del fluido contenida en un pequeño elemento de volumen $d^3\mathbf{r}$ en torno a \mathbf{r} , en el instante t (ρ es la densidad). Sea R un cierto volumen, limitado por la superficie S , en el interior del fluido (véase figura 6.6). La variación de la masa de este último contenida en R entre dos instantes muy próximos t y $t + dt$ es

$$\int_R d^3\mathbf{r}[\rho(\mathbf{r}, t + dt) - \rho(\mathbf{r}, t)] = \left\{ \int_R d^3\mathbf{r} \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right\} dt \quad [6.7.1]$$

Dicha variación solamente puede ser debida a que la cantidad de fluido que sale de R a través de S es distinta de la que entra. Existe un vector $\mathbf{j} = \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$, denominado densidad de corriente del fluido, tal que su flujo a través de S , es decir,

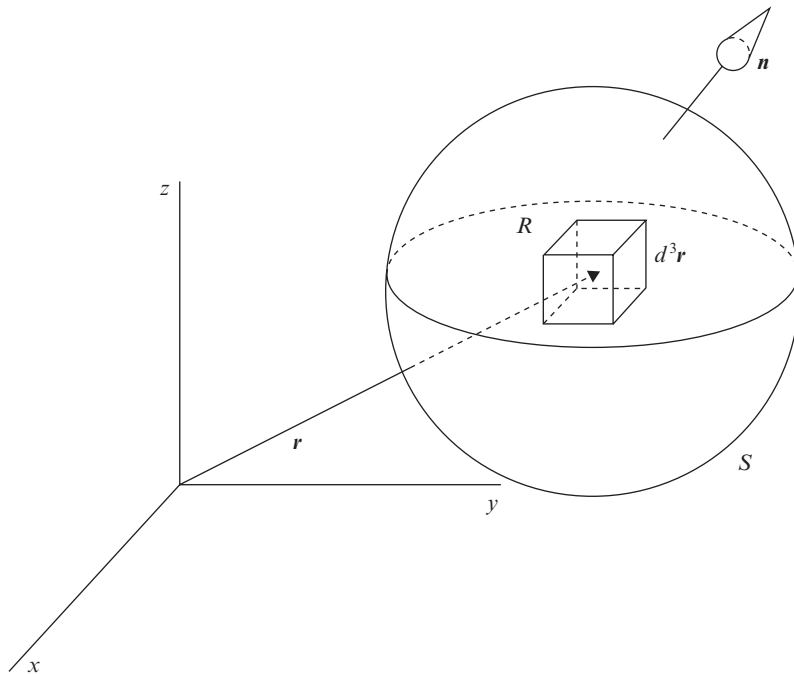


Figura 6.6. R es un volumen limitado por la superficie S . \mathbf{n} es el vector unitario normal y exterior a S ($|\mathbf{n}| = 1$).

$$\oint_S ds \mathbf{n} \mathbf{j} \quad [6.7.2]$$

da la cantidad neta de fluido (la que sale menos la que entra) que atraviesa S por unidad de tiempo. \mathbf{n} representa el vector unitario normal y exterior a S ($|\mathbf{n}| = 1$). Por tanto, se tiene

$$\int_R d^3\mathbf{r} \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\oint_S ds \mathbf{n} \mathbf{j} = -\int_R d^3\mathbf{r} \nabla \mathbf{j} \quad [6.7.3]$$

En [6.7.3] se ha utilizado también el teorema de Gauss para transformar la integral de superficie en una de volumen. Suponiendo que R es infinitesimal (es decir, se reduce a $d^3\mathbf{r}$), se obtiene la ecuación de continuidad del fluido

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \mathbf{j} \quad [6.7.4]$$

Ecuación de Schrödinger e introducción a la interpretación probabilística

(∇ viene dado en [6.4.3]). [6.7.4] expresa la conservación de la cantidad de materia del fluido. Conceptos y ecuaciones análogos son aplicables a la distribución de carga y corriente eléctricas en un conductor metálico.

Volvamos a la partícula microscópica en un potencial $V(\mathbf{r}, t)$ y estudiemos la propagación de su probabilidad en el espacio a lo largo del tiempo utilizando los conceptos acerca de fluidos que acabamos de ver. Continuamos aceptando la validez de [6.6.3] en cada instante. Para ello, consideramos la compleja conjugada $\Psi^*(\mathbf{r}, t) = \text{Re } \Psi(\mathbf{r}, t) - i \text{Im } \Psi(\mathbf{r}, t)$ de la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, que satisface la ecuación compleja conjugada de [6.4.9]:

$$-\frac{\hbar}{2m} \Delta \Psi^*(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad [6.7.5]$$

(el potencial $V(\mathbf{r}, t)$ es real, por hipótesis).

Estudiaremos la variación temporal de $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$. Se tiene (no haciendo explícita la dependencia en \mathbf{r}, t por brevedad):

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial (\Psi^* \Psi)}{\partial t} = \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) \Psi + \Psi^* \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) = \frac{i\hbar}{2m} [\Psi^*(\Delta \Psi) - \Psi(\Delta \Psi^*)] \quad [6.7.6]$$

tras, haber hecho uso de las [6.4.9] y [6.7.5] y haber cancelado los términos que llevan V . Introduciremos el vector densidad de corriente de probabilidad (¡con toda razón, como [6.7.9], mostrará!)

$$\begin{aligned} \mathbf{J} = \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \frac{i\hbar}{2m} [\Psi(\mathbf{r}, t)(\nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)) - \Psi^*(\mathbf{r}, t)(\nabla \Psi(\mathbf{r}, t))] = \\ &= \frac{\hbar}{2m} \text{Re} \left[\frac{1}{i} \Psi^*(\mathbf{r}, t)(\nabla \Psi(\mathbf{r}, t)) \right] \end{aligned} \quad [6.7.7]$$

Tomando la divergencia de \mathbf{J} (usando [6.4.3]) y cancelando términos, se obtiene:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m} [\Psi(\Delta \Psi^*) - \Psi^*(\Delta \Psi)] \quad [6.7.8]$$

La comparación entre [6.7.6] y [6.7.8] implica

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad [6.7.9]$$

que tiene la estructura de una ecuación de continuidad análoga a [6.7.4] y en la que $|\Psi|^2$ hace las veces de densidad. Integrando en el volumen R limitado por la superficie S (véase figura 6.6) y utilizando el teorema de Gauss como en [6.7.3], la ecuación [6.7.9] implica

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_R d^3\mathbf{r} |\Psi|^2 = - \oint_S ds n \mathbf{J} \quad [6.7.10]$$

siendo \mathbf{n} el vector unitario normal hacia el exterior de R . [6.7.10] es análoga a [6.7.3]: la probabilidad se propaga como un fluido, por tanto. Completaremos la interpretación física de la imagen hidrodinámica de la probabilidad en la sección siguiente después de presentar una importante simplificación: la normalización de Ψ .

6.8. NORMALIZACIÓN DE LA FUNCIÓN DE ONDA

Supongamos que el volumen R coincide con todo el espacio tridimensional, con lo cual S puede asimilarse a una superficie (por ejemplo, esférica) a distancia infinita en todas las direcciones. Diremos que S es la superficie del infinito. Puesto que, por hipótesis, [6.6.3] se verifica, es necesario que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ tienda a cero si $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ en todas las direcciones del espacio para t fijo. En consecuencia, $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$, dada por [6.7.7], tiende a cero si $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ en todas las direcciones para t fijo, y, además, de forma tal que si S es, ahora, la superficie del infinito, se tiene:

$$\oint_S ds n \mathbf{J} \rightarrow 0 \quad [6.8.1]$$

La justificación de [6.8.1] constituye el ejercicio 6.6. En tal caso, R coincide con todo el espacio tridimensional y [6.7.10] se convierte en

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3\mathbf{r} |\Psi|^2 = 0 \quad [6.8.2]$$

Por tanto, la constante *finita* N (véase [6.6.2-3]) es independiente de t . La consecuencia interesante es que si suponemos que, en $t = t_0$, $N = 1$, entonces el valor de N también es igual a 1 en cualquier otro instante $t \neq t_0$. Se dice, entonces, que la función de onda está normalizada. Supongamos que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ no está normalizada, es decir, N es finito pero diferente de la unidad: entonces se dice que Ψ es normalizable. Es muy simple hallar una nueva función de onda $\Psi'(\mathbf{r}, t)$, que tiene la misma interpretación física (es decir, describe las mismas probabilidades) que Ψ y que está normalizada:

$$\int d^3\mathbf{r} |\Psi'(\mathbf{r}, t)|^2 = 1 \quad [6.8.3]$$

en cualquier t . En efecto, basta hacer

$$\Psi'(\mathbf{r}, t) = \lambda \Psi(\mathbf{r}, t) \quad [6.8.4]$$

siendo λ una constante independiente de \mathbf{r} , t . Al sustituir [6.8.4] en [6.8.3], se obtiene la condición que determina el módulo de λ :

$$|\lambda| = \frac{1}{\left| \int d^3\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right|^{1/2}} \quad [6.8.5]$$

Nótese que la fase de λ no está determinada y continúa siendo arbitraria. En lo que sigue, y salvo indicación de lo contrario, supondremos que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ está normalizada (para todo t)

$$\int d^3\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1 \quad [6.8.6]$$

por tanto, utilizaremos los postulados:

- a) ([6.6.4]).
- b) ([6.6.5]) con $N = 1$.

Diremos entonces que $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ es la densidad de probabilidad de que la partícula esté en $d^3\mathbf{r}$ en torno a \mathbf{r} , en t . Véase la figura 7.1.

La interpretación física de [6.7.9] y [6.7.10] es, ahora, transparente. La probabilidad de presencia de la partícula se propaga y esparce por el espacio a lo largo del tiempo de forma similar a como lo hace la materia en un fluido.

$\oint_S ds \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}$ es el flujo *neto* de probabilidad (la que sale menos la que entra) en el volumen R a través de S por unidad de tiempo. El aumento o disminución de probabilidad en R se debe únicamente a que hay un flujo neto de probabilidad a través de S . La probabilidad total de encontrar la partícula en todo el espacio tridimensional se mantiene constante y es igual a la unidad (la certeza): ¡no hay flujo de probabilidad a través de la superficie del infinito!

Una importante aplicación de la corriente de probabilidad a la dispersión de una partícula microscópica por un potencial se verá en el capítulo 18.

A posteriori, apreciamos la importancia física de que la magnitud de la función de onda y, así, la probabilidad vengan dadas por $|\Psi|^2$ (¡y *no* por otra función diferente de $|\Psi|$!): la propagación de la probabilidad (expresada mediante [6.7.9-10]) obedece a una ecuación de continuidad con una interpretación física muy natural (que serían muy complicadas o, quizá, incluso, inexistentes en caso de haber procedido de otra manera).

6.9. PROBABILIDAD DE ENCONTRAR LA PARTÍCULA: EXPLICACIÓN MEDIANTE COPIAS IDÉNTICAS DEL SISTEMA

Recuérdese que nuestro sistema físico (SF) bajo estudio consiste en una partícula microscópica, con función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ normalizada, que se mueve en una región tridi-

mensional grande (idealmente, en todo el espacio). Pues bien, imaginemos un gran número, n , de copias *idénticas* de SF . Por hipótesis, no hay interacción entre unas copias y otras, que son como mundos distintos y separados unos de otros: cada copia contiene una sola partícula (todas del mismo tipo) sometida al mismo potencial y con la misma función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ asociada. De otra forma, diremos que todas las copias han sido «preparadas» del mismo modo. Imaginemos, en cada copia: i) un punto \mathbf{r} (con las mismas coordenadas en todas las copias); ii) un elemento de volumen $d^3\mathbf{r}$ en torno a él (idéntico en todas), y iii) experimentos *idealizados* en los que un aparato detector (análogo en todas las copias) mide si la partícula relativa a esa copia se encuentra en ese $d^3\mathbf{r}$, en el instante t (a la vez, en todas). Véase la figura 6.7.

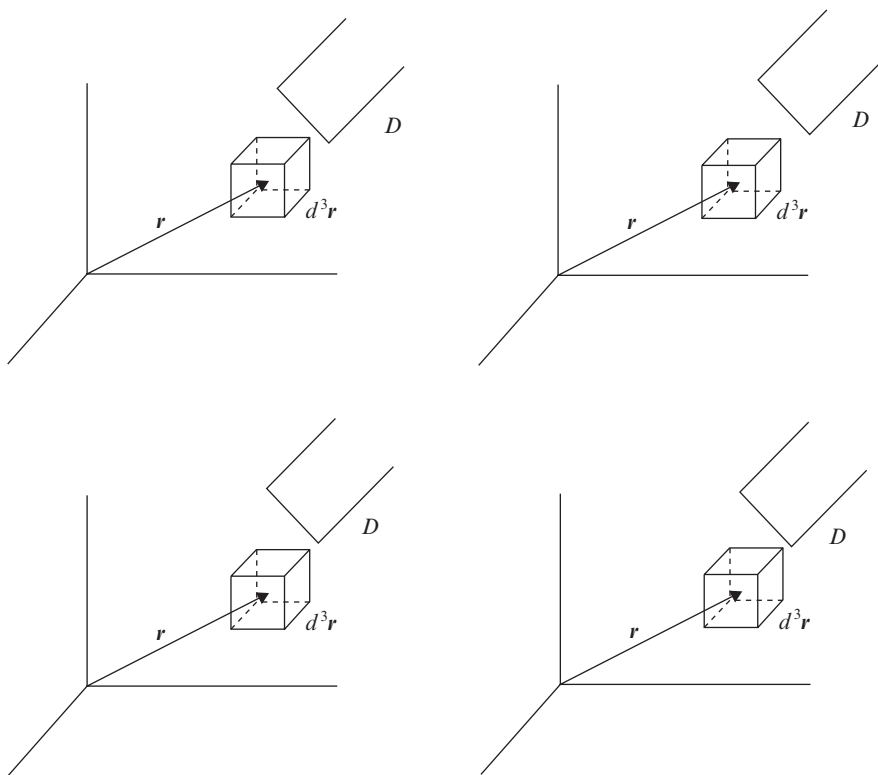


Figura 6.7. El sistema físico consiste en una partícula microscópica sometida a un potencial. En $n(=4)$ copias idénticas de dicho sistema, aparatos (D) análogos miden si la partícula en cada copia se encuentra, en el instante t , en el elemento $d^3\mathbf{r}$ en torno al punto \mathbf{r} y $d^3\mathbf{r}$ similares en todas las copias).

Sea $n(\mathbf{r}, t)$ el número de copias en cada una de las cuales el correspondiente aparato ha detectado que, en t , la partícula sí se encontraba en $d^3\mathbf{r}$ [siendo $n - n(\mathbf{r}, t)$ el número de copias en las que el intento de detección ha dado un resultado negativo]. El cociente

$n(\mathbf{r}, t)/n$, cuando el número total de copias n tiende a infinito, es la probabilidad de que la partícula se encuentre, en t , en el elemento $d^3\mathbf{r}$ en torno a \mathbf{r} ⁶. El postulado a) de la sección 6.6 se interpreta así:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n(\mathbf{r}, t)}{n} = d^3\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad [6.9.1]$$

y, análogamente, para el postulado b).

Formularemos algunas cuestiones y discutiremos sus respuestas. ¿Da la función de onda una descripción meramente estadística del conjunto de copias idénticas? ¿Da además, una descripción de cada partícula microscópica individual? ¿Es posible obtener información adicional sobre una partícula microscópica además de la contenida en la función de onda? El conjunto de experimentos realizados hasta el presente (de los que se ofrecerá un resumen en los apéndices E, F y G) da una respuesta a la tercera cuestión: la función de onda contiene toda la información que es posible obtener experimentalmente acerca de un sistema microscópico. Así, además, se contesta afirmativamente a la primera cuestión, pues la función de onda proporciona también información completa y exhaustiva del conjunto de copias idénticas. Más aún, basándose en ese hecho, y de forma más o menos explícita, parte de los físicos ha dado un paso más (que, en rigor, no es estrictamente necesario y, de hecho, representa una postura más bien filosófica), dando una respuesta a la segunda cuestión: acepta que la función de onda describe una partícula o sistema microscópico individual (es decir, cada una de las del conjunto de copias, por separado) y da la máxima información posible acerca de aquella o aquél⁷. Pero no hay consenso respecto a qué respuesta dar (o a qué se pueda dar) a la segunda cuestión. Véase el apartado F.7, en el apéndice F.

EJERCICIOS

6.1. Supóngase que $p'_1(\mathbf{r}, t)$ y $p'_2(\mathbf{r}, t)$ satisfacen, separadamente, la ecuación [6.1.1]. Compruébese que [6.1.6] también la verifica.

6.2. Compruébese que no hay ninguna ecuación de ondas del tipo [6.2.10] (siendo b , b_0 , b_1 y b_2 constantes independientes de λ y no siendo todas nulas) cuya solución sea [6.2.8] o [6.2.9] con a distinta de cero.

⁶ Esta noción de probabilidad coincide con la que la Estadística nos enseña. En efecto, dicha probabilidad es el número de «casos favorables» (aquellos en los que hay detección), dividido entre el de «los posibles» (es decir, el número total, n).

⁷ Al hacer esta afirmación, solamente nos referimos al caso de la Mecánica Cuántica no-relativista, es decir, a partículas microscópicas cuyas velocidades son pequeñas frente a la de la luz. Una cuestión análoga para situaciones relativistas, con creación y aniquilación de partículas, podría ser mucho más debatida y requeriría una discusión más amplia, que excede ampliamente el nivel de este libro.

- 6.3.** Compruébese que [6.3.3] satisface [6.2.15].
- 6.4.** Sean Ψ_1, Ψ_2 soluciones de [6.4.9]. Compruébese que [6.3.1], donde λ_1, λ_2 son constantes complejas independientes de r, t , satisface también [6.4.9].
- 6.5.** Obtener las ecuaciones de Schrödinger para una partícula microscópica no-relativista en una y dos dimensiones espaciales, sometida a un potencial.
- 6.6.** Suponiendo que $\Psi(r, t)$ satisface [6.6.3], justifíquese [6.8.1] (cuando S es la superficie del infinito).
- 6.7.** Para una partícula microscópica no-relativista en una dimensión espacial sometida a un potencial, obténganse la densidad de corriente de probabilidad J y la correspondiente ecuación de continuidad.
- 6.8.** En diversas áreas de la Física Clásica (Teoría Cinética de los Gases y Mecánica Estadística Clásica) aparecen probabilidades (siempre positivas), las cuales tienen la propiedad de *aditividad*, en el sentido siguiente. Supóngase un sistema clásico que puede estar en la situación o estado a con probabilidad P_a o en la b , con probabilidad P_b . Pues bien, la probabilidad conjunta de que dicho sistema pueda estar en cualquiera de las situaciones a o b es $P_a + P_b$. ¿Es válida una propiedad de aditividad similar para la probabilidad asociada a una partícula microscópica y caracterizada en las secciones 6.6 y 6.9? Compárese con la sección 3.2.

7

Desarrollo de la interpretación probabilística

Ramón F. Álvarez-Estrada

7.1. PARTÍCULA MACROSCÓPICA EN MECÁNICA CLÁSICA: REVISIÓN DE ALGUNAS PROPIEDADES GENERALES

Recordemos algunos aspectos generales del movimiento de una partícula no-relativista *macroscópica* de masa m en Mecánica Clásica, sometida a un potencial exterior $V(\mathbf{r}_{cl}, t)$. Aquí, \mathbf{r}_{cl} es una posible posición de dicha partícula. En cada instante t , ésta, por moverse según las leyes de la Mecánica Clásica, tiene un vector posición:

$$\mathbf{r}_{cl}(t) = (x_{cl}(t), y_{cl}(t), z_{cl}(t)) \quad [7.1.1]$$

y un vector momento:

$$\mathbf{p}_{cl}(t) = (p_{cl,x}(t), p_{cl,y}(t), p_{cl,z}(t)) \quad [7.1.2]$$

completamente determinados. La energía total de la partícula, suma de la cinética ($\mathbf{p}_{cl}^2/2m$) y del potencial, es:

$$H_{cl}[\mathbf{p}_{cl}, \mathbf{r}_{cl}, t] = \frac{\mathbf{p}_{cl}^2}{2m} + V(\mathbf{r}_{cl}, t) \quad [7.1.3]$$

que también recibe el nombre de hamiltoniano clásico. [7.1.1] y [7.1.2] son soluciones [con condiciones iniciales $\mathbf{r}_{cl}(t_0)$ y $\mathbf{p}_{cl}(t_0)$ en el instante inicial t_0] de las llamadas ecuaciones de Hamilton:

$$\frac{d\mathbf{r}_{cl}}{dt} = \nabla_{\mathbf{p}_{cl}} H_{cl}[\mathbf{p}_{cl}, \mathbf{r}_{cl}, t], \quad \frac{d\mathbf{p}_{cl}}{dt} = -\nabla_{\mathbf{r}_{cl}} H_{cl}[\mathbf{p}_{cl}, \mathbf{r}_{cl}, t] \quad [7.1.4]$$

donde $\nabla_{\mathbf{p}_{cl}}$ y $\nabla_{\mathbf{r}_{cl}}$ representan los gradientes respecto a \mathbf{p}_{cl} y \mathbf{r}_{cl} , respectivamente. En componentes, [7.1.4] equivale a

$$\frac{dx_{cl}}{dt} = \frac{\partial H_{cl}[\mathbf{p}_{cl}, \mathbf{r}_{cl}, t]}{\partial p_{cl,x}} = \frac{p_{cl,x}}{m} \quad [7.1.5]$$

$$\frac{dp_{cl,x}}{dt} = -\frac{\partial H_{cl}[\mathbf{p}_{cl}, \mathbf{r}_{cl}, t]}{\partial x_{cl}} = -\frac{\partial V(\mathbf{r}_{cl}, t)}{\partial x_{cl}} \quad [7.1.6]$$

y análogamente para dy_{cl}/dt , dz_{cl}/dt , $dp_{cl,y}/dt$, $dp_{cl,z}/dt$. La combinación de ambas ecuaciones [7.1.4] implica directamente

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_{cl}}{dt^2} = -\nabla_{\mathbf{r}_{cl}} V(\mathbf{r}_{cl}, t) \quad [7.1.7]$$

que es la ley fundamental de Newton de la Mecánica Clásica: esto justifica, a posteriori y de forma rápida, la validez de [7.1.4]. Por otra parte, si \mathbf{p}_{cl} , \mathbf{r}_{cl} en [7.1.3] se sustituyen por las soluciones $\mathbf{p}_{cl}(t)$, $\mathbf{r}_{cl}(t)$ de [7.1.4], un sencillo cálculo conduce a:

$$\left. \frac{dH_{cl}[\mathbf{p}_{cl}(t), \mathbf{r}_{cl}(t), t]}{dt} \right|_{\mathbf{r}_{cl}=\mathbf{r}_{cl}(t)} = \left. \frac{\partial V(\mathbf{r}_{cl}, t)}{\partial t} \right|_{\mathbf{r}_{cl}=\mathbf{r}_{cl}(t)} \quad [7.1.8]$$

La derivada del lado derecho de [7.1.8] se evalúa como si \mathbf{r}_{cl} no dependiera de t , y, tras ello, se sustituye \mathbf{r}_{cl} por $\mathbf{r}_{cl}(t)$ (solución de [7.1.4]). La justificación de [7.1.8] constituye el ejercicio 7.1. Así pues, si V no depende explícitamente de t ($V = V(\mathbf{r}_{cl})$), se concluye que

$$\frac{dH_{cl}}{dt} = 0, \quad H_{cl}[\mathbf{p}_{cl}(t), \mathbf{r}_{cl}(t)] = \text{constante} \quad [7.1.9]$$

es decir, la energía total es constante a lo largo de cada trayectoria.

7.2. VALORES MEDIOS DE LA POSICIÓN

A lo largo de este capítulo estudiaremos propiedades generales de la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ de una partícula microscópica en un potencial, y supondremos que aquella está normalizada, esto es, la validez de [6.8.6], salvo mención explícita de lo contrario.

Todas las posiciones \mathbf{r} son posibles, en principio, para la partícula microscópica, pero unas son más probables que otras. Consideremos varias posiciones $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$. El valor medio de ellas (en t) es su suma, «pesando» cada una con su correspondiente probabilidad $|\Psi(\mathbf{r}_i, t)|^2 d^3 \mathbf{r}$, es decir, $\sum_{i=1}^n \mathbf{r}_i |\Psi(\mathbf{r}_i, t)|^2 d^3 \mathbf{r}$, de acuerdo con la idea de valor medio que la Estadística nos enseña. El valor medio del vector posición en el instante t es la suma infinita y continua de todos los posibles vectores de posición («pesando» cada uno como acabamos de ver) en todo el espacio tridimensional, esto es, la integral, y se denota por $\langle \mathbf{r} \rangle$:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int d^3 \mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \mathbf{r} = (\langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle z \rangle) \quad [7.2.1]$$

Véase la figura 7.1. En componentes ($\mathbf{r} = (x, y, z)$):

$$\langle x \rangle = \int d^3\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 x \quad [7.2.2]$$

y, análogamente, para $\langle y \rangle$, $\langle z \rangle$.

Recuérdese la interpretación probabilística basada en la detección (en un experimento idealizado) de una partícula en un número muy grande de copias idénticas (sección 6.9). El lector puede reinterpretar $\langle \mathbf{r} \rangle$ como el promedio estadístico de \mathbf{r} en tales detecciones sin más que sustituir $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r}$ en [7.2.1] por el lado izquierdo de [6.9.1].

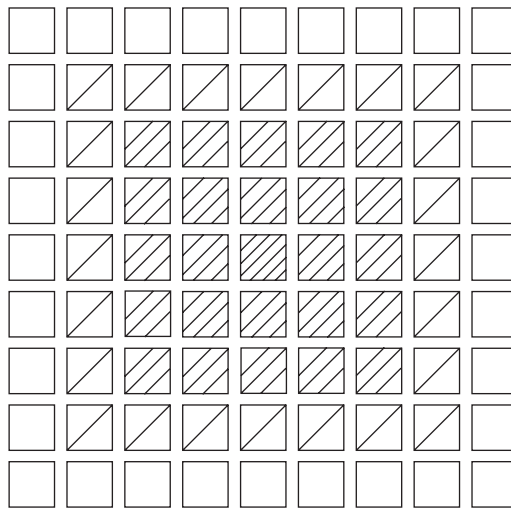


Figura 7.1. Interpretación gráfica de [6.8.6] y de [7.2.1]. Cada cuadrado representa un elemento de volumen ($d^3\mathbf{r}$). La densidad de probabilidad ($|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$) se supone tanto mayor en cada cuadrado cuanto más grande es el número de rayas inclinadas que hay en él, y, por tanto, mayor importancia puede tener (salvo cancelaciones) en [7.2.1].

7.3. EL MOMENTO EN MECÁNICA CUÁNTICA

De la misma forma que diversas posiciones son posibles, es natural aceptar que diferentes valores del momento deben ser también posibles para la *partícula* [recuérdese la discusión en torno a [6.5.14]], siendo, en cada caso, unos más probables que otros. En tal caso, deberá haber, en cada instante, un valor medio para su momento, que representamos por $\langle \mathbf{p} \rangle = (\langle p_x \rangle, \langle p_y \rangle, \langle p_z \rangle)$. A continuación, desarrollaremos un importante argumento que pondrá de manifiesto la fundamental *analogía* entre la evolución de una partícula microscópica y la de una macroscópica, y que conducirá, de forma unívoca, a determinar $\langle \mathbf{p} \rangle$.

Estudiaremos la variación temporal del valor medio de la posición [7.2.1]. Específicamente, nos concentraremos en evaluar $d\langle x \rangle/dt$, estando $\langle x \rangle$ dada en [7.2.2].

El resultado fundamental es:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \int d^3\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad [7.3.1]$$

La justificación de [7.3.1] se da en detalle en la cuestión complementaria 7.1. Es físicamente natural que ha de existir una analogía, en general, entre las leyes clásicas del movimiento para una partícula macroscópica (véase [7.1.4]) y las relaciones que describen la evolución temporal de los *valores medios* para la partícula microscópica. La existencia de esa analogía está confirmada, en particular, por el estudio aproximado del paquete de ondas libre realizado en la sección 6.5. En efecto, imaginemos ese paquete en función de una nueva escala de longitudes en la que la unidad es grande comparada con Δx , Δy y Δz . En tal caso, durante el intervalo temporal en que [6.5.6-7] son válidas, y debido al factor de modulación, el paquete puede sustituirse por una región minúscula (casi puntual) en torno a su centro, es decir, a $\mathbf{r}_{cg}(t)$. El paquete se asemeja así a una partícula macroscópica que se mueve según la ley clásica de movimiento [6.5.10]. Véase la figura 7.2. A la misma conclusión se llegaría si el paquete fuese «visto» por un observador situado a distancias muy grandes de aquél comparadas con Δx , Δy y Δz . Aceptando la validez general de la analogía antes formulada, compararemos la ley clásica [7.1.5] con la ecuación microscópica [7.3.1]: así, $m(d\langle x \rangle/dt)$ es la versión microscópica o cuántica de la magnitud clásica $m(dx_{cl}/dt)$. Es necesario aceptar, entonces, que existe una correspondencia entre los lados derechos de ambas ecuaciones [7.3.1] y [7.1.5], es decir, el análogo cuántico de $p_{cl,x}$ debe ser

$$\int d^3\mathbf{r} \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi$$

Este último ha de ser, por otra parte, el valor medio del momento de la partícula microscópica, es decir, $\langle p_x \rangle$. Un análisis similar es aplicable a $d\langle y \rangle/dt$, $\langle p_y \rangle$, $d\langle z \rangle/dt$, $\langle p_z \rangle$. Así pues, aceptamos que el valor medio del momento, $\langle \mathbf{p} \rangle$, de la partícula microscópica es, en t :

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) [-i\hbar \nabla] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad [7.3.2]$$

Con todo ello, el análogo microscópico de la primera ecuación [7.1.4] es

$$\frac{d\langle \mathbf{r} \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle \mathbf{p} \rangle \quad [7.3.3]$$

Es también natural concluir que la variable dinámica momento de la partícula microscópica se representa por el símbolo $-i\hbar \nabla$ (que también podemos denotar, cuando no pueda haber confusión, por \mathbf{p}). Éste actúa sobre las funciones de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, es decir, es

un operador diferencial. Una propiedad importante: una onda plana tal como [6.2.11] es autofunción del operador momento con autovalor \mathbf{p} (¡que aquí designa un conjunto de tres números, no un operador diferencial!). En efecto:

$$[-i\hbar\nabla] \exp \frac{i}{\hbar} (\mathbf{pr} - Et) = \mathbf{p} \exp \frac{i}{\hbar} (\mathbf{pr} - Et) \quad [7.3.4]$$

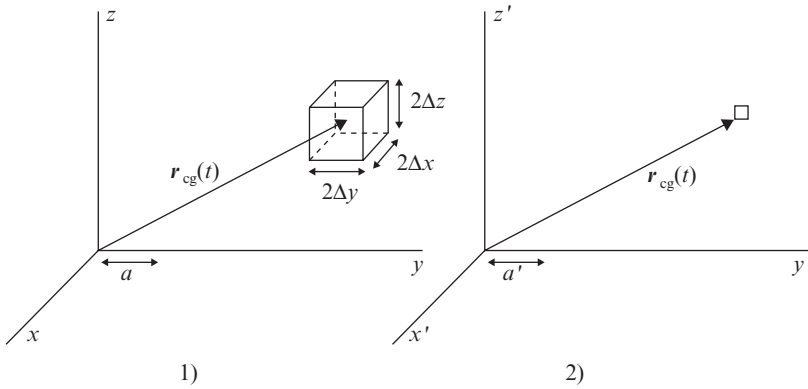


Figura 7.2. 1. Las dimensiones Δx , Δy y Δz del paquete (es decir, de la región en que $|\Psi|$ es apreciablemente distinta de cero) son comparables a la unidad de longitud a en el sistema de referencia x, y, z . 2. En el nuevo sistema de referencia x', y', z' , la unidad de longitud, a' , es mucho mayor que Δx , Δy y Δz y el paquete se puede asimilar a un punto (su centro), cuya ley de movimiento $\mathbf{r}_{cg}(t)$ es la de una partícula clásica.

7.4. CONSISTENCIA DE LA INTERPRETACIÓN

A continuación, estableceremos la consistencia de [7.3.2-3]. Para ello, estudiaremos la variación temporal de $\langle p_x \rangle$ y la compararemos con la del momento en Mecánica Clásica, dada en [7.1.4]. Para concretar, evaluaremos, en el instante t :

$$\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int d^3\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad [7.4.1]$$

El resultado es

$$\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = \int d^3\mathbf{r} |\Psi^*(\mathbf{r}, t)|^2 \left[-\frac{\partial V(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \right] \quad [7.4.2]$$

La justificación de [7.4.2], que es también un resultado fundamental, se da en la cuestión complementaria 7.2. Nótese que el lado derecho de [7.4.2] tiene una estructura simi-

lar a la del valor medio de la posición dada en [7.2.1-2], es decir, puede considerarse como el valor medio de $-(\partial V/\partial x)$. Así pues, reescribimos [7.4.2] como

$$\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \quad [7.4.3]$$

que puede compararse con [7.1.6]. Resultados similares son válidos para $d\langle p_y \rangle/dt$ y $d\langle p_z \rangle/dt$. Conjuntamente, se pueden expresar en:

$$\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = \langle -\nabla V \rangle \quad [7.4.4]$$

que, en términos de valores medios, es análoga a la segunda ecuación clásica [7.1.4]. [7.3.3] y [7.4.4] son conocidas como ecuaciones de Ehrenfest.

7.5. LA ENERGÍA EN MECÁNICA CUÁNTICA

De la misma manera que las posiciones y los momentos de una partícula microscópica no están determinados, cabe imaginar que su energía puede también tomar cualquier valor. Esto ocurre, en efecto, en muchas situaciones, pero no es así en todos los casos, como veremos al introducir los llamados estados estacionarios.

Haremos la hipótesis siguiente: cada t , $V(\mathbf{r}, t)$ y $[\partial V(\mathbf{r}, t)/\partial t]$ son tales que para toda función de onda Ψ normalizada

$$\int d^3\mathbf{r} V(\mathbf{r}, t) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 < +\infty, \quad \int d^3\mathbf{r} \frac{\partial V(\mathbf{r}, t)}{\partial t} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 < +\infty \quad [7.5.1]$$

Un vistazo al hamiltoniano clásico [7.1.3] sugiere lo siguiente. Parece natural que

$$\int d^3\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad [7.5.2]$$

$$\int d^3\mathbf{r} V(\mathbf{r}, t) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad [7.5.3]$$

sean, respectivamente, los valores medios de las energías cinética y potencial. En tal caso, se podría interpretar

$$\int d^3\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left[\frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \langle H \rangle \quad [7.5.4]$$

como el valor medio de la energía total, H , en el instante t , de la partícula microscópica. Asimismo, sería natural representar la variable dinámica de energía total o hamiltoniano cuántico por

$$\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)^2 + V(\mathbf{r}, t) \equiv H \quad [7.5.5]$$

El primer y segundo términos en [7.5.5] serían las variables dinámicas de energía cinética y potencial. La analogía con [7.1.3] es patente. Todas estas conjeturas son correctas, y su justificación viene de la siguiente relación general:

$$\frac{d\langle H \rangle}{dt} = \int d^3\mathbf{r} \left[\frac{\partial V(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right] |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \equiv \left\langle \frac{\partial V}{\partial t} \right\rangle \quad [7.5.6]$$

que es el análogo para la partícula microscópica de la ecuación clásica [7.1.8]. La demostración de [7.5.6] se da en la cuestión complementaria 7.3. En el caso particular de que V no dependa explícitamente del tiempo, $[\partial V(\mathbf{r}, t)/\partial t] = 0$ y, por tanto:

$$\frac{d\langle H \rangle}{dt} = 0 \quad [7.5.7]$$

es decir, $\langle H \rangle$ es constante a lo largo del tiempo. Puede, entonces, afirmarse que H es una constante (cuántica) del movimiento. Estos nuevos resultados son los análogos cuánticos de los clásicos dados en [7.1.9]. Constituyen una nueva prueba de consistencia de la interpretación de H y $\langle H \rangle$ como variable dinámica de energía y su valor medio para la partícula microscópica. Todo ello, junto con [7.4.4], confirman la validez de las correspondencias entre variables clásicas y microscópicas resumidas en la tabla 7.1.

TABLA 7.1

Variables clásicas	Variables cuánticas
r_{cl}	\mathbf{r}
p_{cl}	$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$
$\frac{p_{cl}^2}{2m}$	$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m}$
$H_{cl} = \frac{p_{cl}^2}{2m} + V(r_{cl}, t)$	$H = \frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(\mathbf{r}_{cl}, t)$

H es, así, un operador que actúa sobre funciones de onda. Claramente [6.1.2] y [6.4.3] implican

$$\Delta = \nabla^2 \quad [7.5.8]$$

Utilizando [7.5.8] y [7.5.5], la ecuación de Schrödinger [6.4.9] se puede reescribir simbólicamente así:

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad [7.5.9]$$

7.6. INTERPRETACIÓN PROBABILÍSTICA EN EL ESPACIO DE MOMENTOS

La expresión [7.3.2] para $\langle p \rangle$, aunque ha sido adecuadamente justificada, es formalmente muy diferente de la dada en [7.2.1] para $\langle r \rangle$ (que era, a priori, una noción muy natural, sugerida por la Estadística). ¿Hay alguna otra forma de representar $\langle p \rangle$, equivalente a [7.3.2], que haga parecer a este valor medio tan transparente como [7.2.1] lo es para $\langle r \rangle$? Afortunadamente, la respuesta es afirmativa, como veremos en esta sección. Con ese fin, introduciremos la función de onda de la partícula microscópica en el instante t en el espacio de momentos, $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$, como la transformada de Fourier de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ (la cual está normalizada, por hipótesis):

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t) = \int \frac{d^3\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^{2/3}} \Psi(\mathbf{r}, t) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}/\hbar) \quad [7.6.1]$$

La transformada de Fourier inversa permite obtener $\Psi(\mathbf{r}, t)$ a partir de $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi\hbar)^{2/3}} \tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t) \exp i\mathbf{q}\mathbf{r}/\hbar \quad [7.6.2]$$

La siguiente interpretación probabilística proporciona el significado físico de $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$ y muestra su interés: $|\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)|^2 d^3\mathbf{q}$ es la probabilidad de que, en el instante t , la partícula microscópica tenga su trimomento en un elemento de volumen $d^3\mathbf{q}$ en torno a \mathbf{q} . Se tienen las propiedades siguientes:

$$\int d^3\mathbf{q} |\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)|^2 = 1 \quad [7.6.3]$$

$$\langle p \rangle = \int d^3\mathbf{q} \tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t) \mathbf{q} \tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t) \quad [7.6.4]$$

donde, a su vez, $\langle p \rangle$ viene dado también por [7.3.2]. Las demostraciones de [7.6.3] y [7.6.4] se dan en la cuestión complementaria 7.4. Ambas propiedades, [7.6.3] y [7.6.4], justifican

la interpretación probabilística de $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$. En efecto, [7.6.3] muestra que la suma infinita y continua de todas las probabilidades de que la partícula tenga cualquier momento es la certeza. Por su parte, [7.6.4] expresa el valor medio del momento como la suma infinita y continua de cada posible momento, multiplicado por la correspondiente probabilidad de que la partícula lo tenga. [7.6.3] y [7.6.4] son los análogos, en el espacio de momentos, de [6.8.6] y [7.2.1], respectivamente. Otras propiedades interesantes pueden verse en la cuestión complementaria 7.5.

Sobre la base de la sección 6.9, el lector puede imaginar un gran número (n') de copias idénticas e independientes del mismo sistema: la partícula microscópica en un potencial, representada en todas las copias por $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$. Detectores idénticos (en un experimento idealizado) analizarían en todas las copias si, en el instante t , la partícula tiene momento en $d^3\mathbf{q}$ en torno a \mathbf{q} . Si $n'(\mathbf{q}, t)$ es el número de copias en las que el resultado de la detección es afirmativo, $\lim_{n' \rightarrow \infty} \frac{n'(\mathbf{q}, t)}{n'}$ se identificaría con $|\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)|^2 d^3\mathbf{q}$.

7.7. REGLAS DE CONMUTACIÓN DE POSICIONES Y MOMENTOS

Una partícula macroscópica, sometida a un potencial, evoluciona de acuerdo con las leyes de la Mecánica Clásica [7.1.1-4]. Es una trivialidad afirmar que, en tal caso,

$$x_{cl}(t)p_{cl,x}(t) - p_{cl,x}(t)x_{cl}(t) = 0 \quad [7.7.1]$$

y análogamente si $x_{cl}(t)$ se sustituye por $y_{cl}(t)$ y por $z_{cl}(t)$, y para las demás combinaciones de componentes de la posición y del momento. Sin embargo, en el caso de una partícula microscópica el análogo de [7.7.1] es falso, y la situación es muy distinta, como veremos. En efecto, recordemos que, entonces, el momento p_x se representa por el operador $-i\hbar(\partial/\partial x)$. En tal caso, veamos el efecto de actuar con la combinación $xp_x - p_x x$ (en analogía con el lado izquierdo de [7.7.1]) sobre una función de onda cualquiera $\Psi = \Psi(\mathbf{r}, t)$ (no necesariamente normalizada ni, incluso, solución de [6.4.9]):

$$\begin{aligned} (xp_x - p_x x)\Psi &= \left[x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) x \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = \\ &= (-i\hbar) \left[x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial x}{\partial x} \Psi - x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] = i\hbar \Psi \end{aligned} \quad [7.7.2]$$

puesto que $\partial x / \partial x = 1$. Dado que [7.7.2] es válida para toda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, podemos reescribirla, omitiendo esta última, así:

$$xp_x - p_x x = i\hbar \quad [7.7.3]$$

Se sobreentiende que el sentido completo de la ecuación (simbólica) [7.7.3] corresponde a que ambos miembros de dicha ecuación actúen sobre una función de onda. En este

punto, introduciremos el conmutador de dos variables dinámicas mecano-cuánticas, es decir, dos operadores, A , B (posiciones, momentos, etc.):

$$[A, B] = AB - BA \quad [7.7.4]$$

con lo que [7.7.3] puede reescribirse como

$$[x, p_x] = i\hbar \quad [7.7.5]$$

Es fácil deducir los análogos de [7.7.5] sustituyendo x por y , z y/o, p_x por p_y , p_z . Cálculos similares a [7.7.2] implican:

$$[y, p_y] = i\hbar \quad , \quad [z, p_z] = i\hbar \quad [7.7.6]$$

$$[x, p_y] = [x, p_z] = [y, p_x] = [y, p_z] = [z, p_x] = [z, p_y] = 0 \quad [7.7.7]$$

Además, se tiene

$$[x, y] = [x, z] = [y, z] = [p_x, p_y] = [p_x, p_z] = [p_y, p_z] = 0 \quad [7.7.8]$$

y es trivial comprobar que el conmutador de cualquiera de las variables dinámicas x , y , z , p_x , p_y , p_z , consigo misma es nulo. El significado físico de [7.7.5-8] es crucial: éstas expresan la complementariedad en Mecánica Cuántica (la cual, a su vez, expresa la dualidad onda-corpúsculo; véase la sección 3.6).

Algunas propiedades del conmutador (que serán de utilidad posteriormente) y de comprobación inmediata son las siguientes (A , B , C son operadores y λ_1 , λ_2 son números complejos):

$$[A, B] = -[B, A] \quad [7.7.9]$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad [7.7.10]$$

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C \quad [7.7.11]$$

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C] \quad , \quad [A, A] = 0 \quad [7.7.12]$$

$$[A, \lambda_1] = 0 \quad , \quad [A, \lambda_1 B] = \lambda_1 [A, B] \quad , \quad [A + \lambda_1, B + \lambda_2] = [A, B] \quad [7.7.13]$$

7.8. INCERTIDUMBRES Y RELACIONES DE INCERTIDUMBRE PARA POSICIONES Y MOMENTOS

Si la partícula microscópica [sometida, en general, al potencial $V(\mathbf{r}, t)$] está representada por la función de onda normalizada $\Psi(\mathbf{r}, t)$, y si $\langle \mathbf{r} \rangle = (\langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle z \rangle)$ dado en [7.2.1] es el valor medio del vector posición, ¿cómo caracterizar, en general, el grado de concentración de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en torno a $\langle \mathbf{r} \rangle$?, o bien, ¿cómo medir, en general, el tamaño de la región tridimensio-

nal en torno a $\langle x \rangle$ y en la que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ es apreciablemente diferente de cero en el instante t ? La Estadística nos sugiere cómo: evaluemos $(x - \langle x \rangle)^2$ para cada valor de la componente x , «pesémoslo» con la correspondiente probabilidad $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r}$ (todo lo cual indica cómo se «dispersa» x respecto a $\langle x \rangle$), efectuemos la suma infinita y continua para todo \mathbf{r} (es decir, la integral) y tomemos la raíz cuadrada. Se obtiene, así, lo que en Mecánica Cuántica se denomina la incertidumbre Δx de la componente x de la posición en el instante t (lo cual, en Estadística, correspondería a la noción de desviación cuadrática media):

$$\Delta x = \left[\int d^3\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 (x - \langle x \rangle)^2 \right]^{1/2} \quad [7.8.1]$$

Véase la figura 7.3. En otros términos, $(\Delta x)^2$ es el valor medio de $(x - \langle x \rangle)^2$, y, por tanto, escribiremos

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \quad [7.8.2]$$

Análogamente, las incertidumbres Δy , Δz en las componentes y , z en el instante t son

$$\Delta y = \langle (y - \langle y \rangle)^2 \rangle^{1/2}, \quad \Delta z = \langle (z - \langle z \rangle)^2 \rangle^{1/2} \quad [7.8.3]$$

Es fácil comprobar que

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad [7.8.4]$$

así como relaciones similares para Δy , Δz . La justificación de [7.8.4] se da en el ejercicio 7.2.

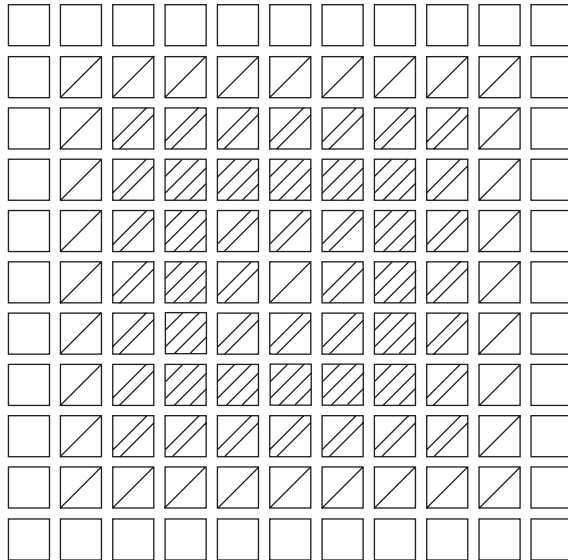


Figura 7.3. Interpretación gráfica de [7.8.1]. Cada cuadrado representa un elemento de volumen en [7.8.1]. El cuadrado central se supone muy próximo a $\langle \mathbf{r} \rangle$. El producto $(x - \langle x \rangle)^2 |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ se supone tanto mayor en cada cuadrado cuantas más rayas inclinadas tiene éste. Compárese con la figura 7.1.

Sea $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$ la función de onda en el espacio de momentos, obtenida a partir de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ mediante [7.6.1], y sea $\langle \mathbf{p} \rangle = (\langle p_x \rangle, \langle p_y \rangle, \langle p_z \rangle)$ (dado en [7.6.4] y en [7.3.2]) el valor medio del vector momento, ¿cómo caracterizar la zona del espacio de momentos en torno a $\langle \mathbf{p} \rangle$ en la que $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$ es apreciablemente distinta de cero? La respuesta, sugerida por [7.8.1] y [7.8.3], es: mediante nuevas incertidumbres $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ en las correspondientes componentes del momento. Así, Δp_x se introduce mediante ($\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z)$):

$$\Delta p_x = \left[\int d^3 \mathbf{q} (q_x - \langle p_x \rangle)^2 |\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)|^2 \right]^{1/2} \quad [7.8.5]$$

[7.8.5] puede reexpresarse como:

$$\Delta p_x = \left[\int d^3 \mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle p_x \rangle \right)^2 \Psi(\mathbf{r}, t) \right]^{1/2} \quad [7.8.6]$$

[7.8.6] se prueba mediante un cálculo enteramente similar al que estableció [7.6.4] a partir de [7.3.2] (véase la cuestión complementaria 7.4), pero efectuado a la inversa: por brevedad, será omitido. Por comparación con [7.8.2] y [7.8.4], reexpresaremos $(\Delta p_x)^2$ así ($p_x = -i\hbar \partial/\partial x$):

$$(\Delta p_x)^2 = \langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle \quad [7.8.7]$$

$$(\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2 \quad [7.8.8]$$

La demostración de [7.8.8] partiendo de [7.8.7] es completamente análoga a la de [7.8.4] a partir de [7.8.2] y la omitiremos. Resultados similares a [7.8.6-8] son válidos para $\Delta p_y, \Delta p_z$.

Recordemos en este punto el análisis aproximado presentado para la partícula libre en las secciones 3.5 y 6.5. Es natural pensar que las incertidumbres $\Delta x, \Delta p_x$, etc., introducidas mediante [7.8.1], [7.8.5], etc., constituyen generalizaciones precisas de las magnitudes aproximadas $\Delta x, \hbar \Delta k_x$, etc., que aparecían en aquellas secciones. En tal caso, ¿cuáles serían, en el caso presente, las generalizaciones de las relaciones cualitativas o semicuantitativas [3.5.3] o [6.5.12] y cuál sería su sentido concreto? Pues bien, las siguientes desigualdades fundamentales (denominadas también relaciones de incertidumbre posición-momento de Heisenberg) son válidas para [7.8.1], [7.8.5] y sus análogos según las componentes y, z , en el instante t :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \quad [7.8.9]$$

La demostración de [7.8.9], que es algo formal, se da en la cuestión complementaria 7.6. Así pues, la versión rigurosa de las relaciones [3.5.3] o [6.5.12] consiste en *desigualdades*.

Es importante reflexionar acerca de las incertidumbres y de [7.8.9], en relación con [7.7.5-7]. En principio, es posible que la función de onda sea tal que, en el instante t , sea

muy alta: *a*) bien la concentración de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en torno a $\langle \mathbf{r} \rangle$, o bien *b*) la de $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$ en torno a $\langle \mathbf{p} \rangle$. En el caso *a*), alguna de las incertidumbres Δx , Δy , Δz sería muy pequeña comparada con alguna longitud característica (como $\langle x \rangle$, por ejemplo, si $\langle x \rangle \neq 0$). En el caso *b*), alguna de las incertidumbres Δp_x , Δp_y , Δp_z sería una cantidad pequeña en relación con $\langle p_x \rangle$, por ejemplo (con tal que $\langle p_x \rangle \neq 0$). ¿Es posible que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ sea tal que Δx y Δp_x sean ambas tan pequeñas como se quiera simultáneamente, es decir, en el mismo t ? La respuesta es negativa, tal como muestra la primera desigualdad [7.8.9] de forma rotunda. Si, por ejemplo, Δx es muy pequeña, Δp_x ha de ser adecuadamente grande y recíprocamente, de manera que dicha desigualdad se respete. La razón (es decir, la de que esté $\hbar/2$ y no 0 a la derecha de la primera desigualdad [7.8.9]) tiene su origen en el hecho, fundamental y genuino en Mecánica Cuántica, de que x y p_x no conmutan, es decir, en [7.7.3] (esto es, en la complementariedad). Una revisión a su demostración, presentada en la cuestión 7.6, lo confirma. Por el contrario, hay funciones de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ para las que, en el mismo t , no sólo una incertidumbre como Δx es muy pequeña, sino también incluso las otras dos, es decir, Δy y Δz , lo son. Esto está implicado por el hecho de que los conmutadores de x , y , z son nulos (véase [7.7.8]). En tal caso, para esa $\Psi(\mathbf{r}, t)$, Δp_y y Δp_z serán también muy grandes. Recíprocamente, hay otras $\Psi(\mathbf{r}, t)$ tales que, en el mismo t , las tres incertidumbres Δp_x , Δp_y y Δp_z pueden ser tan pequeñas como se quiera en correspondencia con el hecho de que p_x , p_y y p_z conmutan entre sí (véase [7.7.8]). Hay otras posibilidades interesantes, sugeridas por [7.7.7]. En efecto, hay nuevas $\Psi(\mathbf{r}, t)$ para las que, en el mismo t , puede conseguirse que Δx , Δp_y y Δp_z sean simultáneamente muy pequeñas, ya que x , p_y y p_z conmutan entre sí, y así con otras combinaciones.

El lector apreciará que el contenido de esta sección ha extendido y formulado en términos de funciones de onda los análisis expuestos previamente en las secciones 3.5 y 3.6.

7.9. INCERTIDUMBRE EN LA ENERGÍA Y RELACIÓN DE INCERTIDUMBRE ENERGÍA-TIEMPO

Estando la partícula representada por la función de onda normalizada $\Psi(\mathbf{r}, t)$, sea $\langle H \rangle$ ([7.5.4]) el valor medio de su energía. Por analogía con la incertidumbre Δp_x en la componente x del momento, dada en [7.8.6], y sobre la base de las correspondencias de la tabla de la sección 7.5, es natural introducir la incertidumbre en la energía así:

$$\Delta E = \left[\int d^3\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) (H - \langle H \rangle)^2 \Psi(\mathbf{r}, t) \right]^{1/2} \quad [7.9.1]$$

estando H dado en [7.5.5].

Existe otra importante relación de incertidumbre que involucra ΔE y una cierta magnitud temporal característica, τ . Se la conoce como relación de incertidumbre energía-tiempo, y es:

$$\Delta E \tau \sim \hbar \quad [7.9.2]$$

es decir, tiene un carácter cualitativo o semicuantitativo similar al de [6.5.12], pero su interpretación física es diferente al de aquéllas. Específicamente, τ se interpreta como el tiempo característico que ha de transcurrir para que las propiedades del sistema microscópico (por ejemplo, la partícula que estudiamos) cambien de forma físicamente apreciable. Así, para que se perciba un cambio, detectable en principio en las distribuciones de probabilidad de la partícula microscópica (en $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, digamos), es preciso que transcurran tiempos de orden de τ .

La relación [7.9.2] fue ilustrada, mediante un ejemplo sencillo, en la sección 3.5. En capítulos posteriores de este libro aparecerán nuevos ejemplos en los que se hará uso de [7.9.2].

Para un estudio más riguroso de la relación de incertidumbre energía-tiempo, el lector puede consultar¹.

7.10. ESTADOS ESTACIONARIOS Y PROPIEDADES

Supongamos que el potencial $V = V(\mathbf{r})$ en el que se mueve la partícula es independiente del tiempo. En tal caso, la ecuación de Schrödinger (6.4.8) admite soluciones factorizadas por lo que respecta a sus dependencias espacial y temporal, es decir:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r})f(t) \quad [7.10.1]$$

$$f(t) = \exp(-iEt/\hbar) \quad [7.10.2]$$

siendo E una constante. La función independiente del tiempo $\Phi(\mathbf{r})$ ha de verificar ($\nabla^2 = \Delta$):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r}) \quad [7.10.3]$$

La justificación de estos importantes resultados es simple. La sustitución de [7.10.1] en [6.4.8] da, tras dividir entre el producto $\Phi \times f$:

$$\frac{1}{\Phi} \cdot \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Phi \right] = \frac{i\hbar \left[\frac{df}{dt} \right]}{f} \quad [7.10.4]$$

El lado izquierdo de [7.10.4] sólo depende de \mathbf{r} y el derecho solamente de t . Para que esto pueda ser posible, [7.10.4] debe ser igual a una constante, E . Esto conduce directamente a [7.10.3] y a la ecuación $i\hbar(df/dt) = Ef$, cuya solución es [7.10.2]. La deducción anterior es similar a la que llevó de [1.5.1] a [1.5.5.a-d].

En lo que sigue, llamaremos indistintamente estado estacionario tanto a $\Phi(\mathbf{r})$ como a $\Psi(\mathbf{r}, t)$, según aparecen en [7.10.1]. En principio, $\Phi(\mathbf{r})$ y $\Psi(\mathbf{r}, t)$ pueden ser normalizables (es decir, satisfacer [6.6.3]) o no. Así, por ejemplo, la onda plana [6.2.11] y la función de

¹ A. Galindo y P. Pascual, *Mecánica Cuántica*, vol. 1, Eudema Universidad, Madrid, 1989.

onda total cuyo comportamiento en $|r| \rightarrow \infty$ aparecerá en [18.1.3] son estados estacionarios no normalizables (es decir, violan [6.6.3]).

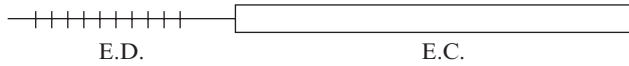


Figura 7.4. Estructura general del espectro de un hamiltoniano en Mecánica Cuántica: E.D. designa el espectro discreto, y E.C. el continuo.

Recordando conceptos de la teoría de ecuaciones diferenciales y de la de operadores lineales en relación con [7.10.3], vemos que $\Phi(\mathbf{r})$ es autofunción del operador de energía o hamiltoniano (compárese con [7.5.5])

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) = H \tag{7.10.5}$$

correspondiente al autovalor E . En todos los casos de interés físico, $V(\mathbf{r})$ es tal que H es un operador autoadjunto. Dos propiedades de importancia fundamental (véase también el apéndice B) son:

1. Todos los autovalores E son, necesariamente, reales.
2. Si Φ_1 y Φ_2 son autofunciones distintas de H correspondientes a los autovalores E_1 y E_2 , respectivamente, y si $E_1 \neq E_2$, entonces

$$\int d^3\mathbf{r} \Phi_1^*(\mathbf{r}) \Phi_2(\mathbf{r}) = 0 \tag{7.10.6}$$

Cuando Φ_1 y Φ_2 verifican [7.10.6] se dice también que son ortogonales. Cuando hay varias autofunciones diferentes $\Phi_1(\mathbf{r})$, $\Phi_2(\mathbf{r})$, ..., correspondientes al mismo autovalor E , se dice que éste es degenerado. Diferentes casos de autofunciones degeneradas en la energía aparecerán en capítulos posteriores del libro. No es ésta la primera vez que, a lo largo de este libro, aparecen autofunciones de operadores (asociados a variables dinámicas microscópicas), en situaciones de interés físico: recuérdese [7.3.4].

Para un potencial $V(\mathbf{r})$ dado, el conjunto de todos los autovalores E del correspondiente hamiltoniano H se conoce como su espectro. En el caso general, este espectro está constituido por (véase figura 7.4):

- i) Un subconjunto discreto de autovalores reales E_1, \dots, E_n, \dots (finito o infinito numerable), denominado espectro discreto.
- ii) Otro subconjunto en el que los autovalores (reales también) forman un continuo, llamado espectro continuo.

Los estados estacionarios tienen algunas propiedades muy características que discutiremos a continuación:

1. El módulo cuadrado de Ψ (sea o no normalizable) es independiente del tiempo. En efecto, dado que E es real, la función $f(t)$ dada en [7.10.2] cumple

$$|f(t)|^2 = 1 \quad [7.10.7]$$

así que [7.10.1] implica

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\Phi(\mathbf{r})|^2 \quad [7.10.8]$$

que no depende de t . Por otra parte, suponiendo que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ está normalizada, se tiene

$$\int d^3\mathbf{r} |\Phi(\mathbf{r})|^2 = 1 \quad [7.10.9]$$

2. La densidad de corriente de probabilidad es también independiente de t , tanto si Ψ es normalizable como si no lo es. En efecto, [6.7.7] y [7.10.1] conducen a

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} \{ \Phi(\mathbf{r})[\nabla\Phi^*(\mathbf{r})] - \Phi^*(\mathbf{r})[\nabla\Phi(\mathbf{r})] \} = \mathbf{J}(\mathbf{r}) \quad [7.10.10]$$

Más aún, $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ es un vector de divergencia nula. En efecto, [6.7.9], [7.10.8] y [7.10.10] implican

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = 0 \quad [7.10.11]$$

[7.10.10] y [7.10.11] justifican plenamente la denominación de estado estacionario, tanto si [7.10.1] es normalizable como si no lo es.

3. Cuando Ψ es normalizable y [7.10.9] se satisface, el valor medio de la energía $\langle H \rangle$ en el estado estacionario es precisamente E , lo cual da el significado físico de este autovalor. En efecto, utilizando [7.10.1], [7.10.3] y [7.10.9]:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \exp iEt \left[\frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) \exp(-iEt) = \\ &= E \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) = E \end{aligned} \quad [7.10.12]$$

En consecuencia, $\langle H \rangle$ es constante a lo largo del tiempo, consistentemente con [7.5.7] (ya que $\partial V/\partial t = 0$).

4. La incertidumbre en la energía en un estado estacionario normalizable es nula. En efecto, la combinación de [7.9.1] y [7.10.1] da

$$(\Delta E)^2 = \int d^3r \Phi^*(\mathbf{r}) \exp iEt (H - \langle H \rangle)(H - \langle H \rangle)\Phi(\mathbf{r}) \exp(-iEt) \quad [7.10.13]$$

La propiedad 3 mostró que $\langle H \rangle = E$. Entonces, [7.10.3] implica

$$(H - \langle H \rangle)\Phi(\mathbf{r}) = (H - E)\Phi(\mathbf{r}) = 0 \quad [7.10.14]$$

y, por tanto:

$$\Delta E = 0 \quad [7.10.15]$$

Para un estado estacionario, la relación de incertidumbre energía-tiempo junto con [7.10.15] implican que $\tau = \infty$. Es decir, las propiedades características del sistema en un estado estacionario *no* cambian al cabo de ningún intervalo temporal finito.

5. Supóngase que la incertidumbre en la energía ΔE correspondiente a la función de onda normalizada $\Psi(\mathbf{r}, t)$ es nula en todo t . Entonces $\Psi(\mathbf{r}, t)$ es, necesariamente, un estado estacionario dado por [7.10.1-3), en el que $\langle H \rangle = E$. La justificación se da en la cuestión complementaria 7.7.

Cuando $\Psi(\mathbf{r}, t)$ es normalizable y [7.10.9] se verifica, el hecho de que la densidad de probabilidad [7.10.8], así como [7.10.12], sean independientes de t proporciona nuevas justificaciones para el término «estado estacionario».

Sean $\Phi_{\alpha, \beta}(\mathbf{r}) \exp[-i(E_{\alpha}t/\hbar)]$ todos los posibles estados estacionarios (normalizables o no) de H . α es un conjunto de índices (o números cuánticos, como también se les llama en otras partes de este libro) que, al variar, enumeran todos los posibles autovalores (tanto del espectro discreto como del continuo) de H . β es otro conjunto de índices cuyas variaciones permiten distinguir autofunciones distintas de H correspondientes al mismo autovalor E_{α} . Por ser V independiente del tiempo, y consistentemente con el principio de superposición (secciones 6.3 y 6.4), la solución general de [6.4.8] es:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} C_{\alpha, \beta} \Phi_{\alpha, \beta}(\mathbf{r}) \exp \left[-i \frac{E_{\alpha}t}{\hbar} \right] \quad [7.10.16]$$

donde $C_{\alpha, \beta}$ son números complejos que dependen de α, β , pero son independientes de \mathbf{r}, t . Los símbolos $\sum_{\alpha} \sum_{\beta}$ designan conjuntamente suma y/o integral, según que α, β correspondan al espectro discreto o al continuo. Para el caso de una partícula libre en todo el espacio tridimensional, [6.3.3] proporciona un ejemplo concreto de [7.10.16]. Entonces sólo hay espectro continuo, con

$$\Phi_{\alpha, \beta}(\mathbf{r}) = \exp \frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad E_{\alpha} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 = \hbar\nu \quad [7.10.17]$$

y pueden asimilarse α con E_α , con $|\mathbf{p}|$ o con $|\mathbf{k}|$ y β con los dos ángulos que caracterizan el vector unitario $\mathbf{p}/|\mathbf{p}|$. Claramente, $\Sigma_\alpha \Sigma_\beta$ y $C_{\alpha\beta}$ pasan a ser $\int d^3\mathbf{k}$ y $A(\mathbf{k})$, respectivamente.

La justificación de que [7.10.16] es la solución general de [6.4.8] es análoga a las que aparecen en los ejercicios 6.1, 6.3, y será omitida.

7.11. PARTÍCULA MICROSCÓPICA CARGADA EN CAMPO ELECTROMAGNÉTICO EXTERIOR

Consideremos un campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ y uno magnético $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, independientes del tiempo y creados por distribuciones de cargas y corrientes dadas. De acuerdo con el Electromagnetismo Clásico, dichos campos cumplen, entre otras, las condiciones

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad [7.11.1]$$

Es posible, y muy útil, describir estos campos mediante un potencial escalar $\varphi(\mathbf{r})$ (eléctrico) y un potencial vector $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ (magnético). Específicamente, se tiene

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\varphi(\mathbf{r}), \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad [7.11.2]$$

Puede verse fácilmente que [7.11.2] son consistentes con [7.11.1].

Sea una partícula microscópica de masa m y carga eléctrica q , posición $\mathbf{r}_{cl}(t)$, velocidad $\mathbf{v}_{cl}(t)$ y momento $\mathbf{p}_{cl}(t)$ que se mueve sometida a dichos campos. Las leyes dinámicas de la Mecánica Clásica que rigen su movimiento son

$$\mathbf{v}_{cl} = \frac{d\mathbf{r}_{cl}}{dt} \quad [7.11.3]$$

$$\frac{d(m\mathbf{v}_{cl})}{dt} = q \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}_{cl}) + \frac{\mathbf{v}_{cl}}{c} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_{cl}) \right] \quad [7.11.4]$$

siendo c la velocidad de la luz en vacío. El lado derecho de [7.11.4] es la llamada fuerza de Lorentz de ambos campos sobre la partícula cargada. El hamiltoniano clásico o energía total para aquella es

$$H_{cl}[\mathbf{p}_{cl}, \mathbf{r}_{cl}] = \frac{\left(\mathbf{p}_{cl} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{cl}) \right)^2}{2m} + q\varphi(\mathbf{r}_{cl}) \quad [7.11.5]$$

la cual *no* depende explícitamente del tiempo. Consideremos las ecuaciones clásicas generales de Hamilton [7.1.4] correspondientes al hamiltoniano [7.11.5]. La primera ecuación [7.1.4] es, ahora

$$\frac{d\mathbf{r}_{cl}}{dt} = \frac{1}{m} \left[\mathbf{p}_{cl} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{cl}) \right] \quad [7.11.6]$$

[7.11.6] muestra que el momento ya no es $m(d\mathbf{r}_{cl}/dt)$ (como en el caso tratado en la sección 7.1), sino $m(d\mathbf{r}_{cl}/dt) + (q/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}_{cl})$. Por otra parte, la segunda ecuación de Hamilton [7.1.4] correspondiente a [7.11.5] es equivalente a [7.11.4], lo cual justifica que [7.11.5] es ciertamente el hamiltoniano clásico. Por brevedad, omitimos este segundo cálculo.

Tratemos, a continuación, el caso de una partícula microscópica de masa m y carga eléctrica q , que se mueve sometida a los campos eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ y magnético $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ citados. Sea $\Psi(\mathbf{r}, t)$ la función de onda asociada a dicha partícula. Sobre la base del estudio realizado en las secciones 7.1 a 7.4 y a [7.11.5], es muy natural aceptar que la ecuación de ondas para la partícula es

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left[-i\hbar\nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 + q\varphi(\mathbf{r}) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad [7.11.7]$$

Introduciendo el hamiltoniano cuántico

$$H = \frac{1}{2m} \left[-i\hbar\nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 + q\varphi(\mathbf{r}) \quad [7.11.8]$$

es claro que [7.11.7] tiene también la forma dada en [7.5.9]. Suponiendo Ψ normalizada, es decir, la validez de [6.8.6], $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ se interpreta ahora también como la probabilidad de encontrar, en t , a la partícula microscópica en d^3r en torno a \mathbf{r} . La ecuación de continuidad [6.7.9] continúa siendo válida en el presente caso, pero ahora el vector densidad de corriente de probabilidad ya no es [6.7.7], sino

$$J = \frac{1}{2m} \left\{ \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left[-i\hbar\nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \left[-i\hbar\nabla + \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right] \Psi^*(\mathbf{r}, t) \right\} \quad [7.11.9]$$

La deducción de [6.7.9] con [7.11.9], a partir de [7.11.7] y de la ecuación obtenida a partir de ella mediante conjugación compleja, sigue la misma pauta que la presentada en la sección 6.7, y la omitiremos.

7.12. SISTEMA CON DOS O MÁS PARTÍCULAS MICROSCÓPICAS DIFERENTES

Sean $N(\geq 2)$ partículas macroscópicas no-relativistas con masas m_1, \dots, m_N y distintas (concepto que precisaremos un poco más en el caso microscópico). En el instante t , cada una tiene una posición $\mathbf{r}_{cl,j}(t)$ y un momento $\mathbf{p}_{cl,j}(t)$, $j = 1, \dots, N$. Su hamiltoniano clásico es:

$$H_{cl}[\mathbf{p}_{cl,1}, \dots, \mathbf{p}_{cl,N}, \mathbf{r}_{cl,1}, \dots, \mathbf{r}_{cl,N}, t] = \sum_{j=1}^N \frac{\mathbf{p}_{cl,j}^2}{2m_j} + V[\mathbf{r}_{cl,1}, \dots, \mathbf{r}_{cl,N}, t] \quad [7.12.1]$$

$V[\mathbf{r}_{cl,1}, \dots, \mathbf{r}_{cl,N}, t] = V$ es la energía potencial de interacción de las N partículas (quizá dependiente explícitamente de t). V puede incluir una energía potencial en un campo externo V_{ex} (quizá dependiente del tiempo) y/o energías potenciales de interacción (V_{ij}) entre, por ejemplo, cada pareja de partículas (que no dependerán explícitamente de t , en los casos habituales de interés físico):

$$V[\mathbf{r}_{cl,1}, \dots, \mathbf{r}_{cl,N}, t] = V_{ex}(\mathbf{r}_{cl,1}, \dots, \mathbf{r}_{cl,N}, t) + \sum_{i < j} V_{ij}(\mathbf{r}_{cl,i}, \mathbf{r}_{cl,j}) \quad [7.12.2]$$

Las correspondientes ecuaciones clásicas de Hamilton que generalizan [7.1.4], son:

$$\frac{d\mathbf{r}_{cl,j}}{dt} = \nabla_{\mathbf{p}_{cl,j}} H_{cl}[\mathbf{p}_{cl,1}, \dots, \mathbf{p}_{cl,N}, \mathbf{r}_{cl,1}, \dots, \mathbf{r}_{cl,N}, t] \quad [7.12.3]$$

$$\frac{d\mathbf{p}_{cl,j}}{dt} = -\nabla_{\mathbf{r}_{cl,j}} H_{cl}[\mathbf{p}_{cl,1}, \dots, \mathbf{p}_{cl,N}, \mathbf{r}_{cl,1}, \dots, \mathbf{r}_{cl,N}, t] \quad [7.12.4]$$

con $j = 1, \dots, N$. Ambas ecuaciones [7.12.3-4] son equivalentes a las leyes fundamentales de la Mecánica Clásica (compárese con [7.1.7]). La generalización de [7.1.8] es:

$$\frac{d}{dt} H_{cl}[\mathbf{p}_{cl,1}(t), \dots, \mathbf{p}_{cl,N}(t), \mathbf{r}_{cl,1}(t), \dots, \mathbf{r}_{cl,N}(t), t] = \left. \frac{\partial V(\mathbf{r}_{cl,1}, \dots, \mathbf{r}_{cl,N}, t)}{\partial t} \right|_{\substack{\mathbf{r}_{cl,1} = \mathbf{r}_{cl,1}(t) \\ \vdots \\ \mathbf{r}_{cl,N} = \mathbf{r}_{cl,N}(t)}} \quad [7.12.5]$$

cuya justificación es similar a la del ejercicio 7.1 y será omitida.

Ahora consideremos N partículas microscópicas, con masas m_1, \dots, m_N . Supondremos que cada partícula tiene alguna característica intrínseca que la distingue de las demás (por ejemplo, su masa, su carga eléctrica u otra propiedad), es decir, todas las partículas son distintas entre sí. Supongamos, en primer lugar, que las partículas están libres, sin interacción y muy separadas unas de otras, es decir, en cada instante t de un cierto intervalo ($t_1 < t < t_2$) cada una tiene gran probabilidad de encontrarse en una cierta región $R_j, j = 1, \dots, N$ en la que es muy improbable, o prácticamente imposible, encontrar cualquier otra partícula. Es decir, todas las regiones R_1, \dots, R_N son distintas entre sí. En estas condiciones, es muy natural aceptar que la partícula j lleva asociada una función de onda $\Psi_j(\mathbf{r}_j, t), j = 1, \dots, N$ (por ejemplo, de la forma [6.3.3]), que satisface [6.2.15] si $t_1 < t < t_2$, con $\mathbf{r} = \mathbf{r}_j$ en R_j , la cual, sin pérdida de generalidad, puede suponerse normalizada. Es igualmente natural aceptar que las N partículas están representadas de forma conjunta por una función de onda global que es el producto de todas las anteriores:

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \Psi_1(\mathbf{r}_1, t) \Psi_2(\mathbf{r}_2, t) \dots \Psi_N(\mathbf{r}_N, t) \quad [7.12.6]$$

cuando $t_1 < t < t_2$, y \mathbf{r}_j varía en $R_j, j = 1, \dots, N$. Véase la figura 7.5. Dos consecuencias importantes son:

1. La función de onda global [7.12.6] se propaga en el tiempo y en el espacio $3N$ -dimensional (dentro del intervalo temporal y de las regiones espaciales antes indicadas) de acuerdo con la ecuación de Schrödinger generalizada

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m_1} (-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}_1})^2 + \dots + \frac{1}{2m_N} (-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}_N})^2 \right] \Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \quad [7.12.7]$$

En efecto, es inmediato verificar, mediante sustitución, que [7.12.6] satisface [7.12.7], dado que [6.2.15] es cierta para cada $\Psi_j(\mathbf{r}_j, t)$.

2. El producto:

$$[|\Psi_1(\mathbf{r}_1, t)|^2 d^3r_1][|\Psi_2(\mathbf{r}_2, t)|^2 d^3r_2] \cdots [|\Psi_N(\mathbf{r}_N, t)|^2 d^3r_N] \quad [7.12.8]$$

puede interpretarse como la probabilidad de encontrar en t , y simultáneamente, la partícula 1 en d^3r_1 en torno a \mathbf{r}_1 (en R_1)... y la N -sima en d^3r_N en torno a \mathbf{r}_N (en R_N). Esta interpretación es muy lógica: las N partículas en regiones disjuntas son como N sistemas físicos distintos (¡no son copias unos de otros!) e independientes. Por tanto, la probabilidad global debe ser el producto de las probabilidades para cada sistema (cada partícula) individual, tal como sugiere la Estadística.

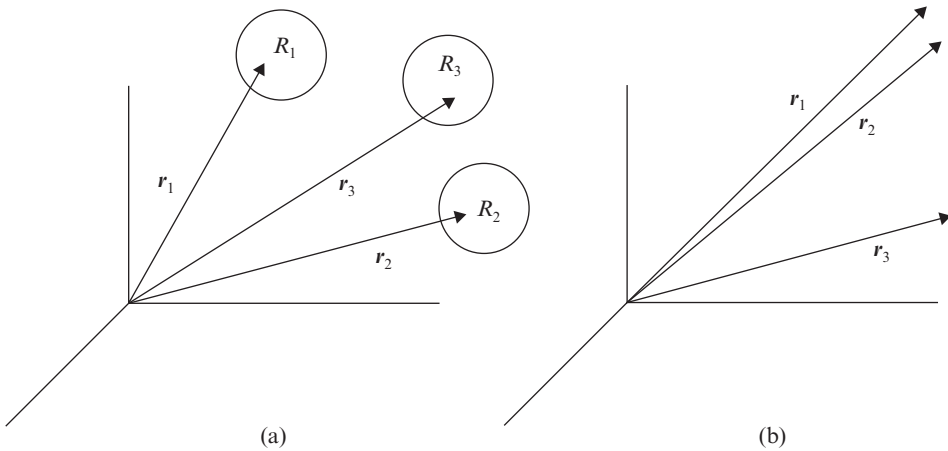


Figura 7.5. (a) en [7.12.6-8] se supone que las partículas tienen funciones de ondas concentradas en regiones disjuntas R_1, R_2, R_3 . (b) en [7.12.9] y [7.12.12] se postula que ya no existe esa restricción y se acepta que las partículas pueden estar cerca o lejos unas de otras, con una probabilidad determinada por [7.12.15].

A continuación, supongamos que las N partículas microscópicas *ya no están forzosa-mente en regiones separadas unas de otras*, sino que pueden, además, hallarse en la misma región, y que *no* están necesariamente libres, sino sometidas a una energía potencial de in-

teracción $V[\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t]$, como la dada en [7.12.2] (con $\mathbf{r}_{cl,j}$ sustituidas por $\mathbf{r}_j, j = 1, \dots, N$). Postularemos que en $-\infty < t < +\infty$ y si $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$, varían de forma totalmente independiente en *todo* el espacio $3N$ -dimensional (es decir, no solamente en $t_1 < t < t_2$ ni para \mathbf{r}_j restringido a R_j con $j = 1, \dots, N$), hay una función de onda generalizada $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ que se propaga de acuerdo con la ecuación de Schrödinger general

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)}{\partial t} = H\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \quad [7.12.9]$$

H es el operador siguiente

$$H = \frac{1}{2m_1} (-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}_1})^2 + \dots + \frac{1}{2m_N} (-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}_N})^2 + V[\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t] \quad [7.12.10]$$

y actúa sobre las funciones $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$. Así, H es el hamiltoniano cuántico asociado, en el dominio microscópico, a [7.12.1]. Se ha pasado de variables clásicas para partículas macroscópicas a las cuánticas para las microscópicas, según se indicó en la tabla de la sección 7.5, es decir

$$\mathbf{r}_{cl,j} \rightarrow \mathbf{r}_j, \mathbf{p}_{cl,j} \rightarrow -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}_j} = \mathbf{p}_j, j = 1, \dots, N \quad [7.12.11]$$

Si $V = 0$, [7.12.9] se reduce a [7.12.7] que, ahora, es válida en $-\infty < t < +\infty$ para todo el espacio $3N$ -dimensional. En tal caso, al estar libres las N partículas, tiene ya sentido estudiar las soluciones de [7.12.7] en forma de onda plana

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \exp \frac{i}{\hbar} [\mathbf{p}_1 \mathbf{r}_1 + \dots + \mathbf{p}_N \mathbf{r}_N - Et] \quad [7.12.12]$$

$$E = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \dots + \frac{\mathbf{p}_N^2}{2m_N} \quad [7.12.13]$$

[7.12.12] permite, en particular, que \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 puedan ser iguales. Supongamos que $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ está normalizada en el espacio $3N$ -dimensional, es decir,

$$\int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N |\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 = 1 \quad [7.12.14]$$

La interpretación probabilística de la función de onda $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ resulta de generalizar de forma directa la vista en relación con [7.12.8]:

$$|\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 d^3\mathbf{r}_1, \dots, d^3\mathbf{r}_N \quad [7.12.15]$$

es la probabilidad de encontrar la partícula 1 en $d^3\mathbf{r}_1$ en torno a $\mathbf{r}_1 \dots$ la N en $d^3\mathbf{r}_N$ en torno a \mathbf{r}_N , en el instante t . La probabilidad de encontrar la partícula 1 en $d^3\mathbf{r}_1$, en torno a \mathbf{r}_1 , estando las restantes (2 a N) en *cualquier parte*, en el instante t , es

$$d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \dots d^3\mathbf{r}_N |\Psi|(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 \quad [7.12.16]$$

y, análogamente, para la probabilidad de encontrar las partículas 1 y 2 en $d^3\mathbf{r}_1$ y $d^3\mathbf{r}_2$ en torno a \mathbf{r}_1 y a \mathbf{r}_2 , respectivamente, estando las demás en cualquier parte, etc.

La probabilidad de encontrar las N partículas en cualquier parte del espacio $3N$ dimensional en el instante t es la certeza, es decir, la unidad: esto es lo que [7.12.14] representa.

Puede introducirse la densidad de corriente de probabilidad para la partícula h -ésima ($h = 1, \dots, N$), como si las restantes fuesen espectadoras, como sigue

$$\mathbf{J}_h(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \frac{\hbar}{m_h} \operatorname{Re} \left\{ \frac{1}{i} \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) [\nabla_{\mathbf{r}_h} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)] \right\} \quad [7.12.17]$$

que constituye una generalización directa de [6.7.7]. En el caso presente, la ecuación de continuidad análoga a [6.7.9] es

$$\frac{\partial |\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2}{\partial t} + \sum_{h=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_h} \cdot \mathbf{J}_h(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = 0 \quad [7.12.18]$$

La justificación de [7.12.18] es similar a la de [6.7.9] y será omitida.

El resto de la interpretación probabilística también es natural. Así, suponiendo [7.12.14]:

$$\langle \mathbf{r}_j \rangle = \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N |\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 \mathbf{r}_j \quad [7.12.19]$$

$$\langle \mathbf{p}_j \rangle = \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) (-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}_j}) \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \quad [7.12.20]$$

$$\langle H \rangle = \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) H \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \quad [7.12.21]$$

son los valores medios de la posición y del momento de la partícula $j = 1, \dots, N$ y de la energía total, respectivamente. Como en el caso de una partícula, se tiene

$$\frac{d\langle \mathbf{r}_j \rangle}{dt} = \frac{1}{m_j} \langle \mathbf{p}_j \rangle, \quad \frac{d\langle \mathbf{p}_j \rangle}{dt} = \langle -\nabla_{\mathbf{r}_j} V \rangle \quad [7.12.22]$$

$$\frac{d\langle H \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial V}{\partial t} \right\rangle \quad [7.12.23]$$

De nuevo, si $\partial V/\partial t = 0$, $\langle H \rangle$ es constante a lo largo del tiempo, y diremos que H es una constante de movimiento. Si V no depende explícitamente de t , hay estados estacionarios de la forma

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \exp(-iEt/\hbar) \quad [7.12.24]$$

$$H\Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = E\Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad [7.12.25]$$

Las justificaciones son similares a las del caso de una partícula y serán omitidas.

7.13. OPERADORES AUTOADJUNTOS CONMUTANTES

Todos los operadores asociados a variables dinámicas de partículas microscópicas que trataremos en este libro son autoadjuntos en el sentido matemático (también se les denomina, a veces, hermíticos). Así, los operadores de energía cinética, potencial (real) y total para una y varias partículas, discutidas en las secciones 7.5, 7.11 y 7.12, son autoadjuntos. También lo son los operadores momento para una ($-i\hbar\nabla$) y varias ($-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_j}$, $j = 1, \dots, N$) partículas. Incluso lo son las propias variables dinámicas de posición para una (\mathbf{r}) y varias (\mathbf{r}_j , $j = 1, \dots, N$) partículas; capítulos posteriores de este libro ofrecerán nuevos e importantes ejemplos con interés físico. Denominaremos también observables a todas esas variables dinámicas, representadas por operadores autoadjuntos, ateniéndonos así a una nomenclatura de uso común.

Por conveniencia, se utilizará a veces en los capítulos posteriores (en especial, en relación con el momento angular), la llamada notación de Dirac, que, en esencia, consiste en lo siguiente:

- i) Las funciones de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ o $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ se representarán genéricamente mediante $|\Psi\rangle$.
- ii) Integrales del tipo

$$\int d^3\mathbf{r} \Psi_1^*(\mathbf{r}, t) A \Psi_2(\mathbf{r}, t)$$

o

$$\int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N \Psi_1^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) A \Psi_2(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$$

donde A es un operador autoadjunto que actúa sobre $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ o $\Psi_2(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$, se representan así: $\langle \Psi_1 | A | \Psi_2 \rangle$. En particular, si A está ausente, dichas integrales se denotarán mediante $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$. Para una explicación complementaria de esta notación, remitimos al lector al apéndice B.

Se dirá que dos operadores autoadjuntos (observables) A, B , que representan sendas variables mecanocuánticas de un sistema microscópico (conteniendo una o varias partícu-

las) son conmutantes, o medibles simultáneamente, o compatibles, si su conmutador se anula:

$$[A, B] = 0 \quad [7.13.1]$$

y que no lo son si aquél es distinto de cero. Así, para una partícula, si A y B representan su energía cinética y cualquier componente de su momento, respectivamente, puede comprobarse que son compatibles, es decir [7.13.1] se verifica. Análogamente, [7.7.7-8] proporcionan numerosos ejemplos de operadores medibles simultáneamente.

Será útil trasladar, en este punto, algunos conceptos de la teoría de matrices y operadores lineales. Si dos o más operadores autoadjuntos A_h , $h = 1, \dots, n$, asociados a variables dinámicas microscópicas (para una o varias partículas), son conmutantes entre sí dos a dos, existen autofunciones $\varphi_{h,j}$ comunes a todos ellos, con autovalores $a_{h,j}$ («números cuánticos»)

$$A_h \varphi_{h,j} = a_{h,j} \varphi_{h,j} \quad [7.13.2]$$

Utilizando la notación de Dirac, [7.13.2] se reescribe así:

$$A_h |\varphi_{h,j}\rangle = a_{h,j} |\varphi_{h,j}\rangle \quad [7.13.3]$$

Genéricamente, nos encontraremos con la situación siguiente. Habrá que hallar el conjunto más amplio posible de operadores A_1, \dots, A_n conmutantes entre sí dos a dos y construir sus autofunciones comunes, es decir, resolver [7.13.2]. El estudio del momento angular en el capítulo 11 ofrecerá un ejemplo especialmente ilustrativo de eso.

Un conjunto de funciones φ_n constituye, por definición, una base si cualquier función de onda Ψ (en cualquier instante dado) puede expresarse como combinación o superposición lineal de las φ_n . Un conjunto de observables compatibles entre sí dos a dos A_h , $h = 1, \dots, n$, se denomina completo si el conjunto de todas las $\varphi_{h,j}$ es único (salvo multiplicación de ellos por constantes) y constituye una base. En general, la integral del producto de cualquier pareja de funciones distintas $\varphi_{h,j}(\mathbf{r}_1\dots)$ y $\varphi_{h',j'}(\mathbf{r}_1\dots)$ de esa base con $(h, j) \neq (h', j')$ (extendida al rango completo de las variables $\mathbf{r}_1\dots$), esto es, $\langle \varphi_{h,j} | \varphi_{h',j'} \rangle$, será nula, es decir, se verificará el análogo de [7.10.6]. En otros términos, $\varphi_{h,j}$ y $\varphi_{h',j'}$ serán ortogonales entre sí. Por otra parte, cada una de las funciones $\varphi_{h,j}$ (suponiéndolas todas normalizables) puede siempre normalizarse (como en la sección 6.8). En tal caso, diremos que la base autonormalizada formada por todas las autofunciones $\varphi_{h,j}$ (correspondientes a un conjunto completo de observables compatibles) está ortonormalizada. Una discusión algo más matemática se presentará en el apéndice B.

Una situación muy frecuente en Mecánica Cuántica, es la siguiente. Sea un potencial V que no depende explícitamente del tiempo (en el caso de una o varias partículas), con lo cual existen estados estacionarios dados por [7.10.3] y [7.12.24]: es muy importante, entonces, hallar el mayor número posible de operadores que conmuten entre sí y con H . En efecto, la determinación de las autofunciones comunes a todos ellos (incluyendo H) proporciona los estados estacionarios de manera más simple, al permitir en éstos depen-

dencias factorizadas o separables. Posteriormente, se ofrecerán diversos ejemplo (y, con ello, clarificaciones) de todo esto.

En capítulos posteriores de este libro se estudiarán diversos casos en los que una o varias partículas microscópicas: *a*) bien no pueden moverse en todo el espacio tridimensional, sino en ciertas zonas limitadas de éste, *b*) o bien, han de evolucionar en un espacio de dimensión inferior a 3 (e, incluso, solamente en ciertas regiones de él). Las ecuaciones de ondas en situaciones del tipo *b*) han sido ya presentadas (véase el ejercicio 6.5). En todo caso, las ecuaciones de ondas, así como toda la interpretación probabilística en ambos casos *a*) y *b*), constituyen extensiones inmediatas de las que hemos ofrecido en detalle para el espacio tridimensional completo. En el caso *a*), aparecen características nuevas: hay que tener en cuenta, además, ciertas condiciones físicas de contorno para la función de onda. Estas nuevas condiciones serán tratadas con detalle en cada caso.

CUESTIONES COMPLEMENTARIAS

7.1. Demostración de [7.3.1] a partir de [6.4.9] y [6.7.5].

El punto de partida es

$$\frac{d}{dt} \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad [7.1.a]$$

Intercambiando d/dt e $\int d^3r$, utilizando [6.4.9] y [6.7.5] para eliminar $\partial\Psi/\partial t$ y $\partial\Psi^*/\partial t$, y cancelando los términos en V , [7.1.a] pasa a ser

$$\frac{\hbar^2}{i\hbar 2m} \int d^3r \{ \Psi(\mathbf{r}, t) [\Delta\Psi^*(\mathbf{r}, t)] - \Psi^*(\mathbf{r}, t) [\Delta\Psi(\mathbf{r}, t)] \} \quad [7.1.b]$$

Con objeto de simplificar [7.1.b] y, así, llegar al resultado deseado, usaremos la siguiente identidad, válida para cualesquiera Ψ, Ψ^*

$$\begin{aligned} x\Psi(\mathbf{r}, t) [\Delta\Psi^*(\mathbf{r}, t)] &= \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Delta[x\Psi(\mathbf{r}, t)] + \\ &+ \nabla[x\Psi(\mathbf{r}, t) (\nabla\Psi^*(\mathbf{r}, t)) - \Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla(x\Psi(\mathbf{r}, t))] \end{aligned} \quad [7.1.c]$$

Así pues, sustituiremos el término $\Psi(\Delta\Psi^*)_x$ en [7.1.b] por la expresión a la derecha de [7.1.c]. Una simplificación importante es la siguiente:

$$\int d^3r \nabla[x\Psi(\nabla\Psi^*) - \Psi^*\nabla(x\Psi)] \quad [7.1.d]$$

es también igual, utilizando fórmulas típicas para transformar integrales de volumen en integrales de superficie, a

$$\oint_S ds n [x\Psi(\nabla\Psi^*) - \Psi^*\nabla(x\Psi)] \quad [7.1.e]$$

donde S es la superficie del infinito (recuérdese la sección 6.8), y \mathbf{n} es el vector unitario normal exterior a S . Dado que Ψ está normalizada, tiende a cero si $|x| \rightarrow +\infty$ con la rapidez suficiente como para hacer que la integral [7.1.e] sea nula en cada t : la justificación es muy similar a la que constituye el ejercicio 6.6, y, por tanto, la omitiremos. El resultado neto es que, tras todo ello, [7.1.b] se reduce a

$$\frac{\hbar}{2im} \int d^3\mathbf{r} \{ \Psi^* \Delta(x\Psi) - \Psi^*(\Delta\Psi)_x \} \quad [7.1.f]$$

Puesto que

$$\Delta(x\Psi) = x\Delta\Psi + 2 \frac{\partial\Psi}{\partial x} \quad [7.1.g]$$

al sustituir [7.1.g] en [7.1.f] y simplificar, se obtiene directamente [7.3.1].

7.2. Demostración de [7.4.2] a partir de [6.4.9] y [6.7.5].

El lado derecho de [7.4.1] se convierte, tras utilizar las ecuaciones [6.4.9] y [6.7.5], en

$$\frac{1}{i\hbar} \int d^3\mathbf{r} \left\{ - \left[\left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \Psi^* \right] \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi + \Psi^* (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \Psi \right] \right\} \quad [7.2.a]$$

A su vez, [7.2.a] puede reescribirse como

$$\frac{1}{i\hbar} \int d^3\mathbf{r} \Psi^* \left\{ - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \right\} \Psi \quad [7.2.b]$$

A tal efecto, se ha utilizado en [7.2.a] la identidad

$$(\Delta\Psi^*) \left(\frac{\partial\Psi}{\partial x} \right) - \Psi^* \Delta \left(\frac{\partial\Psi}{\partial x} \right) = \nabla \left[(\nabla\Psi^*) \left(\frac{\partial\Psi}{\partial x} \right) - \Psi^* \nabla \left(\frac{\partial\Psi}{\partial x} \right) \right] \quad [7.2.c]$$

y se ha procedido como en la cuestión 7.1, esto es, se ha integrado [7.2.c] sobre todo el espacio. Así, la integral del lado derecho de [7.2.c] se convierte, empleando transformaciones como la que llevó de [7.1.d] a [7.1.e], en una integral sobre la superficie del infinito, que es nula, dado que Ψ y Ψ^* se anulan si $|x| \rightarrow \infty$: la justificación es similar a la presentada en el ejercicio 6.6 y será omitida. Todo ello conduce directamente a [7.2.b]. Finalmente, dado que $\Delta[(\partial/\partial x)\Psi] = \partial/\partial x (\Delta\Psi)$ y que

$$\frac{\partial}{\partial x} (V\Psi) - V \frac{\partial}{\partial x} \Psi = \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right) \Psi$$

es inmediato comprobar que [7.2.b] implica [7.4.2].

7.3. Justificación de [7.5.6] empleando [6.4.9] y [6.7.5].

Partiendo de [7.5.4], al utilizar [6.4.9] y [6.7.5], se tiene, en el caso genérico en que V depende no sólo de \mathbf{r} sino también de t

$$\begin{aligned} \frac{d\langle H \rangle}{dt} &= \int d^3\mathbf{r} \left(\frac{\partial V(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \\ &+ \frac{1}{i\hbar} \int d^3\mathbf{r} \left\{ \Psi^* \left[\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 + V \right] \left[\left(\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 + V \right) \Psi \right] - \right. \\ &\left. - \frac{1}{i\hbar} \int d^3\mathbf{r} \left[\left(\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 + V \right) \Psi \right]^* \left[\left(\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 + V \right) \Psi \right] \right\} \end{aligned} \quad [7.3.a]$$

Tras recordar [7.5.8], empleamos la identidad

$$\begin{aligned} (\Delta\Psi^*) \left[\left(\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 + V \right) \Psi \right] - \Psi^* \Delta \left[\left(\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 + V \right) \Psi \right] &= \\ = \nabla \cdot \left\{ (\nabla\Psi^*) \left[\left(\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 + V \right) \Psi \right] - \Psi^* \nabla \left[\left(\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 + V \right) \Psi \right] \right\} \end{aligned} \quad [7.3.b]$$

Integraremos [7.3.b] en todo el espacio. El lado derecho de [7.3.b] origina, como en el paso de [7.1.d] a [7.1.e], una integral sobre la superficie del infinito, la cual es nula. Ello es debido a que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ y $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ tienden a cero si $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ (por estar Ψ normalizada) y a [7.5.1]: la justificación más detallada sigue la pauta del ejercicio 6.6 y será omitida. En consecuencia,

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \int d^3\mathbf{r} \left[\left(\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 + V \right) \Psi \right]^* \left[\left(\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 + V \right) \Psi \right] &= \\ = \frac{1}{i\hbar} \int d^3\mathbf{r} \Psi^* \left[\left(\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 + V \right) \Psi \right] & \quad [7.3.c] \end{aligned}$$

por tanto, la segunda y la tercera integral en el lado derecho de [7.3.a] se cancelan. Esto conduce a [7.5.6].

7.4. Demostración de [7.6.3] y [7.6.4] a partir de [7.6.1].

Antes de comenzar, resultará esencial revisar brevemente las propiedades de las deltas de Dirac, $\delta^{(3)}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ y $\delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Se tiene, sucesivamente

$$\delta^{(3)}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = \int \frac{d^3\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^3} \exp i(\mathbf{q} - \mathbf{q}')\mathbf{r}/\hbar \quad [7.4.a]$$

$$\int d^3\mathbf{q}' f_1(\mathbf{q}') \delta^{(3)}(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) = f_1(\mathbf{q}) \quad [7.4.b]$$

$$\delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi\hbar)^3} \exp i(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mathbf{q}/\hbar \quad [7.4.c]$$

$$\int d^3\mathbf{r}' f_2(\mathbf{r}') \delta^{(3)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = f_2(\mathbf{r}) \quad [7.4.d]$$

siendo $f_1(\mathbf{q})$ y $f_2(\mathbf{r})$ funciones arbitrarias.

Pasemos a [7.6.3]. Partiendo del lado izquierdo de dicha ecuación, utilizando [7.6.1], e intercambiando órdenes de integración, se tiene

$$\int d^3\mathbf{q} |\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)|^2 = \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}', t) \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi\hbar)^3} \exp i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')/\hbar \quad [7.4.e]$$

Es crucial recordar, en este punto, las propiedades [7.4.c] y [7.4.d] de la delta de Dirac. Así, [7.4.e] pasa a ser

$$\int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}', t) \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int d^3\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad [7.4.f]$$

Dado que Ψ está normalizada, [7.4.f] implica [7.6.3]. Pasemos a continuación a [7.6.4]. Partimos de [7.3.2], sustituimos Ψ y Ψ^* por el lado derecho de [7.6.2] y su complejo conjugado, respectivamente, intercambiamos órdenes de integración y utilizamos [7.3.4] [omitiendo $\exp(-iEt/\hbar)$]: con todo ello, se tiene

$$\langle p \rangle = \int d^3\mathbf{q}' d^3\mathbf{q} \tilde{\Psi}(\mathbf{q}', t)^* \Psi(\mathbf{q}, t) \mathbf{q} \int \frac{d^3\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^3} \exp i\mathbf{r}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')/\hbar \quad [7.4.g]$$

Las propiedades [7.4.a] y [7.4.b] de la delta de Dirac $\delta^{(3)}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ implican inmediatamente [7.6.4].

7.5.

Considérese una partícula *libre* no-relativista con masa m , y sea $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$ su función de onda en el espacio de momentos. Probaremos que $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$ evoluciona con el tiempo según la siguiente ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \frac{\mathbf{q}^2}{2m} \tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t) \quad [7.5.a]$$

y que su solución es

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t) = \tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t_0) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{\mathbf{q}^2}{2m} (t - t_0) \right] \quad [7.5.b]$$

siendo $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t_0)$ la función de onda en un cierto instante inicial t_0 . Partiendo de [6.2.15], tomaremos su transformada de Fourier; utilizaremos

$$\int d^3\mathbf{r} \exp\left(-\frac{i\mathbf{q}\mathbf{r}}{\hbar}\right) [\Delta\Psi(\mathbf{r}, t)] = \int d^3\mathbf{r} \left[\Delta \exp\left(-\frac{i\mathbf{q}\mathbf{r}}{\hbar}\right) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad [7.5.c]$$

(donde se han omitido términos de superficie, pues Ψ es normalizable) y haremos uso de

$$\Delta \exp\left(-\frac{i\mathbf{q}\mathbf{r}}{\hbar}\right) = -\frac{\mathbf{q}^2}{\hbar^2} \exp\left(-\frac{i\mathbf{q}\mathbf{r}}{\hbar}\right) \quad [7.5.d]$$

Todo ello conduce directamente a [7.5.a]. Es inmediato probar, mediante sustitución, que la solución dada en [7.5.b] satisface [7.5.a].

7.6. Demostración de la primera desigualdad [7.8.9].

Con dicho fin, introduciremos las nuevas variables

$$x' \equiv x - \langle x \rangle \quad [7.6.a]$$

$$p'_x \equiv p_x - \langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle p_x \rangle \quad [7.6.b]$$

Ellas permiten reexpresar Δx y Δp_x así:

$$(\Delta x)^2 = \int d^3\mathbf{r} x'^2 |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \langle x'^2 \rangle \quad [7.6.c]$$

$$(\Delta p_x)^2 = \int d^3\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) p'_x p'_x \Psi(\mathbf{r}, t) = \langle p_x'^2 \rangle \quad [7.6.d]$$

Sea λ un número real arbitrario y considerando la función

$$f(\lambda) = \int d^3\mathbf{r} |(x' + i\lambda p'_x) \Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad [7.6.e]$$

Justificaremos que $f(\lambda)$ es un polinomio de segundo grado en λ y hallaremos sus coeficientes y propiedades. A partir de todo ello, obtendremos, finalmente, la primera desigualdad [7.8.9]. Se tiene

$$f(\lambda) = \int d^3\mathbf{r} [(x' + i\lambda p'_x) \Psi]^* [(x' + i\lambda p'_x) \Psi] = \int d^3\mathbf{r} \Psi^*(x' - i\lambda p'_x) (x' + i\lambda p'_x) \Psi \quad [7.6.f]$$

Para llegar a la última expresión en [7.6.f], hemos tenido en cuenta que p'_x contiene $-i\hbar(\partial/\partial x)$ (véase [7.6.b]) y hemos utilizado:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \Psi^* \right] [(x' + i\lambda p'_x)\Psi] + \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} [(x' + i\lambda p'_x)\Psi] = \frac{\partial}{\partial x} \{ \Psi^* [(x' + i\lambda p'_x)\Psi] \} \quad [7.6.g]$$

Al integrar en todo el espacio tridimensional, el lado derecho de [7.6.g] se transforma en una integral sobre la superficie del infinito, que es nula por el argumento ya habitual, utilizado en las cuestiones complementarias 7.1 y 7.2. Esto justifica la última expresión en [7.6.f]. Por otra parte

$$\begin{aligned} (x' - i\lambda p'_x)(x' + i\lambda p'_x) &= x'^2 + \lambda^2 p_x'^2 + i\lambda(x'p'_x - p'_x x') = \\ &= x'^2 + \lambda^2 p_x'^2 + i\lambda(xp_x - p_x x) = x'^2 + \lambda^2 p_x'^2 + i\lambda i\hbar \end{aligned} \quad [7.6.h]$$

donde se han usado, sucesivamente, [7.6.a-b] y [7.7.3]. Así pues, la utilización en [7.6.f] de la última expresión dada en [7.6.h], junto con [7.6.c], [7.6.d] y el hecho de que Ψ está normalizada, nos lleva a

$$f(\lambda) = \lambda^2(\Delta p_x)^2 - \hbar\lambda + (\Delta x)^2 \quad [7.6.i]$$

es decir, $f(\lambda)$ es un polinomio de segundo grado en λ con los coeficientes que se indican.

Las soluciones de $f(\lambda) = 0$ son

$$\lambda_{\pm} = \frac{\hbar \pm [\hbar^2 - 4(\Delta x)^2(\Delta p_x)^2]^{1/2}}{2(\Delta p_x)^2} \quad [7.6.j]$$

Pero [7.6.e] implica directamente que $f(\lambda)$ es no negativo, $f(\lambda) \geq 0$, para todo λ real. De esto, a su vez, se sigue que las soluciones λ_{\pm} no pueden ser reales y diferentes. Así pues, es necesario que

$$\hbar^2 - 4(\Delta x)^2(\Delta p_x)^2 \leq 0 \quad [7.6.k]$$

que no es otra que la primera desigualdad [7.8.9]. Recuérdese que [7.7.3] expresa la complementariedad.

7.7. Justificación de la propiedad 5) de la sección 7.10.

La justificación de [7.9.1] y [7.5.5] implica

$$(\Delta E)^2 = \int d^3r [(H - \langle H \rangle)\Psi(\mathbf{r}, t)]^* [(H - \langle H \rangle)\Psi(\mathbf{r}, t)] \quad [7.7.a]$$

tras haber efectuado una manipulación muy similar a la explicada, en relación con [7.3.b-c], en la cuestión complementaria 7.3. Como allí, ha aparecido, además, una integral sobre la superficie del infinito: usando [6.8.6] y suponiendo que $V(\mathbf{r}, t)$ se comporta adecuadamente si $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$, dicha integral de superficie es nula y, en consecuencia, ha sido omitida. Reescribiremos [7.7.a] como

$$(\Delta E)^2 = \int d^3r |(H - \langle H \rangle)\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad [7.7.b]$$

Por hipótesis $(\Delta E)^2 = 0$ en todo t . Dado que el integrando [7.7.b] es no negativo, la única posibilidad es que se anule para todo t :

$$H\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle H \rangle\Psi(\mathbf{r}, t) \quad [7.7.c]$$

Combinando [7.7.c] con [6.4.8] se obtiene inmediatamente [7.10.1-3], con $\langle H \rangle = E$.

7.8. Generalización de la desigualdad de incertidumbre [7.6.k].

Existe una nueva desigualdad cuántica, que generaliza [7.6.k]. Se basa en una nueva función $f_4(\lambda)$, dada por el lado derecho de [7.6.e], sustituyendo $(x' + i\lambda p'_x)$ por $(x' + i\lambda p'_x)^2$. Se tiene:

- a) Es imposible que $f_4(\lambda) < 0$ si λ es real.
- b) $f_4(\lambda)$ es un polinomio de cuarto grado en λ con coeficientes reales $a'_j, j = 0, 1, \dots, 4$.

Las propiedades a) y b) implican una desigualdad cuántica entre los a'_j , que tiene consecuencias físicas. Véase R. F. Álvarez-Estrada (2010): *European Journal of Physics*, 31, 407, y *Physica Scripta*, 2013, T153, 014002, y 2014, T160, 014003. La nueva desigualdad es también consecuencia de la complementariedad.

EJERCICIOS

7.1. Justificar [7.1.8].

7.2. Demostrar [7.8.4] a partir de [7.8.2].

7.3. Sea A una variable dinámica arbitraria para un sistema microscópico formado por $N (\geq 1)$ partículas: por ejemplo, la posición, el momento o la energía cinética de una partícula, la energía total, etc. A puede ser independiente del tiempo t o depender de él. Sean $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ la función de onda normalizada, H el hamiltoniano total (véase [7.12.10]) y

$$\langle A \rangle = \int d^3r_1, \dots, d^3r_N \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) [A\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)] \quad [7.3.a']$$

el valor medio de A . Nótese que A , como operador, actúa sobre Ψ . Justificar la importante ecuación

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle \quad [7.3.b']$$

donde $[A, H] = AH - HA$. (Sugerencia: recordar las cuestiones complementarias 7.1, 7.2 y 7.3).

7.4. Considérese una partícula microscópica en una dimensión espacial sometida al potencial $V(x) = -Cx$ donde C es una constante positiva. Demostrar que la incertidumbre en el momento no cambia con el tiempo.

7.5. Sean N partículas microscópicas distintas. Formular la interpretación probabilística en el espacio de momentos.

7.6. Para una partícula microscópica en tres dimensiones con hamiltoniano total $H = (\mathbf{p}^2/2m) + V(\mathbf{r})$, demostrar que

$$[\mathbf{r}\mathbf{p}, H] = i\hbar\left(\frac{\mathbf{p}^2}{m} - \mathbf{r}\nabla_{\mathbf{r}}V\right) \quad [7.6.a']$$

7.7. Una partícula microscópica en tres dimensiones está sometida al potencial $V(\mathbf{r})$, independiente de t . Supóngase que la partícula está en un estado estacionario normalizado del tipo [7.10.1]. Justificar que

$$\left\langle\frac{\mathbf{p}^2}{m}\right\rangle = \langle\mathbf{r}\nabla_{\mathbf{r}}V\rangle \quad [7.7.a']$$

que se conoce como Teorema del Virial en Mecánica Cuántica. Nótese que el lado izquierdo de [7.7.a'] es el doble del valor medio de la energía cinética. (Sugerencia: aplicar [7.3.b'] a la variable dinámica $A = \mathbf{r}\mathbf{p}$ y recordar el ejercicio 7.6.)

7.8. El hamiltoniano de una partícula es $H = (\mathbf{p}^2/2m) + V(\mathbf{r})$. Se pide:

a) Demostrar que

$$i[H, \mathbf{r}] = -\frac{i\hbar}{m}\mathbf{p} \quad [7.8.a']$$

b) Supóngase que la partícula está en el estado estacionario normalizado [7.10.1]. Demostrar que el valor medio de \mathbf{p} en dicho estado es nulo. (Sugerencia: utilizar [7.8.a'].)

7.9. Haciendo uso del principio de incertidumbre en la forma cualitativa [3.5.4], estimar la energía del estado fundamental de una partícula sometida al potencial unidimensional

$$V(x) = V_0|x|/a \quad , \quad \text{con } a > 0$$

Compárese con el ejercicio 5.9.

7.10. Obtener los análogos de [7.3.1], [7.4.2] y [7.5.6] para una partícula microscópica en una dimensión espacial (x), sometida al potencial $V(x, t)$.

8

Estados ligados en una dimensión

Antonio Muñoz Sudupe

8.1. INTRODUCCIÓN

En este capítulo y en el siguiente se analizan algunos ejemplos unidimensionales. Su valor pedagógico, no exento de importancia práctica, los hacen imprescindibles en cualquier texto. Algunos de los ejemplos que presentamos corresponden a idealizaciones de potenciales unidimensionales reales, principalmente encontrados en el campo de la microelectrónica, y otros a reducciones a una dimensión de problemas tridimensionales. Son, en definitiva, un laboratorio teórico donde ensayar técnicas y conceptos que más adelante nos servirán para estudiar tanto modelos teóricos más generales como algunas de sus aplicaciones prácticas. La división un tanto artificial entre estados ligados y no ligados, tratados en el siguiente capítulo, se debe a un intento de acortar la longitud del material que debería figurar en un solo capítulo.

Diremos que una partícula se encuentra en un estado ligado cuando su función de onda sea autoestado correspondiente al espectro puntual (discreto) del hamiltoniano y, por tanto, de cuadrado integrable. Para dar una idea más física del concepto, pero mucho menos precisa, diremos que, en la mayoría de los casos, se trata de un estado ligado cuando la partícula clásica análoga tenga unos límites clásicos para su movimiento. Cuánticamente, veremos que tales límites no existen en el mismo sentido. Por el contrario, cuando la función de onda sea autoestado correspondiente al espectro continuo y no sea, por tanto, de cuadrado integrable, diremos que se trata de un estado no ligado. En este caso no existen límites clásicos para el movimiento de la partícula.

Dentro de este capítulo y del siguiente vamos a estudiar potenciales independientes del tiempo, así que la función de onda la supondremos factorizada

$$\Psi(x, t) = \Phi(x)e^{-iEt\hbar} \quad [8.1.1]$$

siendo Φ y Ψ normalizables en este capítulo, pero no en el siguiente. La función de onda Φ satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que, para el tipo de potenciales que analizaremos en este capítulo (salvo en el caso del oscilador armónico), es una ecuación diferencial lineal de segundo orden de la forma

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = c\Phi(x) \quad [8.1.2]$$

donde c es una constante.

Dadas unas condiciones de contorno adecuadas, esta ecuación tiene siempre solución, que, además, es única, salvo una constante global. La forma explícita de la solución es

$$\Phi(x) = \begin{cases} A_1 e^{i\sqrt{-cx}} + A_2 e^{-i\sqrt{-cx}} & \text{para } c < 0 \\ B_1 x + B_2 & \text{para } c = 0 \\ C_1 e^{\sqrt{cx}} + C_2 e^{-\sqrt{cx}} & \text{para } c > 0 \end{cases} \quad [8.1.3]$$

donde las constantes A_i , B_i , C_i con $i = 1, 2$ se determinan a partir de las condiciones de contorno.

Analicemos algunas de las características de la función de onda y de su derivada primera:

- i) Resulta físicamente razonable exigir que la función de onda sea continua.
- ii) Utilizando la ecuación de continuidad (sección 6.7)

$$\frac{\partial J}{\partial x} + \frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = 0$$

y la forma de la función de onda [8.1.1] se llega a que $|\Psi^2|$ y J sólo dependen de x , y $dJ/dx = 0$, es decir, J es constante. Como $\Phi(x)$ es continua, la derivada primera $d\Phi/dx$ debe ser continua para garantizar la constancia de J .

En el caso de funciones de onda de estados ligados exigiremos, además, las condiciones:

- a) Comportamiento adecuado en el infinito:

$$\Phi(x) \rightarrow 0 \quad \text{cuando } x \rightarrow \pm\infty$$

para que Φ sea una función de cuadrado integrable.

- b) La función de onda debe ser normalizable, de norma uno,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Phi(x)|^2 = 1 \quad [8.1.4]$$

Estas condiciones nos permitirán determinar la función de onda salvo una fase físicamente irrelevante, pues la medida de ningún observable va a depender de la misma.

8.2. POZO DE PAREDES INFINITAS

Consideremos una partícula de masa m en un potencial (representado en la figura 8.1) que es constante, V_0 , en la región $(-a/2, a/2)$ y que diverge para $|x| > a/2$.

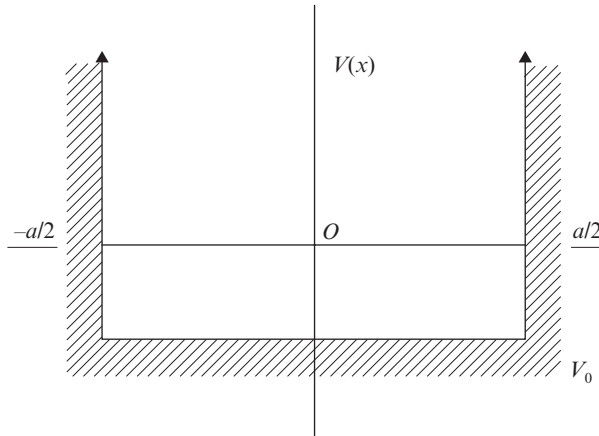


Figura 8.1. Pozo de paredes infinitas.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este sistema es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + V(x)\Phi(x) = E\Phi(x) \quad [8.2.1]$$

siendo E la energía de la partícula. Cuando x está comprendida en el intervalo $(-a/2, a/2)$ la ecuación [8.2,1] se puede escribir como

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\Phi(x) \quad [8.2.2]$$

que tiene por soluciones ($E > V_0$)

$$\Phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad [8.2.3]$$

donde $k = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$. Obsérvese que no se ha considerado el caso $E = V_0$ al resolver la ecuación [8.2.2], pues, como veremos más adelante, conduce a una función de onda idénticamente nula.

Como mencionamos en la sección 8.1, exigimos que tanto las soluciones de [8.2.1] como sus derivadas sean funciones continuas. En el intervalo $(-a/2, a/2)$ este requisito se cumple obviamente; sin embargo, la divergencia del potencial en la región $|x| > a/2$ hace que no podamos exigir la continuidad de la derivada de la función de onda.

Clásicamente, la región $|x| \geq a/2$ es inaccesible, cuánticamente es preciso analizar la ecuación de Schrödinger. Veamos que la función de onda es necesariamente nula en esa región. Supongamos que el potencial fuera finito U_0 y mayor que la energía E ; más tarde

haremos tender U_0 a ∞ . La ecuación análoga a la [8.2.2], en este caso, tendrá como soluciones combinaciones de exponenciales reales de la forma $e^{\pm kx}$ con $k = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$, la condición de contorno $\Phi(x) \rightarrow 0$ cuando $x \rightarrow \pm\infty$ nos permite elegir en cada caso la solución adecuada. Resulta claro, a partir del análisis anterior, que cuánticamente existe una probabilidad no nula de encontrar la partícula en la región clásicamente prohibida, pues $|\Phi(x)|^2$ es exponencialmente pequeño, pero no nulo. Esta probabilidad decrece cuando la diferencia entre la energía y el potencial aumenta y cuanto más penetra la partícula en el interior de la región mencionada.

Si tomamos ahora el límite en el que $U_0 \rightarrow \infty$ con E constante, k diverge y cuánticamente no es posible encontrar la partícula en esa región, pues su función de onda es nula $\Phi(x) = 0$ cuando $|x| \geq a/2$. Obviamente, no podemos añadir la continuidad de la derivada primera $d\Phi/dx$ en $x = \pm a/2$.

Impongamos que la solución $\Phi(x)$ sea una función continua; esto nos proporciona las ecuaciones

$$\begin{aligned} Ae^{ika/2} + Be^{-ika/2} &= 0 & x = a/2 \\ Ae^{-ika/2} + Be^{ika/2} &= 0 & x = -a/2 \end{aligned} \quad [8.2.4]$$

Para que este sistema homogéneo tenga soluciones distintas de la idénticamente nula ($A = B = 0$), debe verificarse,

$$e^{ika} - e^{-ika} = 2i \operatorname{sen} ka = 0 \quad [8.2.5]$$

Dada una anchura fija a para el pozo, no todos los valores de k , y, por tanto, no todas las energías, verifican la ecuación anterior; [8.2.5] es la condición de cuantificación para las energías de los estados estacionarios en el pozo de paredes infinitas, que son,

$$ka = n\pi$$

Por tanto

$$E_n - V_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 \quad [8.2.6]$$

donde $n = 1, 2, \dots$. Nótese que se ha excluido el caso $n = 0$, es decir, $E = V_0$, pues la condición de continuidad para la función de onda en este caso conduce a la solución idénticamente nula $\Phi(x) = 0$, que no es aceptable.

La energía mínima en [8.2.6] es distinta de V_0 y se llama *energía de punto cero*. Representa un fenómeno puramente cuántico, íntimamente relacionado con el principio de incertidumbre, como muestra el siguiente razonamiento. La incertidumbre en la posición de la partícula es del orden de la anchura del pozo $\Delta x \sim a$ y, por tanto, la incertidumbre en el momento es, al menos, $\Delta p \sim \hbar/a$, lo que nos proporciona un mínimo para la energía del orden de $\Delta E \sim \hbar^2/ma^2$.

La ecuación [8.2.4] nos permite encontrar las autofunciones salvo una constante global, que determinamos parcialmente mediante la condición de normalización [8.1.4], que en este caso es

$$|A|^2 + |B|^2 = \frac{1}{a} \quad [8.2.7]$$

Esta condición especifica la función de onda, salvo fase. La elección más común suele ser

$$A = \frac{-i}{\sqrt{2a}} e^{ika/2}, \quad B = \frac{i}{\sqrt{2a}} e^{-ika/2} \quad [8.2.8]$$

luego las autofunciones son

$$\Phi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{2/a} \operatorname{sen} n\pi(x/a + 1/2) & |x| \leq a/2 \\ 0 & |x| \geq a/2 \end{cases} \quad n = 1, 2, \dots \quad [8.2.9]$$

En la figura 8.2 se han representado unos pocos niveles de energía y sus correspondientes funciones de onda. Como puede verse, las autofunciones son alternativamente pares e impares, con un número de nodos o ceros que crece con el orden del nivel de energía. Así, el nivel fundamental no tiene ningún nodo, el primer excitado tiene uno, el segundo excitado dos, etc. De hecho, puede probarse que, bajo condiciones muy generales para el potencial, la función de onda del n -simo estado excitado tiene n nodos. Un argumento cualitativo en favor de que la energía aumenta con el número de nodos de la función de onda es el siguiente: la curvatura de la función de onda es mayor cuantas más veces se anule Φ . Por tanto, la derivada segunda, en valor absoluto, crece. Como la energía cinética es positiva, el signo de $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2}$ es el mismo que el de Φ en cada punto,

de aquí se sigue que la energía cinética aumenta con el número de nodos. Para un potencial dado se tiene entonces que si Φ_1 tiene n_1 nodos y Φ_2 tiene n_2 con $n_1 > n_2$, entonces la energía en el estado Φ_1 es mayor que en el estado Φ_2 .

Es fácil entender por qué la paridad de las funciones es fija. Al ser el potencial par $V(x) = V(-x)$ para el pozo de paredes infinitas, el hamiltoniano H también es invariante bajo el cambio $x \rightarrow -x$, pues el término de energía cinética es, asimismo, par. Por tanto, si $\Phi(x)$ es solución de $H(x)\Phi(x) = E\Phi(x)$, entonces $\Phi(-x)$ es también solución y, además, lo es con la misma energía. Como en una dimensión los estados ligados son no degenerados $\Phi(x)$ y $\Phi(-x)$ difieren, a lo sumo, en una fase, luego, $\Phi(x) = \lambda\Phi(-x)$ con $|\lambda| = 1$. Como al cambiar $-x \rightarrow x$ la función de onda adquiere de nuevo la misma fase, ésta al cuadrado debe ser la unidad, es decir, $\Phi(x) = \lambda^2\Phi(x)$, de donde obtenemos necesariamente $\lambda = \pm 1$.

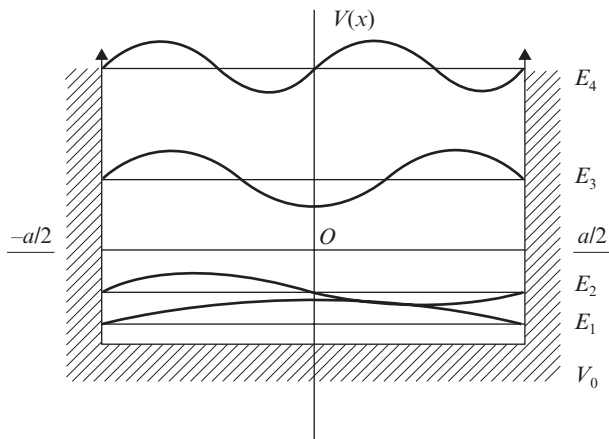


Figura 8.2. Niveles de energía y autofunciones en el pozo cuadrado infinito.

8.3. POZO CUADRADO

Considérese ahora el pozo de potencial representado en la figura 8.3 y descrito por

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{para } |x| \leq a/2 \\ 0 & \text{para } |x| \geq a/2 \end{cases} \quad [8.3.1]$$

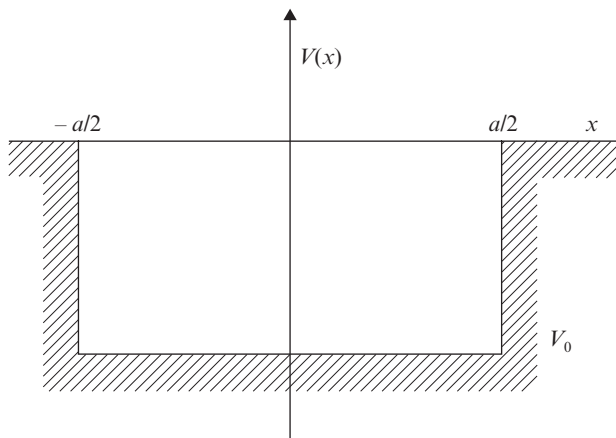


Figura 8.3. Pozo de potencial cuadrado.

La ecuación de Schrödinger es distinta según la zona de potencial que consideremos,

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + V_0\Phi(x) &= E\Phi(x) \quad \text{para } |x| \leq a/2 \\
 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} &= E\Phi(x) \quad \text{para } |x| \geq a/2
 \end{aligned}
 \tag{8.3.2}$$

Como estamos interesados en los estados ligados, sólo consideraremos las soluciones de [8.3.2] con energía negativa y $E > V_0$; por tanto, las funciones de onda con el comportamiento adecuado en el infinito son

$$\Phi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1 x} + A_2 e^{-ik_1 x} & |x| \leq a/2 \\ B_1 e^{k_2 x} & x \leq -a/2 \\ B_2 e^{-k_2 x} & x \geq a/2 \end{cases}
 \tag{8.3.3}$$

donde $k_1 = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$ y $k_2 = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$.

Como la ecuación [8.3.2] es invariante bajo el cambio $x \rightarrow -x$, sus soluciones deben tener paridad definida como discutimos en la sección anterior, con lo que

$$A_1 = \pm A_2 \quad \text{y} \quad B_1 = \pm B_2
 \tag{8.3.4}$$

Las condiciones de continuidad de la función y de su derivada en $x = a/2$ son, según sea estado par o impar

$$\begin{aligned}
 A_1(e^{ik_1 a/2} \pm e^{-ik_1 a/2}) &= B_2 e^{-k_2 a/2} \\
 ik_1 A_1(e^{ik_1 a/2} \mp e^{-ik_1 a/2}) &= -k_2 B_2 e^{-k_2 a/2}
 \end{aligned}
 \tag{8.3.5}$$

Para que este sistema homogéneo tenga solución no nula se debe verificar

$$\begin{aligned}
 k_2 &= k_1 \operatorname{tg} k_1 a/2 \quad (\text{pares}) \\
 -k_2 &= k_1 \operatorname{ctg} k_1 a/2 \quad (\text{impares})
 \end{aligned}
 \tag{8.3.6}$$

Más adelante veremos dos métodos de resolución aproximada de estas ecuaciones trascendentes. Por el momento reseñaremos que la correspondiente a las soluciones con función de onda par siempre tiene, al menos, una solución, lo que no se verifica en la otra.

Utilizando las ecuaciones [8.3.6] podemos determinar las constantes que aparecen en la función de onda [8.3.3], salvo una constante de normalización. Nuestra elección es

$$\begin{aligned}
 A_1 = N_p/2 \quad B_2 = B_1 = N_p \cos(k_1 a/2) e^{k_2 a/2} & \quad (\text{pares}) \\
 A_1 = N_i/(2i) \quad B_2 = -B_1 = N_i \operatorname{sen}(k_1 a/2) e^{k_2 a/2} & \quad (\text{impares})
 \end{aligned}
 \tag{8.3.7}$$

por lo que podemos escribir las funciones de onda como

$$\Phi_p(x) = \begin{cases} N_p \cos(k_1 a/2) \exp[k_2(x + a/2)] & x \leq -a/2 \\ N_p \cos(k_1 x) & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ N_p \cos(k_1 a/2) \exp[-k_2(x - a/2)] & x \geq a/2 \end{cases} \quad [8.3.8]$$

para las funciones pares, y

$$\Phi_i(x) = \begin{cases} -N_i \sin(k_1 a/2) \exp[k_2(x + a/2)] & x \leq -a/2 \\ N_i \sin(k_1 x) & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ N_i \sin(k_1 a/2) \exp[-k_2(x - a/2)] & x \geq a/2 \end{cases} \quad [8.3.9]$$

para las impares.

En la figura 8.4 se han representado los niveles de energía y sus correspondientes autofunciones para unas dimensiones del pozo dadas. Las constantes de normalización N_p y N_i se pueden determinar, salvo una fase global.

$$N_p = N_i = \sqrt{\frac{k_2}{ak_2/2 + 1}}$$

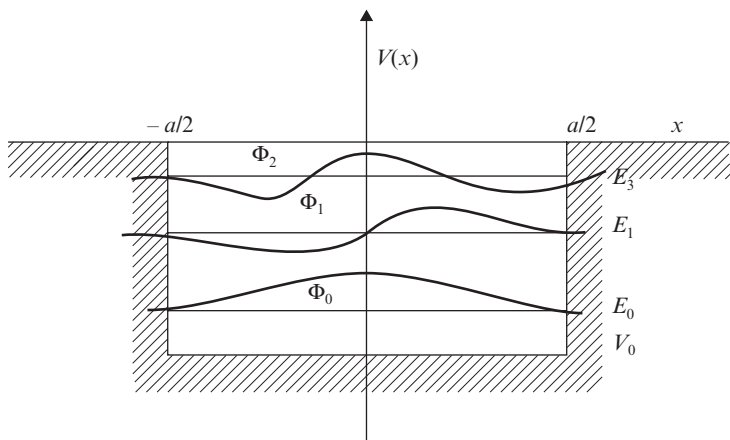


Figura 8.4. Niveles de energía y autofunciones del pozo cuadrado.

Solución de las ecuaciones transcendentales [8.3.6]

Presentamos dos métodos de solución de las ecuaciones transcendentales [8.3.6], uno gráfico y otro iterativo. El primero nos permite localizar rápidamente la región donde se

encuentra la solución buscada, si es que ésta existe, con una precisión no muy buena: en general, un par de cifras significativas. El segundo es un esquema iterativo fácilmente implementable en una calculadora de bolsillo que permite, en los casos que vamos a estudiar, obtener la solución con una precisión típica de seis o siete cifras significativas. Por supuesto, existen otros métodos numéricos, como el de Newton, por ejemplo, que convergen más rápido que el que presentamos. Su implementación es, no obstante, algo más complicada.

Teniendo en cuenta sencillas relaciones trigonométricas, las ecuaciones [8.3.6] pueden escribirse como

$$\begin{aligned} \cos k_1 a/2 &= \pm k_1/v \quad (\text{pares}) \\ \text{sen } k_1 a/2 &= \pm k_1/v \quad (\text{impares}) \end{aligned} \quad [8.3.10]$$

siendo $v = \sqrt{-2mV_0/\hbar^2}$. Para hacer más comprensible la discusión, resolveremos las ecuaciones anteriores para $av = 8$.

Método gráfico

Representamos gráficamente las funciones que aparecen en el miembro de la izquierda en [8.3.10] y las que aparecen en el miembro de la derecha, en la figura 8.5. Los cuatro puntos de corte de las cuatro gráficas entre sí x_i , $i = 1, 2, 3, 4$ pueden ser soluciones de [8.3.10]. No obstante, al pasar de las ecuaciones [8.3.6] a las [8.3.10] se han incluido soluciones espurias como x_2 , pues la tangente en este punto será negativa, cuando las soluciones de [8.3.6] tienen siempre tangente positiva. Por tanto, en el caso numérico elegido, el pozo tiene tres estados ligados, correspondientes a los puntos x_1 , x_3 y x_4 .

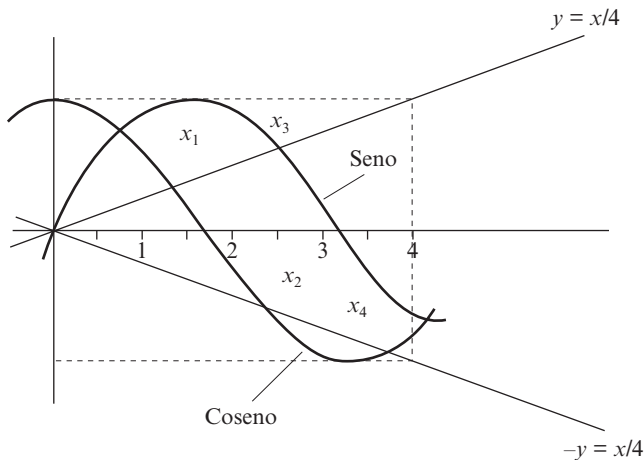


Figura 8.5. Solución gráfica de las ecuaciones trascendentes que proporcionan las energías del pozo cuadrado de dimensiones $av = 8$.

Los puntos x_1 y x_4 corresponden a estados con función de onda par, y el punto x_3 a un estado con función impar. A partir de la figura 8.5 obtenemos una información aproximada de las soluciones de [8.3.10], así $x_1 \sim 1$, $x_3 \sim 2$ y $x_4 \sim 3$.

Método iterativo

Para calcular con mayor precisión sus energías, recurriremos a un método iterativo. Dada una ecuación del tipo $x = f(x)$, con una función f contractiva, es decir, que verifica $|f(x_i) - f(x_j)| \leq \kappa |x_i - x_j|$ con $\kappa < 1$ para puntos x_i, x_j próximos a la solución, el esquema iterativo

$$x_n = f(x_{n-1}) \quad [8.3.11]$$

converge al punto fijo $x^* = f(x^*)$. La convergencia del método puede entenderse fácilmente, pues al ser contractiva, se tiene

$$|f(x_n) - f(x_{n-1})| = |x_{n+1} - x_n| < |x_n - x_{n-1}|$$

Para un n suficientemente grande, podemos hacer la diferencia entre un punto y el siguiente tan pequeña como queramos.

En el ejemplo práctico que estamos considerando las funciones no son contractivas en el intervalo de interés, pues su derivada es mayor que uno en un entorno del punto fijo. Nótese que las transformaciones contractivas tienen derivada menor que uno. Para conseguir que las funciones sean contractivas, invertimos las ecuaciones [8.3.10], con lo que se convierten en

$$\begin{aligned} x &= \pm \arccos \frac{x}{4} \\ x &= \pm \arcsen \frac{x}{4} \end{aligned} \quad [8.3.12]$$

Desafortunadamente, las funciones inversas del seno y coseno no son univaluadas y la calculadora elige en general la determinación $(-\pi, \pi)$, lo que requiere modificar ligeramente en algunos casos el esquema iterativo.

El punto x_1^* en la figura 8.5 es fácil de calcular. Si partimos de $x_0 = 1$, obtenemos $x_1 = \arccos(x_0/4) = 1.32$, $x_2 = \arccos(x_1/4) = 1.26$, etc., hasta obtener el punto fijo $x_1^* = \arccos(x_1^*/4) = 1.2523532$.

Pese a que el punto x_2^* no corresponde a un estado ligado, lo calcularemos para hacer más comprensible el método iterativo. Como puede observarse en la figura 8.5, el punto buscado es el punto fijo de la iteración

$$x_{n+1} = -\arccos(x_n/4) + \pi$$

partiendo del punto inicial $x_0 = 2$, por ejemplo, obtenemos $x_1 = 2.09$, $x_2 = 2.12$, $x_3 = 2.13$, etcétera, hasta $x_2^* = 2.1333322$. Como ya hemos reiterado, la tangente de este punto es negativa, por lo que no es solución de [8.3.6].

El punto x_3^* se calcula con el esquema

$$x_{n+1} = -\arcsen(x_n/4) + \pi$$

obteniéndose como punto fijo $x_3^* = 2.4745767$.

Por último el punto x_4^* se calcula a partir de

$$x_{n+1} = \arccos(x_n/4) + \pi$$

obteniéndose $x_4^* = 3.5953048$.

Como ya mencionamos, la ecuación [8.3.6] para los estados con función de onda par siempre tiene solución, pues, como puede comprobarse fácilmente en la figura 8.5, la función coseno siempre se corta con una recta que pasa por el origen sea cual sea su pendiente, mientras que la función seno no lo hace para pendientes iguales o superiores a uno. Nótese que la pendiente de la recta es una medida de la profundidad y anchura del pozo.

El número de estados ligados puede calcularse a partir de la representación gráfica de las ecuaciones trascendentes [8.3.10], por cada $\pi/2$ que se avanza en las x a partir de $x = \pi/2$, las rectas $y = \pm x/av$ tienen dos nuevos puntos de corte, de los que uno es siempre una solución espúrea, como la x_2^* en el ejemplo anterior, de las ecuaciones originales [8.3.6]. Además, el primer punto de corte, correspondiente al estado fundamental, existe siempre como acabamos de ver. Por todo ello el número de estados ligados puede escribirse como

$$N = \left[1 + \frac{av/2}{\pi/2} \right] \quad [8.3.13]$$

siendo $[\cdot]$ la función parte entera.

8.4. EL OSCILADOR ARMÓNICO UNIDIMENSIONAL

Éste es, sin lugar a dudas, el ejemplo más importante de los que pueden presentarse en una dimensión. Existen multitud de fenómenos en física cuántica y clásica que pueden ser descritos, con mayor o menor aproximación, mediante un potencial del tipo

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 \quad [8.4.1]$$

Las vibraciones de una molécula diatómica son un ejemplo de un sistema físico descrito por un potencial de este tipo. Por otra parte, el hecho de ser uno de los escasos ejemplos con relevancia física, que es, además, exactamente resoluble, lo hace extraordinariamente interesante como primera aproximación a sistemas más complejos.

La ecuación de Schrödinger para el potencial [8.4.1] es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2\Phi(x) = E\Phi(x) \quad [8.4.2]$$

Presentaremos dos métodos de resolución de esta ecuación: uno analítico y otro algebraico.

Método analítico

La ecuación [8.4.2], en el límite asintótico $|x| \rightarrow \infty$, puede escribirse de manera

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2\Phi(x) \simeq 0 \quad [8.4.3]$$

que tiene como solución la gaussiana $\Phi(x) \propto \exp(-\alpha^2 x^2/2)$ (véase figura 8.6), donde $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ y $\omega = \sqrt{k/m}$. Al igual que en los ejemplos unidimensionales anteriores, las autofunciones tienen paridad definida, es decir, son alternativamente pares e impares con un número de nodos creciente, siendo par y sin nodos la correspondiente al estado fundamental.

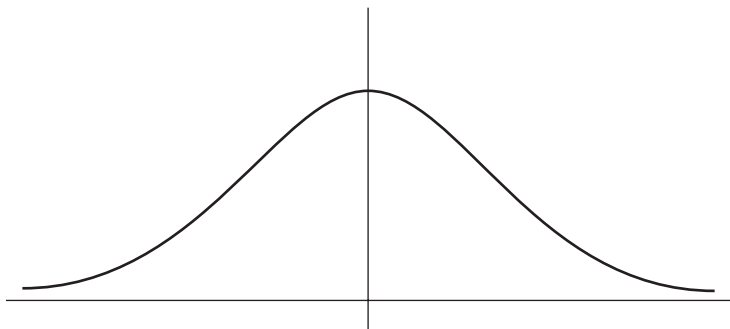


Figura 8.6. Representación gráfica de la gaussiana, función de onda del estado fundamental del oscilador armónico.

Una forma de conseguir funciones con la paridad adecuada y el comportamiento correcto en $x \rightarrow \infty$ es multiplicar la gaussiana por un polinomio, par o impar, de tal forma

que se satisfaga la ecuación [8.4.2]. Para el estado fundamental ensayamos la siguiente función

$$\Phi_0(x) = N_0 e^{-\alpha^2 x^2/2} \quad [8.4.4]$$

donde N_0 es una constante. Imponiendo que [8.4.4] esté correctamente normalizada, podemos determinar N_0 , salvo una fase irrelevante como

$$N_0 = (\alpha/\sqrt{\pi})^{1/2}$$

Sustituyendo [8.4.4] en la ecuación [8.4.2], obtenemos la energía del estado fundamental, que resulta ser, $E_0 = \hbar\omega/2$.

Para el primer estado excitado proponemos como autofunción $\Phi_1(x)$ el producto de un polinomio de primer grado con la gaussiana, es decir,

$$\Phi_1(x) = N_1(a_1x + b_1)e^{-\alpha^2 x^2/2} \quad [8.4.5]$$

Los coeficientes a_1 y b_1 se determinan imponiendo que [8.4.5] sea solución de [8.4.2]. De este modo se encuentra que $b_1 = 0$ y que la energía del primer estado excitado vale $E_1 = 3\hbar\omega/2$. Sólo resta normalizar la función de onda, obteniéndose,

$$\Phi_1(x) = \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} 2\alpha x e^{-\alpha^2 x^2/2} \quad [8.4.6]$$

Para el segundo estado excitado utilizamos un polinomio de segundo grado, y así sucesivamente. La autofunción n -sima, convenientemente normalizada, es de la forma

$$\Phi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{n!2^n\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2} \quad [8.4.7]$$

donde H_n es un polinomio de grado n y paridad $(-1)^n$, que se denomina n -simo polinomio de Hermite (véase apéndice C). Los polinomios de orden más bajo, algunos de los que ya hemos calculado, son

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = 2 - 4x^2, \quad H_3(x) = 12x - 8x^3$$

que, como puede observarse en la figura 8.7, son alternativamente pares e impares.

La energía del estado n -simo [8.4.7] es

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad [8.4.8]$$

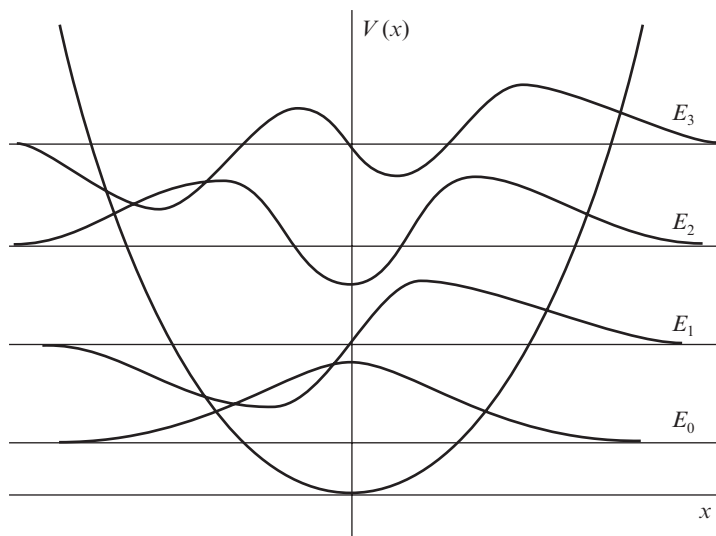


Figura 8.7. Representación gráfica de los primeros niveles de energía y sus autofunciones correspondientes para los estados del oscilador armónico.

Método algebraico

Introduciremos unos operadores nuevos, llamados de *creación* y *destrucción* a^\dagger , a que son ampliamente utilizados, convenientemente generalizados, en diversos campos de la física, como, por ejemplo, en teoría cuántica de campos.

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha x + \frac{d}{d(\alpha x)} \right) \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha x - \frac{d}{d(\alpha x)} \right) \quad [8.4.9]$$

El conmutador de estos operadores vale $[a, a^\dagger] = 1$.

Introduzcamos, además, el operador *número* definido como

$$N = a^\dagger a \quad [8.4.10]$$

El hamiltoniano del oscilador [8.4.2] puede escribirse sin dificultad en términos de este operador como

$$H = \hbar \omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad [8.4.11]$$

El miembro de la derecha de la expresión anterior recuerda a las energías de los estados ligados [8.4.8] calculadas previamente.

Probaremos que los autovalores del operador número son los enteros no negativos. Utilizaremos aquí la notación de Dirac para los autoestados (véase la sección 7.13 y el apéndice C).

Sea $|n\rangle$ el autovector normalizado $\langle n|n\rangle = 1$ del operador N correspondiente al autovalor n , es decir,

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad [8.4.12]$$

demostraremos que $a|n\rangle$ ($n \neq 0$) y $a^\dagger|n\rangle$ son autovectores de N ; para ello basta con aplicar N sobre los mismos. Encontramos

$$\begin{aligned} Na|n\rangle &= (aN - a)|n\rangle = (n - 1)a|n\rangle \\ Na^\dagger|n\rangle &= (a^\dagger N + a^\dagger)|n\rangle = (n + 1)a^\dagger|n\rangle \end{aligned} \quad [8.4.13]$$

donde hemos hecho uso de los conmutadores $[N, a] = -a$ y $[N, a^\dagger] = a^\dagger$.

Hemos probado que $a|n\rangle$ ($n \neq 0$) y $a^\dagger|n\rangle$ son proporcionales a los autovectores $|n - 1\rangle$ y $|n + 1\rangle$, respectivamente. Las constantes de proporcionalidad son fácilmente calculables a partir de

$$\begin{aligned} n &= \langle n|N|n\rangle = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = \|a|n\rangle\|^2 \\ n + 1 &= \langle n|(N + 1)|n\rangle = \langle n|aa^\dagger|n\rangle = \|a^\dagger|n\rangle\|^2 \end{aligned} \quad [8.4.14]$$

Estas expresiones determinan las constantes buscadas, salvo una fase. La elección más común es elegir dichas constantes como la unidad, es decir,

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n}|n - 1\rangle \quad (n \neq 0) \\ a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n + 1}|n + 1\rangle \end{aligned} \quad [8.4.15]$$

A la vista de estas expresiones resulta evidente el origen de los nombres *destrucción* y *creación*. El operador a destruye un cuanto pasando del $|n\rangle$ al $|n - 1\rangle$ y a^\dagger crea un cuanto pasando, a la inversa, de $|n\rangle$ a $|n + 1\rangle$.

Aún no hemos respondido a una pregunta fundamental: ¿cuáles son los valores posibles para n ? Veamos que son los enteros no negativos.

A partir de las ecuaciones [8.4.14] y de las propiedades de la norma de un vector, resulta claro que $n \geq 0$ y que $a|0\rangle = 0$. Además, n debe ser entero, pues si no, sería posible elegir un k entero tal que:

- a) Al actuar con el operador a^k sobre $|n\rangle$ obtuviéramos el vector $|n'\rangle$ con $n' = n - k > 0$ para un k suficientemente grande.
- b) Al actuar con a^{k+1} sobre $|n\rangle$ resultase $|n' - 1\rangle$ con $n' - 1 < 0$, lo que es absurdo.

En resumen hemos probado que los autoestados de [8.4.11] son los vectores $|n\rangle$ con autovalores $(n + 1/2)\hbar\omega$, siendo $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

$$H|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle \quad [8.4.16]$$

Todos los estados pueden ser generados a partir del fundamental $|0\rangle$ usando a^\dagger

$$(a^\dagger)^n|0\rangle = \sqrt{n!}|n\rangle \quad [8.4.17]$$

Relacionamos por último la solución algebraica con la analítica calculando las funciones de onda correspondientes a los autovectores $|n\rangle$. Para ello reescribimos la ecuación algebraica $a|0\rangle = 0$ utilizando la expresión [8.4.9]

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha x - \frac{d}{d(\alpha x)}\right)\Phi_0(x) = 0$$

donde la solución buscada $\Phi_0(x)$ es la función de onda del estado fundamental, que convenientemente normalizada es

$$\Phi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

Usando este resultado y [8.4.17] es posible encontrar la función de onda correspondiente a cualquier estado excitado. Así, la función de onda del estado n -simo será

$$\Phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha x - \frac{d}{d(\alpha x)} \right) \right]^n \Phi_0(x)$$

Como aplicaciones del método introducido podemos calcular el producto $\Delta x \Delta p$ para los estados propios del oscilador armónico. Invirtiendo las definiciones de los operadores a y a^\dagger [8.4.9] para expresar x y p en términos de los mismos, se tiene

$$x = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}(a + a^\dagger) \quad p = \frac{-i\hbar\alpha}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger) \quad [8.4.18]$$

La incertidumbre en la posición en el estado n -simo será entonces

$$\Delta_n x = \sqrt{\langle n|x^2|n\rangle - \langle n|x|n\rangle^2} = \sqrt{\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{m\omega}}$$

donde hemos utilizado las relaciones [8.4.15]. Análogamente, se calcula la incertidumbre en el momento como

$$\Delta_n p = \sqrt{\langle n | p^2 | n \rangle - \langle n | p | n \rangle^2} = \sqrt{\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar m \omega}$$

Por tanto, el producto de las incertidumbres vale

$$\Delta_n x \Delta_n p = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar$$

Nótese que para el estado fundamental $n = 0$ se alcanza el límite impuesto por el principio de Heisenberg a la precisión en la medida simultánea de x y p , por este motivo se dice que el estado fundamental es un *paquete mínimo*. En el capítulo siguiente utilizaremos en un contexto distinto el que la gaussiana, función de onda del estado fundamental del oscilador armónico, sea un paquete mínimo.

EJERCICIOS

8.1. Considérese un electrón en un pozo de paredes infinitas (véase figura 8.1). Calcúlese la energía del estado fundamental para las siguientes anchuras: i) $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$, y ii) 100 fm ($1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$).

8.2. Determinar la condición que deben satisfacer las energías permitidas en el potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ \alpha x & x > 0 \end{cases}, \quad \alpha > 0$$

Expresar para ello la ecuación de Schrödinger en espacio de momentos (véase el ejercicio 9.6).

8.3. Demostrar que la función de ondas solución de la ecuación de Schrödinger para el potencial $V(x) = \lambda \delta(x)$, tiene derivada discontinua. Escribir la función de ondas y determinar las energías de los estados ligados.

8.4. Dos partículas de masas m_1 y m_2 obligadas a moverse en una dimensión, interaccionan a través de un potencial

$$V(x_1, x_2) = a(x_1 - x_2) + b(x_1 - x_2)^2 \quad \text{con } b \geq 0$$

Determinar las energías propias y las funciones de onda correspondientes al sistema de las dos partículas.

8.5. Calcúlense las energías de los estados ligados de un electrón por el potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ V_0 & 0 < x \leq L \\ 0 & x > L \end{cases}$$

para el caso $V_0 = 10 \text{ eV}$, $L = 4 \text{ \AA}$.

8.6. Determinése el producto $\Delta x^2 \Delta p^2$ para los estados ligados del oscilador armónico.

8.7. Determinése el producto $\Delta x \Delta p$ para los estados ligados del pozo infinito.

8.8. Calcúlense las evoluciones de los valores medios de los observables x y p para un oscilador armónico.

8.9. Discutir cualitativamente la forma de la función de onda del n -simo estado excitado del oscilador armónico ($n \gg 1$).

9

Coeficientes de reflexión y transmisión

Antonio Muñoz Sudupe

9.1. INTRODUCCIÓN

En este capítulo se estudian los procesos de colisión o dispersión en una dimensión espacial. Los experimentos de colisión tridimensionales son desde hace años la principal fuente de información de que se dispone en el estudio de las partículas elementales. Una introducción a la formulación cuántica de estos sistemas tridimensionales puede verse en el capítulo 18. En una dimensión aparecen algunos conceptos fundamentales de gran importancia teórica y práctica. Por ejemplo, el microscopio de efecto túnel, la desintegración α de los núcleos atómicos, los diodos túnel, etc., pueden ser interpretados a partir de los resultados que obtendremos en una dimensión.

Las funciones de onda que aparecen en este capítulo pertenecen, en general, al espectro continuo del hamiltoniano y son, por tanto, no normalizables. No es posible entonces, una interpretación probabilística del módulo al cuadrado de dichas funciones. En este tipo de situaciones la corriente de probabilidad, introducida en las secciones 6.8-6.9 resulta de gran utilidad. Recordemos que la corriente de probabilidad se define en una dimensión como

$$J = \frac{\hbar}{2mi} \left[\Phi^* \frac{d}{dx} \Phi - \Phi \frac{d}{dx} \Phi^* \right] \quad [9.1.1]$$

Para comprender su significado, calculemos cuánto vale [9.1.1] para una onda plana $\Phi(x) = A \exp(ikx)$, solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para una partícula libre de masa m . El resultado de un sencillo cálculo proporciona $J = |A|^2 \hbar k / m$, que puede interpretarse como el producto de la velocidad de la partícula de masa m por la amplitud al cuadrado (intensidad) de la onda plana. Es decir, la corriente de la onda plana representa el flujo de partículas.

9.2. ESCALÓN DE POTENCIAL

Consideremos el potencial representado en la figura 9.1, que corresponde al experimentado por un electrón cerca de la superficie de un metal.

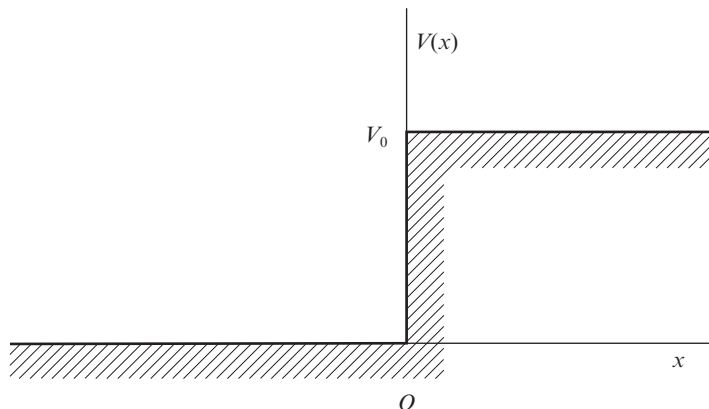


Figura 9.1. Escalón de potencial.

Caso $E > V_0$

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo serán en este caso, de acuerdo con [8.1.13],

$$\Phi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_2 e^{-ik_1 x} \quad x < 0 \quad [9.2.1]$$

$$\Phi_2(x) = B_1 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \quad x > 0 \quad [9.2.2]$$

donde $k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ y $k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$. Imponiendo la continuidad de la función de onda y de su derivada en $x = 0$, obtenemos el siguiente sistema homogéneo:

$$\begin{aligned} A_1 + A_2 &= B_1 + B_2 \\ k_1(A_1 - A_2) &= k_2(B_1 - B_2) \end{aligned} \quad [9.2.3]$$

De las infinitas soluciones del sistema anterior estudiaremos aquellas con un significado físico preciso. De acuerdo con la interpretación dada en la sección anterior a la corriente de probabilidad para una onda plana, podemos imaginar el siguiente experimento: un haz de partículas de velocidad $\hbar k_1/m$ incide sobre el escalón de potencial. Al ser una velocidad positiva, entenderemos que el haz se propaga de izquierda a derecha desde $x = -\infty$. Elegiremos la intensidad de este haz como la unidad; por tanto, haremos $A_1 = 1$ en [9.2.3]. Como resultado de la colisión del haz de proyectiles con el escalón de potencial se formarán dos nuevos haces de partículas, uno que seguirá propagándose hacia la derecha, al que llamaremos haz transmitido, y otro que se reflejará en el escalón propagándose hacia la izquierda, al que llamaremos haz reflejado. Desde un punto de vista físico re-

sulta evidente que en la región $x > 0$ no puede haber partículas propagándose hacia la izquierda y, por tanto, haremos $B_2 = 0$ en [9.2.3]. La solución única que así resulta de [9.2.3] conduce a

$$\begin{aligned}\Phi_1(x) &= e^{ik_1x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1x} & x < 0 \\ \Phi_2(x) &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2x} & x > 0\end{aligned}\quad [9.2.4]$$

La función de onda que acabamos de calcular es, en la región $x < 0$, la superposición de dos ondas planas. La primera de ellas es un autoestado del operador momento con autovalor $p_1 = \hbar k_1$ y puede interpretarse como una partícula que se desplaza desde $x = -\infty$ hacia la derecha. La segunda, que tiene una amplitud menor que la unidad, corresponde, de acuerdo con la misma interpretación, a una partícula que se desplaza desde $x = 0$ hacia la izquierda y se entiende como la onda reflejada en el escalón de potencial. En la región $x > 0$ la función de onda corresponde a la onda transmitida que se propaga desde $x = 0$ hacia $x = +\infty$.

Se definen los coeficientes de reflexión R y transmisión T como

$$R = \frac{J_r}{J_i} \quad T = \frac{J_t}{J_i}$$

siendo J_r la corriente de probabilidad reflejada, J_t la transmitida y J_i la corriente de probabilidad incidente.

En la región $x > 0$ la corriente J_1 se obtiene al aplicar [9.1.1] a la primera ecuación en [9.2.4], obteniéndose formalmente $J_1 = J_i - J_r + J_{\text{int}}$. Un sencillo cálculo muestra que el término de interferencia J_{int} se anula, con lo que obtenemos

$$J_1 = J_i - J_r = \frac{\hbar k_1}{m} \left[1 - \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \right] \quad [9.2.5]$$

de donde

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad [9.2.6]$$

Por otra parte, en la región $x > 0$ la corriente $J_2 = J_t$ es

$$J_2 = \frac{\hbar k_2}{m} \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2$$

de donde tenemos para el coeficiente de transmisión

$$T = \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2$$

Puede comprobarse sin dificultad que se cumple la relación

$$R + T = 1$$

que corresponde a una ecuación de conservación del flujo.

Caso $E < V_0$

La solución en este caso puede calcularse a partir de [9.2.4] cambiando k_2 en ella por ik_2 , donde ahora $k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$:

$$\begin{aligned} \Phi_1(x) &= e^{ik_1x} + \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} e^{-ik_1x} & x < 0 \\ \Phi_2(x) &= \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} e^{-k_2x} & x > 0 \end{aligned} \quad [9.2.7]$$

El coeficiente de reflexión es

$$R = \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2 = 1$$

Por otra parte, el coeficiente de transmisión es nulo porque la corriente de probabilidad asociada con la exponencial real, solución en la región $x > 0$, es nula.

Como $(k_1 - ik_2)/(k_1 + ik_2)$ es un número complejo de módulo unidad, podemos escribir

$$\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} = e^{2i\theta}$$

y la función de onda $\Phi_1(x)$ solución en $x < 0$ puede escribirse, en este caso, como

$$\Phi_1(x) = e^{ik_1x} + e^{2i\theta - ik_1x}$$

que puede, asimismo, expresarse como la onda estacionaria

$$\Phi_1(x) = 2e^{i\theta} \cos(k_1x - \theta)$$

9.3. BARRERA DE POTENCIAL

Considérese el potencial unidimensional representado en la figura 9.2. Este ejemplo teórico nos permite mostrar uno de los fenómenos con más aplicaciones prácticas recien-

tes. Es el llamado *efecto túnel*. Básicamente, consiste en la existencia de una probabilidad no nula de que una partícula cuántica atraviese una barrera de potencial superior a la energía de la partícula, y por ello clásicamente infranqueable. Como mencionamos en la Introducción, este fenómeno se comprueba experimentalmente en áreas muy diversas.

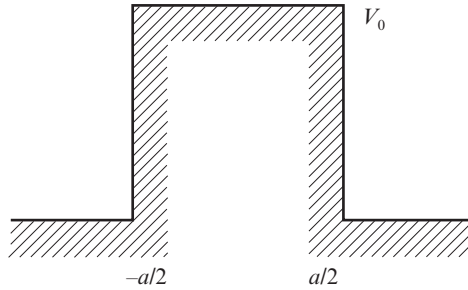


Figura 9.2. Barrera de potencial.

La solución de la ecuación de Schrödinger para el potencial de la figura 9.2 es para $V_0 > E$, con el significado físico apropiado

$$\Phi(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + A_1e^{-ik_1x} & x < -a/2 \\ A_2e^{-k_2x} + A_3e^{k_2x} & -a/2 < x < a/2 \\ A_4e^{ik_1x} & x > a/2 \end{cases} \quad [9.3.1]$$

siendo

$$k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2} \quad , \quad k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$$

Aplicando las condiciones de continuidad de la función de onda y de su derivada en $x = -a/2$ y en $x = a/2$, obtenemos un sistema de ecuaciones en A_1 , A_2 , A_3 y A_4 , cuya única solución es

$$\begin{aligned} A_1 &= 2ik_1e^{-ik_1a} \frac{k_2 \cosh k_2a - ik_1 \sinh k_2a}{(k_1^2 - k_2^2) \sinh k_2a + 2ik_1k_2 \cosh k_2a} - e^{-ik_1a} \\ A_2 &= \frac{ik_1(-ik_1 + k_2)e^{(-ik_1+k_2)a/2}}{(k_1^2 - k_2^2) \sinh k_2a + 2ik_1k_2 \cosh k_2a} \\ A_3 &= \frac{ik_1(ik_1 + k_2)e^{(-ik_1-k_2)a/2}}{(k_1^2 - k_2^2) \sinh k_2a + 2ik_1k_2 \cosh k_2a} \\ A_4 &= \frac{2ik_1k_2e^{-ik_1a}}{(k_1^2 - k_2^2) \sinh k_2a + 2ik_1k_2 \cosh k_2a} \end{aligned} \quad [9.3.2]$$

El coeficiente de transmisión es, en este caso, $T = J_t/J_i$, donde $J_t = \hbar k_1 |A_4|^2/m$ y $J_i = \hbar k_1/m$. Por tanto

$$T = |A_4|^2 = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(\sqrt{2m(V_0 - E)}a/\hbar)} \quad [9.3.3]$$

En el límite en el que $k_2 a \gg 1$, es decir, cuando la barrera sea muy ancha y/o la diferencia entre el potencial V_0 y la energía sea muy grande, la función $\sinh k_2 a \approx \exp(k_2 a)/2$ y el coeficiente de transmisión puede aproximarse por

$$T \approx 16 \frac{E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2k_2 a} \ll 1$$

que es, en este límite, un número mucho menor que la unidad. La característica más importante de la ecuación anterior es la dependencia exponencial con el momento $k_2 a = p_2/\hbar$ y la anchura de la barrera a . De hecho, una expresión análoga generalizada a tres dimensiones se utiliza en el capítulo 37 para el coeficiente de transmisión de partículas α a través de la barrera de potencial nuclear, que se denomina factor de Gamow, y viene dado por

$$T = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int dr p(r)\right\}$$

donde la integral se extiende a la anchura de la barrera y el momento es $p(r) = \sqrt{2m(V(r) - E)}$. El potencial es $V(r) \propto 1/r$.

Para $E > V_0$ se obtiene sin más que cambiar k_2 por ik_2 en [9.3.3], la siguiente expresión para el coeficiente de transmisión

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2(\sqrt{2m(E - V_0)}a/\hbar)} \quad [9.3.4]$$

se ha representado en la figura 9.3 el coeficiente de transmisión en un caso numérico. Puede verse cómo el coeficiente dado en [9.3.4] oscila entre su valor máximo de 1 y su valor mínimo $(1 + V_0^2/4E(E - V_0))^{-1}$. Las energías para las que el coeficiente de transmisión alcanza su valor máximo se llaman resonancias de difusión, y en ellas la partícula atraviesa la barrera de potencial como si ésta no existiera. En el ejemplo que nos ocupa tales resonancias tienen lugar para $k_2 a = n\pi$ con $n = 0, 1, 2, \dots$

Sin necesidad de calcular explícitamente el coeficiente de reflexión R , es posible comprobar la conservación del flujo $R + T = 1$. Para ello, utilizando la ecuación de continuidad $dJ/dx + \partial|\Psi|^2/\partial t = 0$, y el hecho de que la densidad de probabilidad $|\Psi|^2$ es independiente del tiempo, se llega a que la corriente de probabilidad $J(x)$ es constante. Por tanto, podemos calcularla por conveniencia en la región $x \ll 0$, obteniendo $J = \hbar k_1/m - \hbar k_1/m |A_1|^2$. Nótese que en dicha región la función de onda es la superposición de dos ondas planas y que para llegar al resultado anterior ha sido precisa una cancelación del término

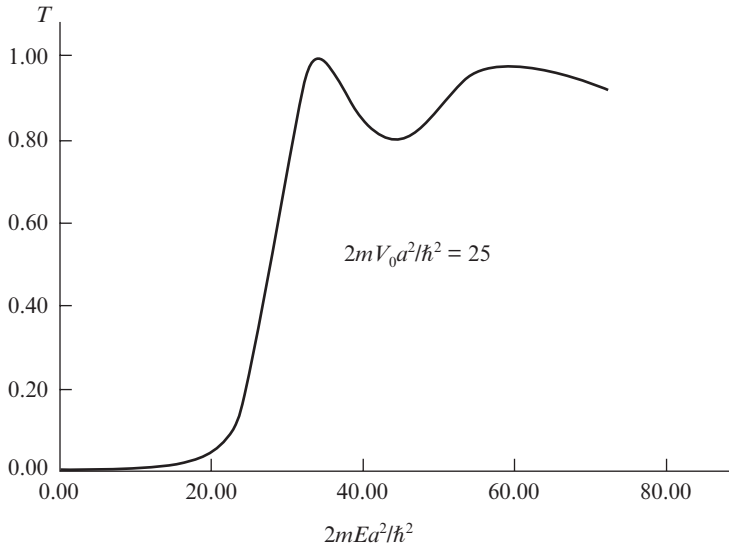


Figura 9.3. Coeficiente de transmisión para la barrera cuadrada.

de interferencia. En la región $x \gg 0$ el cálculo de la corriente de probabilidad es muy simple, obteniéndose $J = \hbar k_1/m|A_4|^2$.

Igualando ambas expresiones se tiene el resultado buscado

$$1 = |A_1|^2 + |A_4|^2 = R + T$$

El coeficiente de transmisión es muy pequeño para energías menores que la altura de la barrera, y, por tanto, la partícula cuántica tiene una cierta probabilidad de atravesar la misma. De hecho la dependencia exponencial del coeficiente de transmisión con la anchura de la barrera tiene importantes aplicaciones prácticas recientes, como, por ejemplo, el microscopio de efecto túnel. En este dispositivo se «barre» la superficie de un material conductor con una aguja extraordinariamente fina ($\approx 5 \text{ \AA}$) conectada a una fuente de alimentación. Manteniendo constante la intensidad ($\approx 100 \text{ nA}$, $1 \text{ nA} = 10^{-9} \text{ A}$) que circula por la aguja, variando para ello la diferencia de potencial, se consigue una «imagen» de la superficie del material. También se detecta la presencia de un exceso de carga en la superficie. La intensidad que atraviesa la aguja depende exponencialmente de la separación aguja muestra y cualquier movimiento de ésta es rápidamente detectado por un brusco cambio en la intensidad. La altura de la barrera es $\approx 4 \text{ eV}$. Con este dispositivo se consiguen resoluciones perpendiculares a la superficie de hasta 0.01 \AA .

El principal problema técnico que se presenta es el barrido de la superficie, pues se precisa mantener $\approx 10 \text{ \AA}$ de separación constante entre la aguja y la superficie, cuando aquélla se mueve a 10^5 \AA/s . Todo el dispositivo debe estar, por otra parte, adecuadamente aislado de las vibraciones, pudiéndose trabajar a presión atmosférica normal. El desarro-

llo de este microscopio fue premiado con el Nobel en el año 1986. Posteriormente se han desarrollado otros microscopios que utilizan técnicas similares de barrido.

9.4. COLISIÓN DE PAQUETES DE ONDAS

En la discusión anterior hemos presentado las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y, simultáneamente, hemos hablado de la evolución temporal de las partículas a las que representan. Para obtener una descripción más correcta del proceso de colisión es preciso construir paquetes de ondas, con momentos modulados por una función $g(k)$ que sólo es apreciablemente no nula en un entorno de $k = k_0$. De esta forma se consigue una representación mucho más fidedigna del movimiento de las partículas.

Supongamos un potencial que se anule cuando $x \rightarrow \pm\infty$ y que sólo tome valores apreciables en un entorno del origen $x = 0$. Generalizando, por ejemplo, la solución de la barrera de potencial [9.3.1] podemos escribir las soluciones en $x \ll 0$ y $x \gg 0$, $\Psi_1(x, t)$ y $\Psi_2(x, t)$, respectivamente, como

$$\begin{aligned} \Psi_1(x, t) &= \int dk g(k)e^{i[kx - \omega(k)t]} + \int dk g(k)A(k)e^{-i[kx + \omega(k)t]} \quad x \ll 0 \\ \Psi_2(x, t) &= \int dk g(k)B(k)e^{i[kx - \omega(k)t]} \quad x \gg 0 \end{aligned} \quad [9.4.1]$$

siendo $\omega(k) = \hbar k^2/2m$. Las constantes $A(k)$ y $B(k)$ están relacionadas con los coeficientes de transmisión y reflexión a través de $R = |A(k)|^2$ y $T = |B(k)|^2$.

Podemos asociar el movimiento del centro del paquete de onda con el de la partícula representada. Para calcular su posición usamos el método de la fase estacionaria: dado un instante de tiempo t el punto x_0 que anula la derivada de la fase con respecto de k evaluada en $k = k_0$, es decir, aquel donde la fase es estacionaria define el centro del paquete. En las demás regiones la fase hace que el integrando oscile rápidamente dando contribución nula a la integral.

Si escribimos las contribuciones de $g(k)$, $A(k)$ y $B(k)$ a las fases respectivas como

$$g(k) = |g(k)|e^{i\alpha(k)} \quad , \quad A(k) = |A(k)|e^{2i\theta(k)} \quad , \quad B(k) = |B(k)|e^{2i\delta(k)} \quad [9.4.2]$$

tenemos que los centros de los paquetes incidente x_i , reflejado x_r y transmitido x_t , son

$$x_i = \frac{\hbar k_0}{m} t - \left(\frac{d\alpha(k)}{dk} \right)_{k=k_0} \quad [9.4.3]$$

$$x_r = -\frac{\hbar k_0}{m} t + \left(\frac{d\alpha(k)}{dk} \right)_{k=k_0} + 2 \left(\frac{d\theta(k)}{dk} \right)_{k=k_0} \quad [9.4.4]$$

$$x_t = \frac{\hbar k_0}{m} t - \left[\left(\frac{d\alpha(k)}{dk} \right)_{k=k_0} + 2 \left(\frac{d\delta(k)}{dk} \right)_{k=k_0} \right] \quad [9.4.5]$$

Cuando hacemos $t \ll 0$ en [9.4.4] tenemos que $x_r \gg 0$, pero la onda reflejada sólo está definida en la región $x < 0$, por lo que la fase en la integral correspondiente debe contribuir destructivamente para que no exista onda reflejada en dicha región. Para la onda transmitida ocurre algo análogo, haciendo $t \ll 0$ en [9.4.5], se tiene $x_t \ll 0$, mientras que la onda transmitida sólo está definida en la región $x > 0$. Por tanto, para tiempos remotos sólo tenemos paquete de ondas incidente. Utilizando el mismo razonamiento puede argumentarse que para tiempos futuros sólo existen paquetes reflejado y transmitido, pero no incidente.

Podemos también calcular los tiempos de retardo en la transmisión y reflexión t_t y t_r . Cuando el paquete incidente alcanza $x_i = 0$ los paquetes reflejado y transmitido no son emitidos de forma instantánea. La diferencia de los tiempos en los que $x_i = 0$ y $x_r = 0$ nos proporciona el retardo en la reflexión

$$t_r = \frac{2m}{\hbar k_0} \left(\frac{d\theta(k)}{dk} \right)_{k=k_0} \quad [9.4.6]$$

De manera análoga obtenemos el retardo en la transmisión como

$$t_t = \frac{2m}{\hbar k_0} \left(\frac{d\delta(k)}{dk} \right)_{k=k_0} \quad [9.4.7]$$

Como ejemplo, calculemos los retrasos para la barrera cuadrada descrita en la sección 9.3, en el caso límite en que la altura crece $V_0 \rightarrow \infty$ y la anchura disminuye $a \rightarrow 0$, manteniendo constante el producto $V_0 a = B$. El potencial que se obtiene por este procedimiento es $V(x) = B\delta(x)$, donde $\delta(\cdot)$ es la distribución *delta de Dirac* (véase cuestión (5.7) y apéndice de Funciones Especiales). A partir de [9.3.2] obtenemos

$$A_1 = \frac{mB}{ik_1\hbar^2 - mB} \quad A_4 = \frac{k_1\hbar^2}{k_1\hbar^2 + mB}$$

Utilizando [9.4.2] podemos identificar las fases como

$$\theta(k) = \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{k_1\hbar^2}{mB} \quad \delta(k) = -\frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{mB}{k_1\hbar^2}$$

con lo que, aplicando directamente las ecuaciones [9.4.6]-[9.4.7], encontramos que los tiempos de retardo en la reflexión y transmisión son iguales y valen

$$t_r = t_t = \frac{m^2 B \hbar}{k_1(k_1^2 \hbar^4 + m^2 B^2)}$$

9.5. EVOLUCIÓN LIBRE DE UN PAQUETE GAUSSIANO

Consideremos una partícula libre de masa m cuya función de onda en el instante inicial $t = 0$ es la gaussiana

$$\Psi(x, 0) = \left(\frac{2}{a^2\pi}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} \quad [9.5.1]$$

Su representación gráfica aproximada está en la figura 8.7.

Con el fin de hacer la lectura de esta sección más sencilla, incluiremos aquí un breve cálculo de integrales de gaussianas.

Comencemos con la integral más simple:

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-y^2}$$

Resulta mucho más fácil calcular su cuadrado escrito como

$$I_1^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy e^{-(x^2+y^2)}$$

Utilizando coordenadas polares $x = r \sin \alpha$ e $y = r \cos \alpha$ en la integral anterior, obtenemos sin dificultad

$$I_1^2 = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{+\infty} dr r e^{-r^2}$$

por tanto,

$$I_1 = \sqrt{\pi}$$

Otra integral que aparece con mucha frecuencia es

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dy y^2 e^{-y^2}$$

Su valor puede calcularse a partir de I_1 utilizando la siguiente expresión

$$I_2 = \left(-\frac{d}{da} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-ay^2}\right)_{a=1}$$

Un sencillo cambio de variable y la integral I_1 proporcionan

$$I_2 = \left(-\frac{d}{da} \sqrt{\frac{\pi}{a}}\right)_{a=1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Utilizando estas integrales es fácil obtener las incertidumbres en la posición y en el momento de la partícula con la función de onda gaussiana. El resultado es (se usa la notación de bras y kets discutida en la sección 7.13 y en el apéndice matemático)

$$\Delta x = \sqrt{\langle \Psi | x^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | x | \Psi \rangle^2} = \frac{a}{2}$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle \Psi | p^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | p | \Psi \rangle^2} = \frac{\hbar}{a}$$

El producto de las incertidumbres es, por tanto,

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

De una función de onda que, como la anterior, *satura* (es decir, la desigualdad se reduce a igualdad) el principio de incertidumbre de Heisenberg, se dice que es un *paquete mínimo*.

Por tratarse de una partícula libre, su función de onda se podrá escribir, de acuerdo con [7.6.2], como una superposición continua de ondas planas, solución de la ecuación de Schrödinger

$$\Psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \tilde{\Psi}(p) \quad [9.5.2]$$

De otra forma, $\tilde{\Psi}(p)$ es la transformada de Fourier de $\Psi(x, 0)$.

Realizando la transformada de Fourier inversa, es decir, multiplicando los dos miembros de la ecuación anterior por $\exp(-ip'x/\hbar)/\sqrt{2\pi\hbar}$, e integrando en x , obtenemos

$$\tilde{\Psi}(p') = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip'x/\hbar} \Psi(x, 0) \quad [9.5.3]$$

donde hemos utilizado que la función delta puede expresarse como

$$\delta(p - p') = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} e^{i(p-p')x/\hbar}$$

Para realizar la integral en [9.5.3] basta completar cuadrados en la exponencial y realizar una sencilla integral gaussiana para obtener

$$\tilde{\Psi}(p) = \left(\frac{a}{\hbar\sqrt{2\pi}} \right)^{1/2} e^{-p^2 a^2 / (4\hbar^2)} \quad [9.5.4]$$

Nótese que la transformada de Fourier de una gaussiana es otra gaussiana.

La evolución libre de un paquete de ondas planas viene dada, según la sección 6.3, por

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar - iEt/\hbar} \tilde{\Psi}(p) \quad [9.5.5]$$

donde $E = p^2/2m$ como corresponde a una evolución libre. Sustituyendo en [9.5.5] la expresión [9.5.3], completando cuadrados y realizando una integración gaussiana, se obtiene

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{2a}{\sqrt{2\pi}}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{a^2 + 2i\hbar t/m}} \exp\left\{-\frac{x^2}{a^2 + 2i\hbar t/m}\right\} \quad [9.5.6]$$

Si calculamos la incertidumbre en la posición para el instante de tiempo t , obtenemos

$$(\Delta x)(t) = \frac{1}{2} \sqrt{a^2 + 4\hbar^2 t^2 / (m^2 a^2)}$$

Como puede observarse, la incertidumbre crece con el tiempo en forma especificada por la ecuación anterior. Por el contrario, la incertidumbre en el momento es constante

$$(\Delta p)(t) = \frac{\hbar}{a}$$

de tal forma que el paquete no conserva el tiempo su condición de mínimo, haciéndose cada vez más ancho.

EJERCICIOS

9.1. Considérese una onda plana incidente $\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$ que incide desde $x = -\infty$ sobre una barrera de potencial infinita que se encuentra en el origen $x = 0$ cuando $t = 0$ y se mueve hacia $x = +\infty$ con velocidad $v \ll \hbar k/m$. Calcúlese la velocidad de la onda reflejada.

9.2. Demostrar que para un pozo de potencial como el representado en la figura 8.3, existen valores del vector de onda k de la partícula incidente para los que el coeficiente de transmisión vale 1. Aplíquese al caso numérico de un protón en un pozo de profundidad $V_0 = 1$ MeV y anchura $a = 10$ fm.

9.3. Calcúlese los coeficientes de transmisión y reflexión y sus tiempos de retardo para el potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq -L \\ V_0 > 0 & -L < x < 0 \\ +\infty & x \geq 0 \end{cases}$$

9.4. Un haz de electrones monocromático de energía 500 eV e intensidad 1 mA incide sobre una barrera de potencial de anchura 6 \AA y de altura: a) 100 eV y b) 1000 eV; calcular y comparar las intensidades transmitidas en los dos casos.

9.5. Calcular los coeficientes de reflexión y transmisión para partículas libres en el potencial

$$V(x) = \gamma[\delta(x + a) + \delta(x - a)]$$

9.6. Resolver la ecuación de Schrödinger para una partícula de masa m en el potencial $V(x) = \alpha x$ con $\alpha > 0$. Utilícese la representación de momentos y la normalización

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \Phi_E(x) \Phi_{E'}^*(x) = \left(\frac{\alpha^2 \hbar^2}{m} \right)^{1/3} \delta(E - E')$$

para las autofunciones.

10

Sistemas tridimensionales

Luis García Gonzalo

10.1. INTRODUCCIÓN

Tras el análisis de algunos modelos unidimensionales en los dos capítulos anteriores, en este capítulo comenzamos el estudio de los sistemas tridimensionales. El problema de encontrar el espectro de energías y los correspondientes estados estacionarios en un caso general de una partícula en tres dimensiones es muy complicado, ya que debemos resolver la ecuación de Schrödinger estacionaria [7.10.3]:

$$H\Phi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r}) \quad [10.1.1]$$

para un potencial $V(\mathbf{r})$ dado. Sin embargo, en muchos problemas físicos de interés, el potencial $V(\mathbf{r})$ tiene una forma (exacta o aproximada) que hace que la ecuación de autovalores de la energía pueda resolverse mediante el método de separación de variables. Este método ya fue descrito anteriormente en la sección 1.5 y aplicado en el apartado 7.10 a la factorización de las soluciones estacionarias en dependencia espacial y temporal:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$$

Para que pueda aplicarse este método, el hamiltoniano debe tener unas propiedades de simetría tales que, mediante un cambio de variables, el operador $H - E$ (o un operador proporcional) pueda escribirse como suma de operadores actuando sobre diferentes variables. El problema de los valores propios se divide entonces en varios problemas de autovalores, cada uno con menos variables independientes y, por tanto, más sencillo de resolver.

La onda plana es el ejemplo más sencillo de aplicación del método de separación de variables a un problema estacionario en tres dimensiones. Se comprueba fácilmente que la onda plana puede obtenerse como autofunción de la ecuación de autovalores del hamiltoniano de una partícula libre en tres dimensiones cuando dicha ecuación se separa en tres ecuaciones unidimensionales, correspondientes a las tres coordenadas cartesianas.

En este capítulo se van a estudiar diversos ejemplos de potenciales separables en coordenadas cartesianas, es decir, potenciales que pueden escribirse en la forma:

$$V(\mathbf{r}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$$

Aplicando el método de separación de variables, la resolución de la ecuación de autovalores [10.1.1] será equivalente a resolver tres ecuaciones diferenciales ordinarias en una dimensión, ecuaciones a las que podemos aplicar los resultados de los capítulos 8 y 9.

Aunque el número de sistemas de coordenadas diferentes en que es separable el operador laplaciana es 11, según un teorema debido a L. P. Eisenhart, vamos a estudiar sólo ejemplos de separación de variables en coordenadas cartesianas en este capítulo, y en coordenadas esféricas en los dos siguientes. Como se verá en el capítulo 11 el estudio de un problema de dos cuerpos en interacción mutua se reduce, al igual que en Mecánica Clásica, al estudio del sistema de una partícula sometida al potencial de interacción. Cuando el potencial es central, el sistema es separable en coordenadas esféricas y su estudio introduce el concepto de momento angular en Mecánica Cuántica. El momento angular desempeña un papel central y su estudio es importantísimo, ya que ayuda a entender el problema físico, simplifica el tratamiento matemático y su formalismo es extensible a simetrías internas de las partículas como pueden ser el espín e isospin, que se verán más adelante.

En estos tres capítulos vamos a estudiar, en general, estados ligados correspondientes a diversos potenciales tridimensionales solubles. El estudio de la teoría de la dispersión en tres dimensiones es un problema muy complicado para el carácter de este libro; una introducción se desarrolla en el capítulo 18, al final del bloque dedicado a la Mecánica Cuántica.

10.2. POZO INFINITO EN TRES DIMENSIONES

En la sección 8.2 se obtuvieron, en una dimensión, los estados estacionarios de una partícula en un pozo de potencial infinito. En esta sección vamos a estudiar el problema idealizado de una partícula en tres dimensiones que está restringida a permanecer dentro de un cubo de lado a centrado en el origen: su energía potencial $V(x, y, z)$ se hace infinita cuando el valor de una cualquiera de las coordenadas x , y o z está fuera del intervalo $[-a/2, a/2]$:

$$V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \quad [10.2.1]$$

donde

$$V_i(u) = \begin{cases} 0 & \text{si } |u| \leq a/2 \\ \infty & \text{si } |u| > a/2 \end{cases} \quad i = 1, 2, 3 \quad [10.2.2]$$

El hamiltoniano puede escribirse, por tanto, como

$$H = H_1 + H_2 + H_3 \quad [10.2.3]$$

con

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x) \\ H_2 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_2(y) \\ H_3 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_3(z) \end{aligned} \quad [10.2.4]$$

El problema de autovalores para este hamiltoniano es separable en coordenadas cartesianas. Podemos escribir la autofunción en tres dimensiones como producto de autofunciones de los distintos H_i ($i = 1, 2, 3$):

$$\Phi(x, y, z) = \Phi_1(x)\Phi_2(y)\Phi_3(z) \quad [10.2.5]$$

verificándose que

$$\begin{aligned} H_1\Phi_1(x) &= E_1\Phi_1(x) \\ H_2\Phi_2(y) &= E_2\Phi_2(y) \\ H_3\Phi_3(z) &= E_3\Phi_3(z) \end{aligned} \quad [10.2.6]$$

Se deduce inmediatamente que $\Phi(x, y, z)$ verifica:

$$H\Phi(x, y, z) = E\Phi(x, y, z) \quad [10.2.7]$$

con

$$E = E_1 + E_2 + E_3 \quad [10.2.8]$$

Aplicando los resultados de la sección 8.2, se obtiene que los valores propios son de la forma:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad , \quad n_i = 1, 2, 3, \dots \quad i = x, y, z \quad [10.2.9]$$

y las correspondientes autofunciones normalizadas son:

$$\begin{aligned} \Phi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) &= \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \text{sen} \left[n_x \pi \left(\frac{x}{a} + \frac{1}{2} \right) \right] \text{sen} \left[n_y \pi \left(\frac{y}{a} + \frac{1}{2} \right) \right] \text{sen} \left[n_z \pi \left(\frac{z}{a} + \frac{1}{2} \right) \right] \\ &\quad \text{si } |x| \leq a/2, |y| \leq a/2, |z| \leq a/2 \\ \Phi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) &= 0 \quad \text{si } |x| > a/2, |y| > a/2 \quad \text{o} \quad |z| > a/2 \end{aligned} \quad [10.2.10]$$

Evidentemente, las funciones de onda se anulan en las paredes de la caja (x, y o $z = a/2$ o $-a/2$), donde la energía potencial se hace infinita.

Niveles de energía

El nivel fundamental corresponde a $n_x = n_y = n_z = 1$. Su energía es:

$$E_{111} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

Este valor de la energía sólo se obtiene haciendo $n_x = n_y = n_z = 1$. Por tanto, el nivel fundamental no es degenerado.

El primer nivel excitado se obtiene cuando uno de los números cuánticos n_x , n_y o n_z vale 2 y los otros dos valen 1:

$$E_{211} = E_{121} = E_{112} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2}$$

Este nivel tiene una degeneración tres, puesto que las autofunciones $\Phi_{211}(x, y, z)$, $\Phi_{121}(x, y, z)$ y $\Phi_{112}(x, y, z)$ son independientes.

Cualquier nivel energético correspondiente a una terna de números cuánticos $\{n_x, n_y, n_z\}$ en la que, al menos, dos de ellos son distintos, será degenerado. Es una degeneración «intrínseca» a la simetría del problema: las tres aristas de un cubo tienen la misma longitud a . Sólo cuando $n_x = n_y = n_z$ el nivel puede no ser degenerado, aunque no siempre ocurre así. Por ejemplo, el nivel correspondiente a la terna $\{3, 3, 3\}$ es el mismo que el correspondiente a la $\{5, 1, 1\}$. Ésta es una degeneración añadida y, evidentemente, puede producirse con ternas que no tengan los tres números cuánticos iguales, como ocurre, por ejemplo, con las ternas $\{5, 2, 2\}$ y $\{4, 4, 1\}$.

Densidad de estados

El cálculo del número de autoestados cuyas energías correspondientes están en un intervalo dado es, en general, muy tedioso. Sin embargo, en el límite en que las energías son suficientemente altas, $E \gg \pi^2\hbar^2/ma^2$, o equivalentemente, $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \gg 1$, la diferencia entre dos niveles energéticos consecutivos es muy pequeña comparada con E y el espectro es prácticamente continuo. Una forma de calcular el número de estados en un intervalo de energía es dibujar, en un espacio tridimensional con coordenadas cartesianas (n_x, n_y, n_z) , los estados permitidos (que corresponden a los puntos donde n_x , n_y , n_z toman valores enteros positivos) y contarlos. El método es exactamente el mismo que el empleado en la sección 1.5 para calcular el número de modos de radiación en una cavidad.

Los valores posibles de los números cuánticos (n_x, n_y, n_z) para una energía dada E obedecen la relación:

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{2ma^2}{\pi^2 \hbar^2} E \quad [10.2.11]$$

por tanto, en la representación de la figura 1.7 corresponden a puntos que se encuentran en la superficie de un octante de esfera de radio $\sqrt{2mE} (a/\pi\hbar)$. Consecuentemente, para una energía E suficientemente alta, el número de estados con energía menor o igual que E será el volumen del octante de esfera, ya que cada estado corresponde a un cubo de lado unidad. Este número de estados será, por tanto,

$$\frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{a}{\pi\hbar} \right)^3 (2mE)^{3/2}$$

Derivando esta expresión con respecto a E , se obtiene el número de estados con energía entre E y $E + dE$, que expresamos como el producto de la densidad de estados $N(E)$ y el tamaño del intervalo de energía dE :

$$N(E)dE = \frac{4\pi V}{h^3} (2m^3)^{1/2} E^{1/2} dE \quad [10.2.12]$$

donde $V = a^3$ es el volumen del cubo.

10.3. EL OSCILADOR ARMÓNICO TRIDIMENSIONAL

De forma general, el oscilador armónico en tres dimensiones viene descrito por un potencial del tipo:

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad [10.3.1]$$

siendo $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ constantes positivas. En el caso de que el potencial sólo dependa de la distancia $r = |\mathbf{r}|$ de la partícula al origen (o equivalentemente, $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$), se dice que el oscilador es isótropo.

El hamiltoniano es, por tanto, de la forma [10.2.3], por lo que sus autovalores serán sumas de valores propios de los operadores H_1, H_2 y H_3 , de acuerdo con [10.2.8], y sus autofunciones respectivas, productos de las funciones propias $\Phi_1(x), \Phi_2(y)$ y $\Phi_3(z)$. El problema se reduce, al igual que en el apartado anterior, a la resolución de las tres ecuaciones de autovalores en una dimensión [10.2.6]. De los resultados de la sección 8.4, se obtiene fácilmente que los autovalores del hamiltoniano son de la forma:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_z, \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \quad i = x, y, z \quad [10.3.2]$$

y las correspondientes autofunciones:

$$\begin{aligned} \Phi_{n_x n_y n_z} &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^{n_x+n_y+n_z} n_x! n_y! n_z!}} \left(\frac{m^3 \omega_x \omega_y \omega_z}{\pi^3 \hbar^3} \right)^{1/4} H_{n_x}(\alpha x) H_{n_y}(\beta y) H_{n_z}(\gamma z) e^{-\frac{m}{2\hbar}(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2)} \end{aligned} \quad [10.3.3]$$

donde

$$\alpha = \sqrt{m\omega_x/\hbar} \quad , \quad \beta = \sqrt{m\omega_y/\hbar} \quad , \quad \gamma = \sqrt{m\omega_z/\hbar}$$

Oscilador isótropo. Degeneración de los niveles de energía

Los niveles de energía de un oscilador isótropo vendrán dados, de acuerdo con [10.3.2], por la expresión:

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [10.3.4]$$

siendo

$$\omega = \omega_x = \omega_y = \omega_z \quad \text{y} \quad n = n_x + n_y + n_z \quad [10.3.5]$$

Todas las autofunciones $\Phi_{n_x n_y n_z}(x, y, z)$ de la base que verifiquen la condición [10.3.5] serán autovectores del hamiltoniano con valor propio E_n . Por tanto, la degeneración g_n del nivel de energía E_n será igual al número de conjuntos diferentes $\{n_x, n_y, n_z\}$ que satisfagan la relación [10.3.5]. Para calcular este número, comenzamos eligiendo los distintos valores que puede tomar n_x para un valor de n dado: $n_x = 0, 1, 2, \dots, n$. Para cada valor elegido de n_x , se verifica: $n_y + n_z = n - n_x$. Así pues, hay $n - n_x + 1$ posibilidades para el par $\{n_y, n_z\}$: $\{n_y, n_z\} = \{0, n - n_x\}, \{1, n - n_x - 1\}, \dots, \{n - n_x, 0\}$. La degeneración g_n será, por tanto,

$$g_n = \sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \quad [10.3.6]$$

Consecuentemente, el nivel fundamental $E_0 = (3/2)\hbar\omega$ es no degenerado y su autofunción es de la forma:

$$\Phi_{000}(x, y, z) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2 + y^2 + z^2)}$$

El resto de niveles energéticos son degenerados y las autofunciones correspondientes vienen dadas por las expresiones

$$\Phi_{n_x, n_y, n_z} = \frac{1}{\sqrt{2^n n_x! n_y! n_z!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/4} H_{n_x}(\alpha x) H_{n_y}(\alpha y) H_{n_z}(\alpha z) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2 + y^2 + z^2)} \quad [10.3.7]$$

donde $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ y n_x, n_y, n_z son enteros positivos o nulos que verifican la relación [10.3.5].

Al contrario que en el caso unidimensional, el hamiltoniano no forma, por sí mismo, un conjunto completo de observables que conmutan, ya que los niveles de energía son degenerados. La base de autofunciones [10.3.7] viene determinada de forma única por los autovalores de los observables $\{H_1, H_2, H_3\}$. En la sección 12.4 obtendremos una base diferente de la anterior para el oscilador isótropo, constituida por vectores propios comunes de otro conjunto completo de observables que conmutan.

10.4. PARTÍCULA CARGADA EN UN CAMPO MAGNÉTICO UNIFORME

Clásicamente, el movimiento de una partícula de masa m y carga eléctrica q bajo la acción de un campo magnético \mathbf{B} obedece la expresión [7.11.4] con $\mathbf{E} = 0$, que en el Sistema Internacional de unidades se escribe como:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad [10.4.1]$$

Como se vio en [7.11.6], la relación entre momento y velocidad, en presencia de un campo magnético, es: $\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}$, siendo \mathbf{A} el potencial vector.

Si el campo magnético es constante (en el tiempo) y uniforme (en el espacio), la solución de las ecuaciones del movimiento [10.4.1] viene dada por:

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + r_0 \cos(\omega_c t + \varphi_0) \\ y(t) &= y_0 + r_0 \operatorname{sen}(\omega_c t + \varphi_0) \\ z(t) &= v_{0z} t + z_0 \end{aligned} \quad [10.4.2]$$

donde hemos tomado el eje OZ en la dirección del campo magnético \mathbf{B} . Las constantes $x_0, y_0, z_0, v_{0z}, r_0$ y φ_0 dependen de las condiciones iniciales, mientras la frecuencia ciclotrónica ω_c , viene dada por

$$\omega_c = -\frac{qB}{m} \quad [10.4.3]$$

La proyección en el plano XY de la trayectoria de la partícula es, por tanto, un movimiento circular uniforme con velocidad angular ω_c , y con sentido de giro opuesto al campo magnético si $q > 0$, y en la misma dirección si $q < 0$. En cuanto a la proyección en el

eje OZ , el movimiento es rectilíneo y uniforme (velocidad constante). Por tanto, la partícula describe en el espacio un movimiento uniforme sobre una hélice circular cuyo eje es paralelo al campo magnético.

La expresión del hamiltoniano cuántico para una partícula en un campo electromagnético externo fue dada en [7.11.8]. En ausencia de campo eléctrico y usando unidades SI, el hamiltoniano es de la forma:

$$H = \frac{1}{2m} [-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r})]^2 \quad [10.4.4]$$

donde \mathbf{A} es el potencial vector. El operador asociado a la velocidad de la partícula será, de acuerdo con [7.11.6],

$$\mathbf{v} = \frac{1}{m} [-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r})] \quad [10.4.5]$$

Los conmutadores entre las distintas componentes del operador \mathbf{v} son fáciles de calcular. Aplicando el resultado del ejercicio 10.1, se obtiene, por ejemplo:

$$[v_x, v_y] = -\frac{q}{m^2} \{[p_x, A_y(\mathbf{r})] + [A_x(\mathbf{r}), p_y]\} = \frac{iq\hbar}{m^2} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = \frac{iq\hbar}{m^2} B_z(\mathbf{r}) \quad [10.4.6]$$

Análogamente, puede demostrarse que

$$[v_y, v_z] = \frac{iq\hbar}{m^2} B_x(\mathbf{r}) \quad , \quad [v_z, v_x] = \frac{iq\hbar}{m^2} B_y(\mathbf{r})$$

Además, como $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ conmuta con x, y, z , de la definición [10.4.5], es inmediato que

$$[x, v_x] = [y, v_y] = [z, v_z] = \frac{i\hbar}{m} \quad [10.4.7]$$

siendo el resto de conmutadores entre una componente de \mathbf{r} y una componente de \mathbf{v} , nulos.

Cuando el campo magnético es uniforme, se puede calcular analíticamente el espectro de energías. Tomaremos la dirección del campo \mathbf{B} como eje OZ . Las relaciones de conmutación entre las componentes del operador velocidad pasarán a ser:

$$[v_x, v_y] = -i \frac{\hbar\omega_c}{m} \quad , \quad [v_y, v_z] = [v_z, v_x] = 0 \quad [10.4.8]$$

donde hemos hecho uso de la definición [10.4.3].

Espectro de energías. Niveles de Landau

De las expresiones [10.4.4] y [10.4.5] es inmediato que el hamiltoniano puede escribirse en la forma:

$$H = H_{\perp} + H_{\parallel} \quad [10.4.9]$$

donde

$$H_{\perp} = \frac{m}{2}(v_x^2 + v_y^2) \quad [10.4.10]$$

$$H_{\parallel} = \frac{m}{2}v_z^2 \quad [10.4.11]$$

De [10.4.8] se obtiene:

$$[H_{\perp}, H_{\parallel}] = 0 \quad [10.4.12]$$

Por tanto, si encontramos una base de autovectores comunes de H_{\perp} (con valores propios E_{\perp}) y de H_{\parallel} (con valores propios E_{\parallel}), esta base común será una base de autovectores de H con valores propios

$$E = E_{\perp} + E_{\parallel} \quad [10.4.13]$$

Los operadores z y mv_z verifican, de acuerdo con [10.4.7], la misma regla de conmutación que la posición y el momento en una dimensión. Puede demostrarse que, al igual que el momento en una dimensión, el espectro de autovalores de v_z es el conjunto de los números reales (espectro continuo). Consecuentemente, los valores propios de H_{\parallel} son de la forma:

$$E_{\parallel} = \frac{m}{2}v_z^2 \quad [10.4.14]$$

donde v_z es una constante real cualquiera. Por tanto, el espectro de H_{\parallel} es continuo y corresponde a la energía de una partícula que se mueve libremente en la dirección del campo magnético (como en el caso clásico).

Para el cálculo del espectro de H_{\perp} es conveniente definir los operadores

$$a = \sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega_c}}(v_y + iv_x) \quad , \quad a^{\dagger} = \sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega_c}}(v_y - iv_x) \quad [10.4.15]$$

donde hemos supuesto que $\omega_c > 0$ ($q < 0$). En el caso $q > 0$, basta con tomar el eje OZ en la dirección opuesta al campo magnético, de forma que ω_c continúe siendo positiva. Apli-

cando [10.4.8] se obtiene que el conmutador de estos operadores vale $[a, a^\dagger] = 1$, que es la misma relación de conmutación que verifican los operadores de creación y destrucción introducidos en [8.4.9] para el cálculo del espectro de energías del oscilador armónico unidimensional.

Se puede probar fácilmente que H_\perp puede escribirse como

$$H_\perp = \hbar\omega_c \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

con el operador número definido como $N = a^\dagger a$. Por tanto, al igual que en el problema del oscilador unidimensional, el espectro de energías de H_\perp vendrá dado por

$$E_\perp = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [10.4.16]$$

Los vectores propios de H_\perp correspondientes a $n = 0$ son soluciones de la ecuación $a|0\rangle = 0$, es decir,

$$(v_y + iv_x)|0\rangle = 0 \quad [10.4.17]$$

La ecuación [10.4.17] es una ecuación en derivadas parciales en x e y que admite infinitas soluciones. Por tanto, al contrario que en el problema del oscilador armónico unidimensional, la energía $E_{\perp 0} = (1/2)\hbar\omega_c$ tiene degeneración infinita. Mediante la utilización del operador creación a^\dagger se demuestra fácilmente que lo mismo ocurre con cualquier nivel n .

De los resultados [10.4.14] y [10.4.16] se obtiene que los valores propios del hamiltoniano total H son de la forma:

$$E_{n, v_z} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c + \frac{1}{2} m v_z^2 \quad [10.4.18]$$

Los niveles de energía obtenidos se denominan niveles de Landau.

Estados estacionarios

Para un campo magnético dado \mathbf{B} , el potencial vector \mathbf{A} no está determinado de forma única: se puede añadir al potencial \mathbf{A} el gradiente de una función cualquiera sin que cambie el valor de \mathbf{B} (ya que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$). El espectro de energías no cambia con la elección del potencial vector \mathbf{A} , pero para poder hallar la expresión explícita de las autofunciones es necesario elegir una forma particular para el potencial vector. En el caso de un campo magnético uniforme y constante (en la dirección del eje OZ) se puede elegir un potencial vector con componentes:

$$A_x = -By \quad , \quad A_y = A_z = 0 \quad [10.4.19]$$

De la ecuación [7.11.6] y las expresiones de la trayectoria clásica [10.4.2] es inmediato que para este potencial se verifica clásicamente que:

$$\begin{aligned}x_0 &= x + \frac{m}{qB} v_y = x + \frac{p_y}{qB} \\y_0 &= y - \frac{m}{qB} v_x = y - \frac{p_x}{qB}\end{aligned}\tag{10.4.20}$$

La ecuación de Schrödinger estacionaria correspondiente al hamiltoniano [10.4.4] será, con esta elección del potencial vector A ,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{i\hbar q}{2m} B y \frac{\partial}{\partial x} + \frac{q^2}{2m} B^2 y^2 \right] \Phi(\mathbf{r}) = E \Phi(\mathbf{r})\tag{10.4.21}$$

Teniendo en cuenta que este hamiltoniano conmuta con p_x y p_z , podemos buscar autofunciones comunes a H , p_x y p_z , es decir, funciones de la forma:

$$\Phi(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\hbar} \Phi_2(y) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)}\tag{10.4.22}$$

Sustituyendo la expresión para Φ en la ecuación [10.4.21], se obtiene que la función $\Phi_2(y)$ verifica la ecuación:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi_2(y)}{dy^2} + \left[\frac{1}{2m} (p_x^2 + p_z^2) + \frac{qB}{m} y p_x + \frac{q^2 B^2}{2m} y^2 \right] \Phi_2(y) = E \Phi_2(y)$$

que puede escribirse como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi_2(y)}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (y - y_0)^2 \Phi_2(y) = \left(E - \frac{p_x^2}{2m} \right) \Phi_2(y)\tag{10.4.23}$$

con $y_0 = -p_x/qB$, al igual que en el caso clásico (expresión 10.4.20).

Esta ecuación tiene la misma forma que la ecuación [8.4.2] correspondiente a un oscilador. Los valores propios vienen dados por la expresión [10.4.18] con $v_z = p_z/m$, mientras que las autofunciones son de la forma:

$$\Phi_{n, p_x, p_z}(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega_c}{\pi\hbar} \right)^{1/4} H_n \left[\sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}} (y - y_0) \right] e^{-\frac{m\omega_c}{2\hbar}(y - y_0)^2 + \frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)}\tag{10.4.24}$$

Nótese que, como habíamos comentado, los autovalores del hamiltoniano E_{n, p_x} tienen degeneración infinita, en este caso respecto a p_x .

La autofunción [10.4.24] describe una partícula con p_z constante, como en el caso clásico, que ejecuta un movimiento oscilatorio según el eje OY , centrado en y_0 . De acuerdo con [10.4.20], la componente del momento p_x está completamente determinada; por tanto, x_0 queda completamente indeterminada.

EJERCICIOS

10.1. Probar que

$$[p_x, f(\mathbf{r})] = -i\hbar \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial x}$$

siendo f una función analítica de \mathbf{r} .

10.2. Un oscilador armónico bidimensional isótropo de frecuencia angular ω se encuentra en un estado de energía $2\hbar\omega$. Se sabe que el valor esperado de x^2 es $5\hbar/6m\omega$. Calcular el valor esperado de y^2 y el de la energía potencial.

10.3. Se considera una partícula microscópica de masa m en dos dimensiones espaciales x, y , sometida al potencial $V(x, y) = V_1(x) + V_2(y)$:

$$V_1(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si } x > 0 \end{cases} ; \quad V_2(y) = \begin{cases} 0 & \text{si } |y| < a/2 \\ +\infty & \text{si } |y| > a/2 \end{cases}$$

- Hallar las autofunciones $\Phi(x, y)$ del hamiltoniano, así como las energías correspondientes, E . ¿Hay estados degenerados en energía?
- Supóngase que la partícula está en el estado de mínima energía posible según su eje y . Hallar la densidad de probabilidad en el espacio de momentos [es decir, la probabilidad de que tenga su momento entre $\hbar k_2$ y $\hbar(k_2 + dk_2)$] según dicho eje prescindiendo de su eje x .

10.4. Estudiar la degeneración de los niveles de energía de un oscilador armónico en tres dimensiones cuando $\omega_x = \omega_y \neq \omega_z$. Si

$$\omega_x = \omega_y = \omega \left(1 - \frac{\gamma}{3}\right) \quad \text{y} \quad \omega_z = \omega \left(1 + \frac{2\gamma}{3}\right)$$

donde γ es una constante que verifica: $0 \leq \gamma \leq 1$, calcular, en función de γ , las variaciones de la energía y el grado de degeneración del nivel fundamental y de los dos primeros niveles excitados.

10.5. Considerar el potencial, expresado en coordenadas cilíndricas:

$$V(\rho) = \begin{cases} 0 & \text{si } \rho < \rho_0 \\ +\infty & \text{si } \rho \geq \rho_0 \end{cases}$$

Escribir la ecuación de autovalores de la energía. Factorizar los autoestados en la forma $\Phi(\rho, \varphi, z) = R(\rho)\phi(\varphi)Z(z)$. Encontrar $\phi(\varphi)$ y $Z(z)$ y la ecuación diferencial que debe verificar $R(\rho)$, así como sus condiciones de contorno. Interpretar los resultados.

11

Momento angular

Luis García Gonzalo

11.1. EL PROBLEMA DE DOS CUERPOS

En un sistema físico de dos partículas, la función de ondas Ψ que lo describe cuánticamente depende de siete coordenadas, $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \equiv (x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t)$, correspondientes a los vectores posición de las dos partículas y el tiempo. La probabilidad de encontrar simultáneamente la partícula 1 en un elemento de volumen $d^3\mathbf{r}_1 \equiv dx_1 dy_1 dz_1$ alrededor de \mathbf{r}_1 y la partícula 2 en un elemento de volumen $d^3\mathbf{r}_2 \equiv dx_2 dy_2 dz_2$ alrededor de \mathbf{r}_2 en un instante dado de tiempo t viene dada por:

$$|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2$$

El operador hamiltoniano incluirá la energía cinética de ambas partículas y la energía potencial. La ecuación de Schrödinger puede escribirse como:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \quad [11.1.1]$$

donde $\nabla_j^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2}$, $j = 1, 2$ y m_j son las masas respectivas.

En el caso de que no haya fuerzas externas, debido a la invariancia traslacional del sistema, el potencial de interacción mutua depende sólo de las coordenadas relativas $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \equiv (x_1 - x_2, y_1 - y_2, z_1 - z_2)$. Definiendo además las coordenadas del centro de masas $M\mathbf{R} = m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2 \equiv (m_1x_1 + m_2x_2, m_1y_1 + m_2y_2, m_1z_1 + m_2z_2)$, donde $M = m_1 + m_2$ es la masa total del sistema, los momentos correspondientes pueden escribirse como:

$$\mathbf{P} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{R}} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$$
$$\mathbf{p} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}} = \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{M}$$

y la ecuación de ondas en las nuevas variables como:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) \quad [11.1.2]$$

donde

$$\nabla_{\mathbf{R}}^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}, \quad \nabla_{\mathbf{r}}^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{y} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

es la masa reducida.

Esta ecuación es separable en las coordenadas $(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t)$, con lo que podremos escribir un estado estacionario en la forma

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \Phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{R})\Phi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r})e^{-i(E+E')t/\hbar} \quad [11.1.3]$$

verificándose las ecuaciones de autovalores:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \Phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{R}) = E' \Phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{R}) \quad [11.1.4]$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Phi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = E \Phi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \quad [11.1.5]$$

La primera ecuación corresponde al movimiento de una partícula libre de masa M , y describe el movimiento del centro de masas. Su solución, generalizando directamente lo que vimos en el capítulo 7 (ecuación [7.3.4]), es una onda plana autofunción del momento total \mathbf{P} .

La segunda ecuación describe el movimiento relativo de las dos partículas, y es la ecuación de autovalores de la energía para una partícula de masa μ (la masa reducida) sometida a un potencial V (el potencial de interacción mutua entre las partículas).

El problema, análogamente al caso clásico, queda reducido al de una partícula con masa μ sometida a un potencial. La parte del centro de masas nos da como solución estados con un momento arbitrario dado, que no introducen discretización ninguna en los valores posibles de la energía.

11.2. POTENCIALES CENTRALES

En el caso general, es prácticamente imposible encontrar soluciones analíticas a la ecuación de ondas tridimensional [11.1.5]. Un caso particularmente interesante es el de potenciales esféricamente simétricos, es decir, potenciales que sólo dependen de la distancia $r = |\mathbf{r}|$ al origen: $V(\mathbf{r}) = V(r)$. Este tipo de potenciales se conoce como potenciales cen-

trales. Potenciales de este tipo son los que tenemos entre dos partículas aisladas sin fuerzas externas, debido a simetría rotacional, o de forma aproximada muchos que aparecen en Física, como se verá más adelante en las distintas aplicaciones de la Mecánica Cuántica.

Como veremos a continuación, en el caso de un potencial central podemos separar la ecuación de autovalores en coordenadas esféricas. La relación entre las coordenadas esféricas que vamos a usar y las cartesianas es la usual, siendo el eje polar el z (figura 11.1), con lo que:

$$\begin{aligned} x &= r \operatorname{sen} \theta \cos \varphi \\ y &= r \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad [11.2.1]$$

mientras que el elemento de volumen viene dado por

$$d^3r = r^2 dr \operatorname{sen} \theta d\theta d\varphi$$

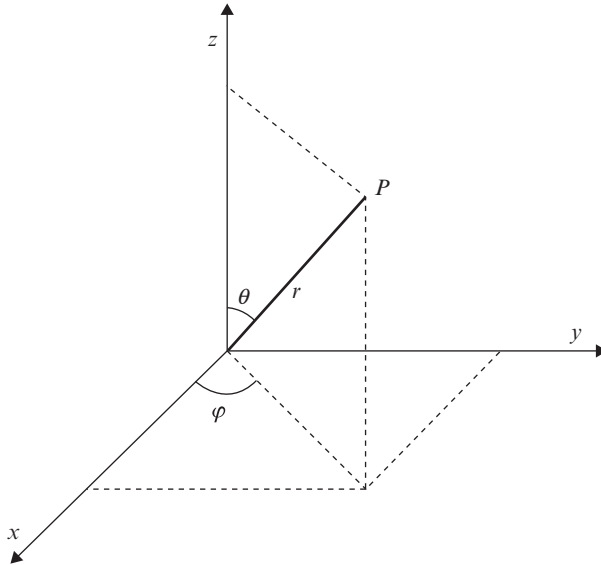


Figura 11.1. Coordenadas esféricas.

El operador energía cinética T se escribirá en estas coordenadas como:

$$T \equiv -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\operatorname{sen} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad [11.2.2]$$

Multiplicando la ecuación de autovalores de la energía [11.1.5] por $2\mu r^2/\hbar^2$ y agrupando términos, obtenemos, para un potencial central $V(r)$:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)]\Phi = - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \right] \quad [11.2.3]$$

(Hemos suprimido el subíndice r tanto en la función de ondas como en la laplaciana, ya que la variable r es la única que va a aparecer de ahora en adelante.)

Esta ecuación es separable en parte radial y angular. Escribiendo $\Phi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$, sustituyendo en la ecuación [11.2.3] y dividiendo entre Φ :

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = - \frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right] \quad [11.2.4]$$

El miembro de la izquierda sólo depende de r , mientras el de la derecha sólo de las variables angulares, por lo que, para que se verifique la ecuación para cualquier valor de (r, θ, φ) , ambos han de ser iguales a una constante λ (método de separación de variables):

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left\{ \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{\lambda}{r^2} \right\} R = 0 \quad [11.2.5]$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \lambda Y = 0 \quad [11.2.6]$$

Pasamos a tener que resolver una ecuación diferencial ordinaria para la función radial R , que dependerá del potencial que consideremos, y una ecuación en derivadas parciales para la parte angular Y , que es independiente del potencial. Vamos a comenzar por la solución de la segunda y en el próximo capítulo veremos tres ejemplos interesantes de solución de la parte radial.

11.3. MOMENTO ANGULAR ORBITAL

Antes de proceder a la resolución de la ecuación [11.2.6] vamos a establecer la relación del operador que aparece en dicha ecuación con el momento angular. Para obtener el operador asociado con el momento angular no tenemos más que sustituir en su definición clásica los operadores asociados con la posición y momento:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla)$$

Al operador vectorial \mathbf{L} lo denominaremos momento angular orbital, ya que es la versión microscópica de la variable clásica que describe la órbita de una partícula macroscópica. De esta forma, lo diferenciamos del momento angular intrínseco o espín, que no tiene análogo clásico, y será introducido en el capítulo 13. Las distintas componentes pueden escribirse en coordenadas cartesianas como:

$$\begin{aligned}
 L_x &= yp_z - zp_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\
 L_y &= zp_x - xp_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\
 L_z &= xp_y - yp_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)
 \end{aligned}
 \tag{11.3.1}$$

Mediante la transformación [11.2.1] podemos expresar el momento angular en coordenadas esféricas:

$$L_x = i\hbar \left(\operatorname{sen} \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{cotg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \tag{11.3.2}$$

$$L_y = i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{cotg} \theta \operatorname{sen} \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \tag{11.3.3}$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{11.3.4}$$

mientras que

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\operatorname{sen} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \tag{11.3.5}$$

De esta última expresión vemos que la ecuación [11.2.6] es la ecuación de autovalores del cuadrado del momento angular L^2 , con valores propios $\hbar^2 \lambda$. Por tanto, resolver la parte angular de la ecuación de Schrödinger para un potencial central es equivalente a encontrar los autovalores y autofunciones del operador L^2 . Además, usando las expresiones [11.2.2] y [11.3.5] vemos que la energía cinética puede escribirse como:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2\mu r^2} \tag{11.3.6}$$

Por tanto, podemos interpretar el operador energía cinética como suma de un término correspondiente al movimiento en la dirección radial y un operador responsable del movimiento rotacional. Es evidente que $[T, L^2] = 0$, por lo que la energía cinética y el cuadrado del momento angular pueden medirse simultáneamente. En el caso de un potencial central, como $V = V(r)$, tenemos que $[H, L^2] = 0$, por lo que el cuadrado del momento angular y la energía pueden medirse simultáneamente. Es análogo al caso clásico, donde L^2 es una constante del movimiento.

11.4. AUTOVALORES Y AUTOFUNCIONES: ARMÓNICOS ESFÉRICOS

Pasemos a resolver la ecuación [11.2.6]. Multiplicando la ecuación por $\text{sen}^2 \theta$, vemos que es separable en las variables (θ, φ) , con lo que podemos descomponer $Y(\theta, \varphi) = \zeta(\theta)\phi(\varphi)$. Sustituyendo, y dividiendo entre Y , obtenemos:

$$\frac{\text{sen } \theta}{\zeta} \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen } \theta \frac{d\zeta}{d\theta} \right) + \lambda \text{sen}^2 \theta = -\frac{1}{\phi} \frac{d^2\phi}{d\varphi^2} = \nu$$

siendo ν una constante, con lo que pasamos a tener dos ecuaciones diferenciales ordinarias para ζ y ϕ :

$$\frac{d^2\phi}{d\varphi^2} + \nu\phi = 0 \quad [11.4.1]$$

$$\frac{1}{\text{sen } \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen } \theta \frac{d\zeta}{d\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{\nu}{\text{sen}^2 \theta} \right) \zeta = 0 \quad [11.4.2]$$

Las soluciones de la ecuación [11.4.1] son:

$$\begin{aligned} \phi(\varphi) &= Ae^{i\sqrt{\nu}\varphi} + Be^{-i\sqrt{\nu}\varphi} & \nu &\neq 0 \\ \phi(\varphi) &= A + B\varphi & \nu &= 0 \end{aligned}$$

Como ϕ y $d\phi/d\varphi$ han de ser regulares y periódicas en el dominio de 0 a 2π , esto exige que $\sqrt{\nu} = m$, con m entero (no confundir m con la masa). En el caso $\nu = 0$, la constante B se anula. Por tanto, todas las soluciones con sentido físico pueden escribirse como:

$$\phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad [11.4.3]$$

donde m es un número entero. El factor $1/\sqrt{2\pi}$ se elige para que la parte ϕ de la función de ondas esté normalizada al integrar en φ entre 0 y 2π .

En la ecuación [11.4.2] debemos sustituir ahora ν por m^2 . Si hacemos el cambio de variable ϕ por $\omega = \cos \theta$ y escribimos $\zeta(\theta) = P(\omega)$, la ecuación pasa a ser

$$\frac{d}{d\omega} \left[(1 - \omega^2) \frac{dP}{d\omega} \right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - \omega^2} \right) P = 0 \quad [11.4.4]$$

Como θ varía entre 0 y π , el dominio de ω es de 1 a -1 . La ecuación [11.4.4] tiene dos soluciones linealmente independientes. Excepto para ciertos valores de λ , ambas son infinitas en $\omega = \pm 1$ y, por tanto, no aceptables. Sólo si $\lambda = \ell(\ell + 1)$, con $\ell \geq |m|$ y entero, una de ellas es finita en $\omega = \pm 1$. Esta solución finita viene dada por el producto de $(1 - \omega^2)^{|m|/2}$

por un polinomio de orden $\ell - |m|$ en ω y con paridad $\ell - |m|$. Omitiremos aquí la demostración de estas propiedades, que se ofrecerá más adelante.

Las soluciones físicamente aceptables cuando $m = 0$ se denominan polinomios de Legendre $P_\ell(\omega)$, que pueden escribirse como (apéndice C):

$$P_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{d\omega^\ell} (\omega^2 - 1)^\ell$$

Cuando $m \neq 0$, las soluciones son las funciones de Legendre asociadas:

$$P_\ell^m(\omega) = \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} (1 - \omega^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{d\omega^{\ell+m}} (\omega^2 - 1)^\ell \quad [11.4.5]$$

que se pueden expresar en función de los polinomios de Legendre, cuando $m > 0$:

$$P_\ell^m(\omega) = (-1)^m (1 - \omega^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\omega^m} P_\ell(\omega), \quad m > 0 \quad [11.4.6]$$

Para demostrarlo basta con diferenciar m veces la ecuación para $m = 0$ y sustituir la expresión de P_ℓ^m . Si $m < 0$, se verifica que:

$$P_\ell^m(\omega) = (-1)^{|m|} \frac{(\ell - |m|)!}{(\ell + |m|)!} P_\ell^{|m|}(\omega), \quad m < 0 \quad [11.4.7]$$

A la parte angular $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ de la función de ondas que es solución de la ecuación [11.2.6] cuando $\lambda = \ell(\ell + 1)$, $\ell = 0, 1, 2, \dots$, se le denomina armónico esférico. Por tanto, $Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \zeta_{\ell m}(\theta)\phi_m(\varphi) = N_{\ell m}P_\ell^m(\cos \theta)\phi_m(\varphi)$, donde $N_{\ell m}$ es una constante de normalización. La elección de $\phi_m(\varphi)$ nos asegura la ortogonalidad de las distintas autofunciones para un ℓ dado, ya que

$$\int_0^{2\pi} \phi_m^*(\varphi)\phi_{m'}(\varphi)d\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(m-m')\varphi} d\varphi = \delta_{mm'}$$

En cuanto a la integración en θ , se puede calcular usando la función generatriz de las funciones asociadas de Legendre (apéndice C), obteniéndose:

$$\int_0^\pi P_\ell^m(\cos \theta)P_\ell^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 P_\ell^m(\omega)P_\ell^m(\omega) d\omega = \frac{2}{2\ell + 1} \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!} \delta_{\ell\ell}$$

El resultado de ambas integrales nos permite determinar la constante de normalización $N_{\ell m}$, a excepción de una fase. Por conveniencia, los armónicos esféricos se definen como:

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \left[\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} \right]^{1/2} P_\ell^m(\cos \theta)e^{im\varphi} \quad [11.4.8]$$

de forma que verifican la condición de ortonormalidad:

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \varphi) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad [11.4.9]$$

De [11.4.7] y [11.4.8] se deduce inmediatamente la propiedad de simetría de los armónicos esféricos:

$$Y_\ell^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) \quad [11.4.10]$$

Las funciones asociadas de Legendre están tabuladas en cualquier libro de funciones especiales. La expresión explícita de los armónicos esféricos con $\ell \leq 3$ es:

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad , \quad Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad , \quad Y_2^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_3^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$$

$$Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \quad , \quad Y_2^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_3^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_2^{\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \quad , \quad Y_3^{\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\varphi}$$

$$Y_3^{\pm 3}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\varphi}$$

De la expresión [11.3.5] para el cuadrado del momento angular vemos que la parte angular de sus autofunciones son precisamente los armónicos esféricos Y_ℓ^m , mientras los autovalores son de la forma $\ell(\ell + 1)\hbar^2$, siendo ℓ un número entero no negativo:

$$L^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \ell(\ell + 1)\hbar^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad , \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad [11.4.11]$$

Como debe verificarse que $|m| \leq \ell$, para un valor dado de ℓ , m puede tomar todos los valores enteros entre $-\ell$ y ℓ , es decir, $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell - 1, \ell$. Por tanto, la degeneración del autovalor $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ será $2\ell + 1$, ya que tendremos $2\ell + 1$ autofunciones distintas, correspondientes a los distintos Y_ℓ^m .

Consideremos ahora el operador L_z . De la expresión [11.3.4] vemos que sólo actúa sobre la variable φ , con lo que:

$$L_z Y_\ell^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_\ell^m(\theta, \varphi), \quad m = -\ell, -\ell + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell - 1, \ell \quad [11.4.12]$$

La última y más importante propiedad a destacar de los armónicos esféricos es que forman una base del espacio de funciones de las variables angulares, ya que toda función acotada $f(\theta, \varphi)$ definida sobre la superficie de una esfera puede ser expandida como una serie de armónicos esféricos:

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} d_{\ell}^m Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \quad [11.4.13]$$

donde los coeficientes de la expansión d_{ℓ}^m se determinan usando las propiedades de ortogonalización de los armónicos esféricos:

$$d_{\ell}^m = \iint d\Omega f(\theta, \varphi) Y_{\ell}^{m*}(\theta, \varphi) \quad [11.4.14]$$

Aquí hemos introducido la notación

$$\iint d\Omega \equiv \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \sin \theta \, d\theta \, d\varphi$$

que usaremos a partir de ahora para indicar integración en las variables angulares. En el apéndice C se pueden encontrar desarrollos en armónicos esféricos de funciones usuales.

Finalmente, nos queda por resolver para un determinado potencial central $V(r)$ la ecuación para la parte radial [11.2.5], que, al sustituir λ por $\ell(\ell + 1)$, puede escribirse (para el espectro discreto de energía) en la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{n\ell}}{dr} \right) + \left(V(r) + \frac{\ell(\ell + 1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right) R_{n\ell}(r) = E_{n\ell} R_{n\ell}(r) \quad [11.4.15]$$

El número cuántico n corresponde a las distintas soluciones de la ecuación de autovalores [11.4.15] para un valor de ℓ dado. Las autofunciones del hamiltoniano

$$\Phi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \quad [11.4.16]$$

tendrán, en general, una degeneración $2\ell + 1$, aunque en algunos casos, como veremos en el próximo capítulo, puede haber degeneración añadida, es decir, $E_{n\ell} = E_{n'\ell'}$ con $n \neq n'$ y $\ell \neq \ell'$. Para que la función de ondas esté debidamente normalizada, la parte radial $R_{n\ell}$ ha de verificar la condición de normalización:

$$\int_0^{\infty} |R_{n\ell}|^2 r^2 \, dr = 1 \quad [11.4.17]$$

De las ecuaciones [11.2.3], [11.4.11], [11.4.12] y [11.4.15] se deduce que las funciones de onda $\Phi_{n\ell m}$ son autofunciones comunes del hamiltoniano, el momento angular al cuadrado y la tercera componente del momento angular, con autovalores respectivos $E_{n\ell}$,

$\ell(\ell + 1)\hbar^2$ y $m\hbar$. Los tres operadores H , L^2 y L_z forman, por tanto, un conjunto de observables compatibles al tener una base común de autofunciones. Consecuentemente, conmutan entre sí dos a dos, como es fácil de demostrar a partir de sus expresiones en coordenadas esféricas. Este conjunto de observables compatibles es, además, completo, ya que un elemento de la base queda completamente determinado al dar los valores de los tres números cuánticos, n , ℓ , m .

A ℓ se le denomina generalmente número cuántico azimutal o número cuántico del momento angular orbital, por razones obvias, mientras m es el número cuántico magnético. Esta denominación es debida al hecho de que no podemos distinguir los distintos valores de m en un sistema aislado, ya que en el hamiltoniano, debido a la invariancia rotacional del problema, no aparece L_z . Necesitamos algún agente externo que nos introduzca un término de interacción en el que aparezca L_z . Históricamente, este agente externo fue, en el estudio de espectros atómicos, un campo magnético, de ahí la denominación para el número cuántico m .

Dependencia angular de la densidad de probabilidad

La densidad de probabilidad correspondiente a una función de ondas de la forma [11.4.16] puede escribirse como:

$$\Phi_{n\ell m}^* \Phi_{n\ell m} = R_{n\ell}^*(r)R_{n\ell}(r)\zeta_{\ell m}^*(\theta)\zeta_{\ell m}(\theta)\phi_m^*(\varphi)\phi_m(\varphi)$$

De [11.4.3], es inmediato que:

$$\phi_m^*(\varphi)\phi_m(\varphi) = \frac{1}{2\pi}$$

Por tanto, la densidad de probabilidad no depende de la coordenada φ . El comportamiento tridimensional de la densidad de probabilidad viene dado por el producto de la función $R_{n\ell}^*(r)R_{n\ell}(r)$, que depende sólo de la posición radial y la función $\zeta_{\ell m}^*(\theta)\zeta_{\ell m}(\theta)$, que puede interpretarse como un factor de modulación dependiente de la orientación.

El factor $\zeta_{\ell m}^*(\theta)\zeta_{\ell m}(\theta)$ puede representarse convenientemente mediante una gráfica en coordenadas polares. El ángulo θ es medido con respecto al eje vertical z . La distancia del origen a un punto de la curva, medida en un ángulo θ , es igual al valor de la función $\zeta_{\ell m}^*(\theta)\zeta_{\ell m}(\theta)$ para ese ángulo. En la figura 11.2 puede verse la dependencia angular de la densidad de probabilidad para $\ell = 0, 1, 2$ y los posibles valores de m . Si giramos estos diagramas alrededor del eje z , obtenemos unas superficies de revolución, que pueden interpretarse como la dependencia con la orientación de la densidad de probabilidad, al no depender ésta del ángulo φ . La densidad de probabilidad en estos diagramas está normalizada a la degeneración de la ℓ correspondiente y multiplicada por 2 cuando $m \neq 0$, de forma que lo que realmente representamos es:

$$\frac{g}{2\ell + 1} |Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)|^2 \quad , \quad \text{donde } g = \begin{cases} 1 & \text{si } m = 0 \\ 2 & \text{si } m \neq 0 \end{cases}$$

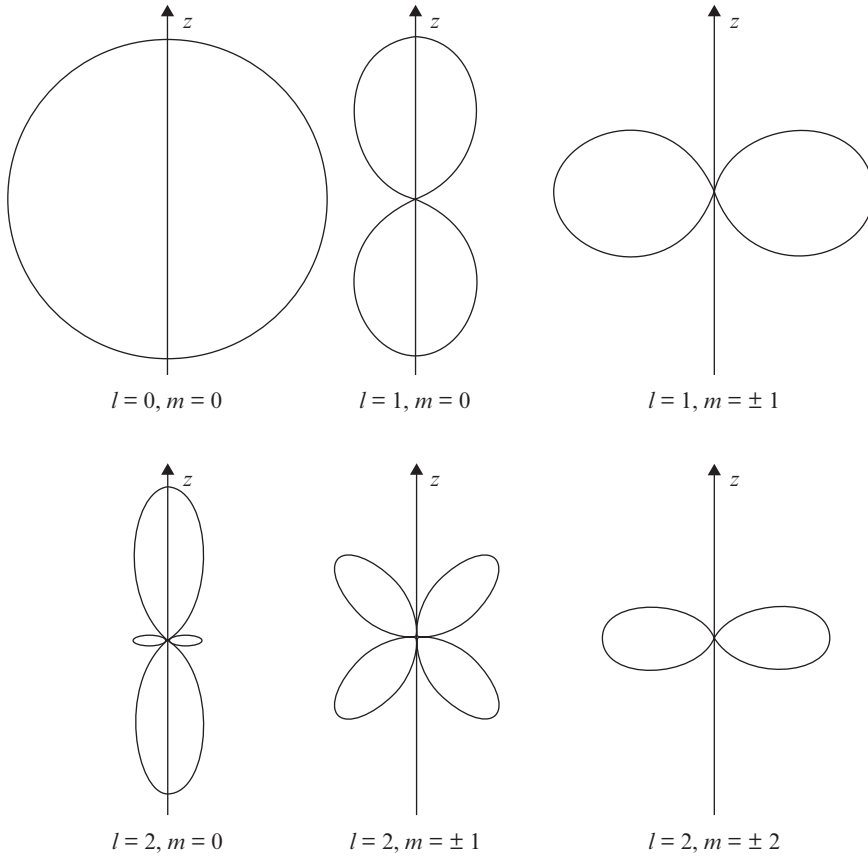


Figura 11.2. Dependencia angular de la densidad de probabilidad.

Dicho de otra forma, cuando $m \neq 0$, estamos representando:

$$\frac{1}{2\ell + 1} [|Y_\ell^m(\theta, \varphi)|^2 + |Y_\ell^{-m}(\theta, \varphi)|^2]$$

En el caso $\ell = 0, m = 0$, el diagrama es una circunferencia correspondiente a la simetría esférica de la densidad de probabilidad. Para $\ell = 1, m = 0$, la densidad de probabilidad es máxima en la dirección $\theta = 0$, mientras que para $\ell = 1, m = \pm 1$, la dirección con densidad de probabilidad máxima es la $\theta = \pi/2$. Si «sumamos» gráficamente ambos diagramas, obtenemos:

$$\frac{1}{3} \sum_{m=-1}^1 |Y_1^m(\theta, \varphi)|^2 = \frac{1}{3} \left(\frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta + 2 \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta \right) = \frac{1}{4\pi}$$

es decir, el diagrama del caso $\ell = 0, m = 0$. Por tanto, recordando que la parte radial de la función de ondas no depende del número cuántico m , la suma de las densidades de probabilidad correspondientes a los distintos valores de m cuando $\ell = 1$ tiene simetría esférica. Se puede comprobar fácilmente que el resultado es el mismo para $\ell = 2$. De hecho, para cualquier valor de ℓ , puede demostrarse que (apéndice C):

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} |Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)|^2 = \frac{2\ell + 1}{4\pi} \quad [11.4.18]$$

Esta propiedad de los armónicos esféricos es extraordinariamente importante, como se verá, por ejemplo, en el estudio de átomos o núcleos complejos. Corresponde al hecho de que para los sistemas físicos que estamos considerando (potenciales centrales) carece de sentido pretender distinguir entre los $2\ell + 1$ estados degenerados de un cierto ℓ , por lo que todos tendrán la misma probabilidad, siendo la suma de todas estas probabilidades una función esféricamente simétrica. El problema cambia completamente si hay una dirección privilegiada que nos fija un eje, como ocurre, por ejemplo, en el estudio de átomos cuando introducimos un campo magnético o eléctrico, por muy débil que éste sea. En este caso, los $2\ell + 1$ estados son físicamente distinguibles y se rompe la degeneración en energías.

Paridad de los armónicos esféricos

Una propiedad importante de un estado cuántico es su paridad. Al hallar los estados ligados para un potencial simétrico unidimensional, vimos que las autofunciones debían tener una paridad definida. En sistemas tridimensionales, la operación paridad consiste en cambiar r por $-r$. Designaremos por P el operador que realiza dicho cambio. Es inmediato que para potenciales centrales, donde $V = V(r)$, el operador paridad conmuta con el hamiltoniano:

$$[P, H] = 0 \quad [11.4.19]$$

Los autovalores de P son 1 o -1 , ya que, obviamente, $P^2 = 1$. Por tanto, siempre es posible formar una base del subespacio de autofunciones del hamiltoniano correspondientes a un autovalor dado, de tal forma que todos los elementos de dicha base tengan una paridad determinada.

En coordenadas esféricas, la operación paridad consiste en los siguientes cambios:

$$\begin{cases} r \rightarrow r \\ \theta \rightarrow \pi - \theta \\ \varphi \rightarrow \pi + \varphi \end{cases}$$

como puede comprobarse gráficamente o mediante las transformaciones [11.2.1]. Para una autofunción $\Phi_{n\ell m}$ de la forma [11.4.16], la paridad vendrá determinada por la paridad del armónico esférico $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = N_{\ell m} P_{\ell}^m(\cos \theta) \phi_m(\varphi)$. Es inmediato de [11.4.3] que $\phi_m(\varphi)$ tiene

paridad $(-1)^m$. En cuanto a la función de Legendre asociada $P_\ell^m(\cos \theta)$, cuando $\theta \rightarrow \pi - \theta$, $\cos \theta \rightarrow -\cos \theta$, por lo que su paridad será $(-1)^{\ell - |m|}$, al ser proporcional a un polinomio de paridad $\ell - |m|$ en $\cos \theta$. En conclusión, el armónico esférico $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ tiene una paridad definida, y ésta es $(-1)^\ell$:

$$PY_\ell^m(\theta, \varphi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad [11.4.20]$$

11.5. REGLAS DE CONMUTACIÓN

En el apartado anterior hemos visto que L^2 y L_z pueden medirse simultáneamente. Nos preguntamos ahora qué ocurre con las otras componentes. Para responder a la pregunta, vamos a calcular sus reglas de conmutación. De las expresiones [11.3.1] se deduce, por ejemplo, que

$$\begin{aligned} L_x L_y - L_y L_x &= -\hbar^2 \left[\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) - \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial x} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] = \\ &= -\hbar^2 \left[y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right] = i\hbar L_z \end{aligned}$$

De forma similar, podemos calcular los conmutadores de las restantes componentes, obteniéndose la misma expresión, cambiando cíclicamente los índices:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad , \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad , \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad [11.5.1]$$

Por tanto, las componentes del momento angular no son medibles simultáneamente. Si ahora calculamos el conmutador del cuadrado del momento angular con cualquiera de las componentes, por ejemplo L_z , aplicando la igualdad [7.7.10]:

$$[A^2, B] = A[A, B] + [A, B]A$$

obtenemos:

$$\begin{aligned} [L^2, L_z] &= [L_x^2, L_z] + [L_y^2, L_z] + [L_z^2, L_z] = \\ &= L_x[L_x, L_z] + [L_x, L_z]L_x + L_y[L_y, L_z] + [L_y, L_z]L_y = \\ &= -i\hbar L_x L_y - i\hbar L_y L_x + i\hbar L_y L_x + i\hbar L_x L_y = 0 \end{aligned}$$

Análogamente, se puede probar con cualquier otra componente, de forma que:

$$[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0 \quad [11.5.2]$$

De las igualdades [11.5.1] y [11.5.2] se deduce que no podemos especificar las tres componentes del momento angular simultáneamente, sino sólo una de ellas y el cuadrado

del vector. Tomando la dirección elegida como eje z (la elección, en un sistema aislado, es completamente arbitraria), los autovalores y autofunciones de L^2 y L_z vienen dados por las expresiones [11.4.11] y [11.4.12]. Este resultado nos indica que, en Mecánica Cuántica, no sólo no podemos especificar las tres componentes del momento angular simultáneamente, sino que, además, los valores que puede tomar el cuadrado del momento angular están discretizados y, para cada valor propio $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ de L^2 , la componente z puede tomar sólo $2\ell + 1$ valores diferentes $m\hbar$. Esta última propiedad, debida a la cuantización de la componente z , se conoce también como cuantización de la dirección del momento angular, indicando el hecho de que para un valor dado del cuadrado del momento angular, sólo son posibles aquellas direcciones cuya componente z vale $m\hbar$ (las componentes x e y no están determinadas, debido a las relaciones [11.5.1]).

Para el cálculo de la acción de los observables L_x y L_y sobre los armónicos esféricos, es conveniente introducir los operadores

$$L_+ = L_x + iL_y \quad [11.5.3]$$

$$L_- = L_x - iL_y \quad [11.5.4]$$

Nótese que estos operadores no son hermíticos, siendo uno el adjunto del otro.

Sustituyendo las expresiones [11.3.2] y [11.3.3], obtenemos, en coordenadas esféricas,

$$L_+ = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad [11.5.5]$$

$$L_- = -\hbar e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad [11.5.6]$$

Haciendo actuar estos operadores sobre los armónicos esféricos (definidos en [11.4.8]) y usando distintas fórmulas de recurrencia de las funciones de Legendre asociadas, se obtiene que (cuestión complementaria 11.1):

$$L_+ Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{\ell(\ell + 1) - m(m + 1)} Y_\ell^{m+1}(\theta, \varphi) \quad [11.5.7]$$

$$L_- Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{\ell(\ell + 1) - m(m - 1)} Y_\ell^{m-1}(\theta, \varphi) \quad [11.5.8]$$

Hemos encontrado, por tanto, que la acción de los operadores L_+ y L_- sobre los armónicos esféricos es, respectivamente, subir o bajar en una unidad el índice m , manteniendo el mismo valor de ℓ .

Despejando L_x y L_y en las definiciones [11.5.3], [11.5.4], obtenemos:

$$L_x = \frac{1}{2} (L_+ + L_-) \quad [11.5.9]$$

$$L_y = -\frac{i}{2} (L_+ - L_-) \quad [11.5.10]$$

El resultado de la acción de L_x o L_y sobre una autofunción de L^2 correspondiente al autovalor $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ (cualquier combinación lineal de armónicos esféricos con ℓ fijo) es, pues, otra autofunción correspondiente al mismo autovalor. Este hecho es una consecuencia de que cualquier componente del momento angular conmuta con su cuadrado. De igual forma, la no conmutatividad de las distintas componentes del momento angular entre sí hace que bajo la acción de L_x o L_y sobre un armónico esférico obtengamos una combinación de armónicos esféricos con distintos valores del índice m , específicamente $m + 1$ y $m - 1$.

Las relaciones [11.5.7] a [11.5.10] facilitan enormemente cualquier cálculo relativo al momento angular. Por ejemplo, debido a las propiedades de ortonormalización de los armónicos esféricos, es inmediato que:

$$\iint d\Omega Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) L_x Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \iint d\Omega Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) L_y Y_\ell^m(\theta, \varphi) = 0$$

con lo que, independientemente de cuál sea la parte radial de la función de ondas, para un autoestado de L^2 y L_z se verifica que

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$$

11.6. MOMENTO ANGULAR EN GENERAL. PROPIEDADES Y ESPECTRO

En este apartado estudiaremos las propiedades del momento angular desde un punto de vista algebraico. El método es similar al empleado en el capítulo 8 para hallar las autofunciones y autovalores del oscilador armónico unidimensional. Como se verá más adelante, hay, además del momento angular orbital, otras variables microscópicas tipo momento angular (por ejemplo, espín e isospin), por lo que resulta conveniente un estudio completamente general. Para diferenciar el momento angular genérico del orbital, lo designaremos como \mathbf{J} en lugar de \mathbf{L} . El momento angular general viene definido por las propiedades de conmutación de los operadores hermíticos asociados a sus distintas componentes. Estas propiedades son las mismas que las obtenidas para el momento angular orbital (expresión [11.5.1]):

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \quad , \quad [J_y, J_z] = i\hbar J_x \quad , \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y \quad [11.6.1]$$

y, consecuentemente,

$$[\mathbf{J}^2, J_x] = [\mathbf{J}^2, J_y] = [\mathbf{J}^2, J_z] = 0 \quad [11.6.2]$$

Es conveniente utilizar los operadores

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad [11.6.3]$$

$$J_- = J_x - iJ_y \quad [11.6.4]$$

en lugar de J_x y J_y . Hay que hacer notar que, al contrario que J_x y J_y , J_+ y J_- no son operadores hermíticos, verificándose:

$$J_+^\dagger = J_- \quad , \quad J_-^\dagger = J_+ \quad [11.6.5]$$

De las definiciones [11.6.3] y [11.6.4] y las reglas de conmutación [11.6.1] y [11.6.2], se obtienen fácilmente las relaciones:

$$[J_z, J_+] = \hbar J_+, [J_z, J_-] = -\hbar J_-, [J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad [11.6.6]$$

$$[J^2, J_z] = [J^2, J_+] = [J^2, J_-] = 0 \quad [11.6.7]$$

$$J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z \quad [11.6.8]$$

$$J_- J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z \quad [11.6.9]$$

Utilizaremos en este apartado la notación de Dirac para estados (apartado 7.13 y apéndice B). De la definición del cuadrado del momento angular, obtenemos, para cualquier ket $|\Psi\rangle$:

$$\langle \Psi | J^2 | \Psi \rangle = \|J_x |\Psi\rangle\|^2 + \|J_y |\Psi\rangle\|^2 + \|J_z |\Psi\rangle\|^2 \geq 0$$

Por tanto, los valores propios de J^2 son números reales λ no negativos. Por conveniencia, los escribiremos en la forma $\lambda = j(j+1)\hbar^2$, donde $j \geq 0$ es adimensional. A los autovalores de J_z los llamaremos $m\hbar$ (m adimensional) y a los elementos de la base común de autoestados de J^2 y J_z los denotaremos por $|k, j, m\rangle$, donde k representará un índice (o conjunto de índices) que puede ser discreto o continuo y designará otros posibles números cuánticos. Nuestro problema de autovalores es, pues, encontrar los posibles $j \geq 0$ y m que verifiquen las ecuaciones de valores propios:

$$J^2 |k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |k, j, m\rangle \quad [11.6.10]$$

$$J_z |k, j, m\rangle = m\hbar |k, j, m\rangle \quad [11.6.11]$$

De [11.6.5], [11.6.8] y [11.6.9] obtenemos, suponiendo $|k, j, m\rangle$ normalizado, que:

$$\begin{aligned} \|J_+ |k, j, m\rangle\|^2 &= \langle k, j, m | J_- J_+ |k, j, m\rangle = [j(j+1) - m^2 - m]\hbar^2 = \\ &= (j-m)(j+m+1)\hbar^2 \geq 0 \end{aligned} \quad [11.6.12]$$

$$\begin{aligned} \|J_- |k, j, m\rangle\|^2 &= \langle k, j, m | J_+ J_- |k, j, m\rangle = [j(j+1) - m^2 + m]\hbar^2 = \\ &= (j-m+1)(j+m)\hbar^2 \geq 0 \end{aligned} \quad [11.6.13]$$

y, por tanto, se han de verificar simultáneamente las desigualdades:

$$-(j+1) \leq m \leq j$$

$$-j \leq m \leq j+1$$

lo que implica que:

$$-j \leq m \leq j \quad [11.6.14]$$

Estudiaremos ahora la acción del operador J_- sobre los estados $|k, j, m\rangle$. Si $m = -j$, $J_-|k, j, -j\rangle = 0$, de acuerdo con [11.6.13]. Además, éste es el único valor posible de m que verifica [11.6.14] y la condición $\|J_-|k, j, m\rangle\| = 0$. Si $m > -j$, de las reglas de conmutación [11.6.7], es inmediato que $J_-|k, j, m\rangle$ es un vector propio de J^2 con valor propio $j(j+1)\hbar^2$:

$$J^2 J_-|k, j, m\rangle = J_- J^2|k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 J_-|k, j, m\rangle$$

En cuanto a J_z aplicando [11.6.6], obtenemos:

$$J_z J_-|k, j, m\rangle = J_- J_z|k, j, m\rangle - \hbar J_-|k, j, m\rangle = (m-1)\hbar J_-|k, j, m\rangle$$

luego $J_-|k, j, m\rangle$ es un vector propio de J_z con valor propio $(m-1)\hbar$.

Análogamente, se puede deducir que si $m < j$, $J_+|k, j, m\rangle$ es un vector propio no nulo de J^2 y J_z con valores propios $j(j+1)\hbar^2$ y $(m+1)\hbar$, respectivamente, mientras que si $m = j$, $J_+|k, j, m\rangle = 0$.

Supongamos que tenemos un autoestado cualquiera $|k, j, m\rangle$ de J^2 y J_z . De acuerdo con [11.6.14], $m \geq -j$. Aplicando J_- sucesivas veces, el número cuántico m va bajando una unidad cada vez y llegaremos a un autoestado de J_z con autovalor $(m-p)\hbar$, que verificará:

$$-j \leq m-p < -j+1$$

Si $m-p > -j$, $J_-(J_-)^p|k, j, m\rangle$ es un vector no nulo, autoestado de J_z con autovalor $(m-p-1)\hbar$. Pero $m-p-1 < -j$, lo que está en contradicción con [11.6.14]. Por tanto, forzosamente $m-p = -j$, siendo p un número entero no negativo. Análogamente, aplicando J_+ sucesivas veces, llegaremos a que existe un entero no negativo q tal que $m+q = j$. Restando ambas igualdades, deducimos que $2j = p+q$ es un número entero no negativo. Por tanto, j sólo podrá tomar valores enteros (0, 1, 2, ...) o semienteros (1/2, 3/2, 5/2, ...) no negativos, mientras que para cada valor de j , m será entero o semientero con valores posibles $-j, -j+1, \dots, j-1, j$.

El estudio del momento angular general introduce situaciones con j semientero que no pueden corresponder al momento angular orbital.

11.7. AUTOESTADOS

El conjunto de vectores propios de J^2 y J_z con valores propios $j(j+1)\hbar^2$ y $m\hbar$ es un subespacio vectorial $\mathcal{E}(j, m)$ del espacio de los estados, con una cierta dimensión $g(j, m)$. En este subespacio podemos escoger una base ortonormal cualquiera:

$$\{|k, j, m\rangle, k = 1, 2, \dots, g(j, m)\} \quad [11.7.1]$$

donde hemos supuesto, para simplificar el problema, que el índice k es discreto. Análogamente, si $m \neq j$, existe un subespacio vectorial $\mathcal{E}(j, m + 1)$ de vectores propios de J^2 y J_z con valores propios $j(j + 1)\hbar^2$ y $(m + 1)\hbar$, y si $m \neq -j$, existe $\mathcal{E}(j, m - 1)$.

De las igualdades [11.6.8], [11.6.9], deducimos que:

$$\langle k_2, j, m | J_{\mp} J_{\pm} | k_1, j, m \rangle = [j(j + 1) - m(m \pm 1)] \hbar^2 \langle k_2, j, m | k_1, j, m \rangle \quad [11.7.2]$$

Por tanto:

$$\langle k_2, j, m | J_{\mp} J_{\pm} | k_1, j, m \rangle = 0, \quad \text{si } k_1 \neq k_2 \quad [11.7.3]$$

mientras que, si $k_1 = k_2 = k$,

$$\|J_{\pm} |k, j, m\rangle\|^2 = [j(j + 1) - m(m \pm 1)] \hbar^2 \quad [11.7.4]$$

Definamos los $g(j, m)$ vectores:

$$|k, j, m + 1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{j(j + 1) - m(m + 1)}} J_+ |k, j, m\rangle \quad [11.7.5]$$

son ortonormales (debido a [11.7.3] y [11.7.4]) y, además, constituyen una base de $\mathcal{E}(j, m + 1)$. Para demostrarlo, supongamos que existe un vector $|\alpha, j, m + 1\rangle$ en $\mathcal{E}(j, m + 1)$ ortogonal a todos los obtenidos en [11.7.5]. Entonces, $J_- |\alpha, j, m + 1\rangle (\neq 0, \text{ ya que } m + 1 \neq -j)$ pertenece a $\mathcal{E}(j, m)$ y, debido a [11.7.2], será ortogonal a todos los vectores $J_- |k, j, m + 1\rangle$. Pero estos últimos son, por [11.7.5] y [11.6.9], proporcionales a los $|k, j, m\rangle$. Tenemos, pues, un vector $J_- |\alpha, j, m + 1\rangle$ no nulo de $\mathcal{E}(j, m)$ ortogonal a todos los vectores de la base $\{|k, j, m\rangle\}$, lo que es imposible. Por consiguiente, los vectores definidos mediante [11.7.5] constituyen una base de $\mathcal{E}(j, m + 1)$ y la dimensión de este subespacio será la misma que la de $\mathcal{E}(j, m)$: $g(j, m + 1) = g(j, m)$.

De manera análoga, podemos construir una base de $\mathcal{E}(j, m - 1)$ mediante los $g(j, m)$ vectores:

$$|k, j, m - 1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{j(j + 1) - m(m - 1)}} J_- |k, j, m\rangle \quad [11.7.6]$$

La dimensión de los subespacios $\mathcal{E}(j, m)$ no depende, pues, de m : $g(j, m) = g(j)$ y, conocido un cierto elemento de la base $|k, j, m\rangle$, podemos hallar todos los $|k, j, m\rangle$, con k y j fijos, mediante [11.7.5] y [11.7.6]. Es conveniente introducir los subespacios $\mathcal{E}(k, j)$, definidos por los números cuánticos k y j , con dimensión $2j + 1$, ya que permanecen invariantes bajo la acción de J^2 y J_z .

Autofunciones del momento angular orbital

Como aplicación de la teoría general desarrollada, vamos a calcular las autofunciones del momento angular orbital (armónicos esféricos). En el espacio de posiciones \mathbf{r} , la ecuación de autovalores para L_z , en coordenadas esféricas, tiene la forma:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_\ell^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad [11.7.7]$$

donde hemos omitido la dependencia radial, ya que el momento angular sólo actúa sobre las variables angulares. Integrando la ecuación diferencial [11.7.7], y aplicando la condición de periodicidad en φ , se obtiene que:

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \zeta_{\ell m}(\theta) e^{im\varphi} \quad [11.7.8]$$

con m entero. Por tanto, en el caso del momento angular orbital, los únicos valores que puede tomar ℓ son enteros no negativos. Los j semienteros corresponden a otras representaciones, como es el caso del momento angular intrínseco o espín, que se verá en el capítulo 13.

Cuando $m = \ell$, sabemos que:

$$L_+ Y_\ell^\ell(\theta, \varphi) = 0 \quad [11.7.9]$$

Como $Y_\ell^\ell(\theta, \varphi) = \zeta_{\ell\ell}(\theta) e^{i\ell\varphi}$, sustituyendo [11.5.5] en [11.7.9], obtenemos, para $\zeta_{\ell\ell}(\theta)$:

$$L_+ Y_\ell^\ell(\theta, \varphi) = \hbar e^{i(\ell+1)\varphi} \left(\frac{d}{d\theta} \zeta_{\ell\ell}(\theta) - \ell \cotg \theta \zeta_{\ell\ell}(\theta) \right) = 0$$

de donde:

$$\frac{d\zeta_{\ell\ell}}{\zeta_{\ell\ell}} = \ell \cotg \theta d\theta = \ell \frac{d \operatorname{sen} \theta}{\operatorname{sen} \theta}$$

e integrando: $\zeta_{\ell\ell}(\theta) = C_\ell (\operatorname{sen} \theta)^\ell$, donde C_ℓ es una constante de normalización. Por tanto,

$$Y_\ell^\ell(\theta, \varphi) = C_\ell (\operatorname{sen} \theta)^\ell e^{i\ell\varphi}$$

La condición de normalización será:

$$|C_\ell|^2 2\pi \int_0^\pi (\operatorname{sen} \theta)^{2\ell+1} d\theta = 2\pi |C_\ell|^2 \int_{-1}^1 (1-t^2)^\ell dt = 2\pi \frac{2^{2\ell+1} (\ell!)^2}{(2\ell+1)!} |C_\ell|^2 = 1$$

Usando la misma convención para la fase que en el apartado 11.4, se obtiene que:

$$Y_\ell^\ell(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} (\operatorname{sen} \theta)^\ell e^{i\ell\varphi} \quad [11.7.10]$$

A partir de aquí, aplicando L_- se puede calcular el resto de los armónicos esféricos:

$$Y_\ell^{m-1}(\theta, \varphi) = -\frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad [11.7.11]$$

obteniéndose la expresión general [11.4.8].

CUESTIONES COMPLEMENTARIAS

11.1. Demostración de [11.5.7-8].

De la expresión [11.4.5], es inmediato que:

$$\frac{d}{d\omega} P_\ell^m(\cos \theta) = -(1-\omega^2)^{1/2} \frac{d}{d\omega} P_\ell^m(\omega) = P_\ell^{m+1}(\omega) + m \frac{\omega}{(1-\omega^2)^{1/2}} P_\ell^m(\omega)$$

con lo que, de [11.5.5] y la definición [11.4.8], obtenemos:

$$\begin{aligned} L_+ Y_\ell^m(\theta, \varphi) &= \hbar e^{i\varphi} \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} \right]^{1/2} \left[\frac{d}{d\theta} P_\ell^m(\cos \theta) - m \cotg \theta P_\ell^m(\cos \theta) \right] e^{im\varphi} = \\ &= \hbar \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell+m+1)(\ell-m)(\ell-m-1)!}{(\ell+m+1)!} \right]^{1/2} P_\ell^{m+1}(\cos \theta) e^{i(m+1)\varphi} = \\ &= \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} Y_\ell^{m+1}(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

Análogamente

$$\begin{aligned} L_- Y_\ell^m(\theta, \varphi) &= -\hbar e^{-i\varphi} \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} \right]^{1/2} \left[\frac{d}{d\theta} P_\ell^m(\cos \theta) + m \cotg \theta P_\ell^m(\cos \theta) \right] e^{im\varphi} = \\ &= -\hbar \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} \right]^{1/2} [P_\ell^{m+1}(\cos \theta) + 2m \cotg \theta P_\ell^m(\cos \theta)] e^{i(m-1)\varphi} \end{aligned}$$

Sustituyendo [11.4.5] en la ecuación [11.4.4] con $\lambda = \ell(\ell+1)$, se obtiene la fórmula de recurrencia (apéndice C):

$$P_\ell^{m+1}(\omega) + 2m \frac{\omega}{(1-\omega^2)^{1/2}} P_\ell^m(\omega) + [\ell(\ell+1) - m(m-1)] P_\ell^{m-1}(\omega) = 0$$

con lo que:

$$L_- Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \hbar \left[\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m + 1)!}{(\ell - m + 1)(\ell + m)(\ell + m - 1)!} \right]^{1/2} [\ell(\ell + 1) - m(m - 1)] P_\ell^{m-1}(\cos \theta) e^{i(m-1)\varphi} = \hbar \sqrt{\ell(\ell + 1) - m(m - 1)} Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

EJERCICIOS

11.1. Probar que $[L_+, P] = 0$, donde P es el operador paridad. Como consecuencia de ello, demostrar, usando el álgebra de operadores, que todos los estados con la misma ℓ tienen la misma paridad.

11.2. Hallar las indeterminaciones ΔL_x , ΔL_y para un autoestado de L^2 y L_z .

11.3. Un sistema tiene en un tiempo dado t una función de onda

$$\Psi(x, y, z) = N x^2 e^{-r^2/a^2}$$

donde N es la constante de normalización y a una constante conocida. Encontrar los resultados posibles de la medida de L^2 y L_z y sus probabilidades.

11.4. Probar las relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} [L_z, x] &= i\hbar y \quad , \quad [L_z, y] = -i\hbar x \quad , \quad [L_z, z] = 0 \\ [L_z, p_x] &= i\hbar p_y \quad , \quad [L_z, p_x] = -i\hbar p_x \quad , \quad [L_z, p_z] = 0 \\ [L_z, p^2] &= [L_z, r^2] = [L_z, \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}] = 0 \end{aligned}$$

Escribir las relaciones de conmutación para las otras componentes del vector L , que se obtienen por permutación circular de x, y, z .

Ayuda: $[A, B^2] = [A, B]B + B[A, B]$

11.5. Considérese el subespacio $\mathcal{E}(k, \ell)$ definido por la base de vectores propios comunes a L^2 y L_z , $\{|\ell, m\rangle\}$ (donde, para simplificar la notación, hemos suprimido el índice k). Calcular, en función de los kets $|\ell, m\rangle$, las autofunciones comunes a L^2 y L_z cuando $\ell = 1$.

11.6. Sea un sistema físico con número cuántico azimutal ℓ tal que $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$. ¿Cuáles son, de todos los estados posibles, aquellos para los que $(\Delta L_x)^2 + (\Delta L_y)^2 + (\Delta L_z)^2$ es un mínimo? Demostrar que, para estos estados, la desviación cuadrática media ΔL_α de la componente de \mathbf{L} sobre un eje que forma un ángulo α con el eje z , está dada por:

$$\Delta L_\alpha = \hbar \sqrt{\frac{\ell}{2}} \sin \alpha$$

12

Potenciales centrales

Luis García Gonzalo

12.1. INTRODUCCIÓN

En este capítulo se analizan tres ejemplos de potenciales centrales de gran interés en Física. En cada caso se trata de encontrar las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger correspondientes al espectro discreto de energías (estados ligados). Como se vio en el capítulo anterior, la ecuación de autovalores para un potencial central es separable en coordenadas esféricas y se reduce, para un valor dado del número cuántico azimutal ℓ , a resolver la ecuación radial [11.4.15] para cada potencial $V(r)$.

Si definimos la función $\chi(r) = rR(r)$, se obtiene fácilmente que

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{1}{r} \frac{d^2 \chi}{dr^2}$$

y la ecuación radial [11.4.15] pasa a ser:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + V_{ef}(r) \chi(r) = E \chi(r) \quad [12.1.1]$$

donde

$$V_{ef}(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad [12.1.2]$$

La ecuación [12.1.1] tiene la misma forma que la ecuación de Schrödinger estacionaria en una dimensión, pero el potencial que aparece en la ecuación es el potencial efectivo V_{ef} , definido por la expresión [12.1.2].

Tanto la función $R(r)$ [o, equivalentemente, $\chi(r)$] como su derivada han de ser continuas para cualquier valor de r . Además, para estados ligados, la función de ondas debe

ser una función de cuadrado integrable normalizada a la unidad y, por tanto, ha de verificar la condición [11.4.17]:

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = \int_0^{\infty} |\chi(r)|^2 dr = 1 \quad [12.1.3]$$

Consecuentemente, la función radial ha de ser regular en el origen y tener un comportamiento adecuado en el infinito ($\chi(r) \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow \infty$). Estas condiciones son distintas del caso unidimensional, ya que allí el dominio de definición iba de $-\infty$ a $+\infty$, en lugar de 0 a ∞ , como ocurre con r en el caso tridimensional.

Si suponemos que el potencial $V(r)$ tiene un comportamiento más suave que $1/r^2$ cerca del origen (es decir, $V(r) \sim r^\alpha$ cuando $r \rightarrow 0$, con $\alpha > -2$), el potencial efectivo estará dominado por el segundo sumando de la expresión [12.1.2] cuando $r \rightarrow 0$. En el límite asintótico $r \rightarrow 0$, la ecuación [12.1.1] podrá escribirse como:

$$\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \chi(r) = 0$$

con solución general

$$\chi(r) = Ar^{\ell+1} + Br^{-\ell}$$

El coeficiente B ha de anularse, ya que, de lo contrario, la función radial $R(r)$ ($=\chi(r)/r$) divergería en el origen. Por tanto, $R(r) \sim r^\ell$ cuando $r \rightarrow 0$.

De manera análoga, se puede estudiar el comportamiento asintótico cuando $r \rightarrow \infty$, aunque la solución en este caso dependerá del tipo de potencial que se esté considerando.

La información más inmediata que podemos obtener de la resolución de la ecuación de autovalores del hamiltoniano es la probabilidad de encontrar la partícula en un elemento de volumen $d^3r = r^2 dr d\Omega$ alrededor de r , que viene dada por

$$|\Phi(\mathbf{r})|^2 d^3r = |R(r)|^2 |Y_\ell^m(\theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega$$

Por tanto, la probabilidad de encontrar la partícula entre r y $r + dr$ vendrá dada por

$$|R(r)|^2 r^2 dr \int |Y_\ell^m(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = |R(r)|^2 r^2 dr$$

Así pues, la función $|R(r)|^2 r^2$ es la densidad de probabilidad de presencia de la partícula entre r y $r + dr$, y, como tal, debe estar normalizada al integrar en la variable radial r (ecuación [12.1.3]).

12.2. POZO ESFÉRICO. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN RADIAL

Uno de los casos más simples de potencial central es el pozo esférico (pozo cuadrado en tres dimensiones), representado en la figura 12.1 y que viene definido por:

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & \text{para } r < a \\ 0 & \text{para } r > a \end{cases} \quad [12.2.1]$$

siendo $V_0 < 0$. Como se verá en el apartado 36.6, éste es, en primera aproximación, el potencial al que se encuentra sometido un nucleón (protón o neutrón) dentro del núcleo. Para encontrar las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger hemos de resolver la ecuación radial [11.4.15]. Como estamos interesados en estados ligados, los autovalores E del hamiltoniano verificarán: $V_0 < E < 0$.

Comenzaremos por el caso $\ell = 0$. La función $\chi(x) = rR(r)$ verifica la ecuación [12.1.1], que para el potencial definido en [12.2.1] con $\ell = 0$, toma la forma:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + V_0 \chi(r) &= E \chi(r) & \text{para } r < a \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} &= E \chi(r) & \text{para } r > a \end{aligned} \quad [12.2.2]$$

Esta ecuación es la misma que la del pozo cuadrado unidimensional [8.3.2], pero con diferentes condiciones de contorno, ya que ahora hemos de aplicarlas en $r = 0$ y en $r = \infty$.

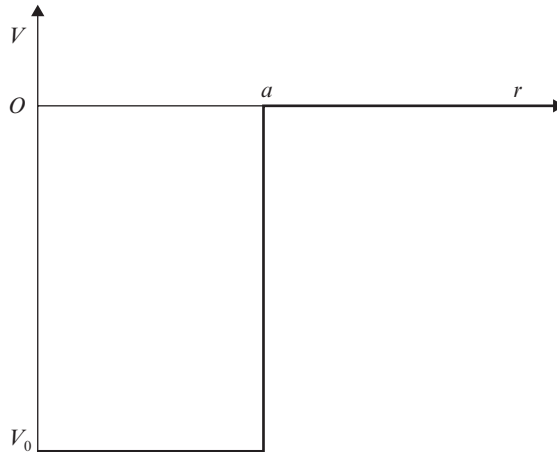


Figura 12.1. Energía potencial del pozo esférico.

Las soluciones con comportamiento adecuado en el infinito son:

$$\chi(r) = \begin{cases} A \operatorname{sen} k_1 r + B \operatorname{cos} k_1 r & r < a \\ C e^{-k_2 r} & r > a \end{cases} \quad [12.2.3]$$

donde

$$\begin{aligned} k_1 &= \sqrt{2\mu(E - V_0)/\hbar^2} \\ k_2 &= \sqrt{-2\mu E/\hbar^2} \end{aligned} \quad [12.2.4]$$

Por condiciones de regularidad en el origen, el coeficiente B se anula, ya que, de lo contrario, la función de ondas divergería en el origen al ser proporcional a $\chi(r)/r$. Por tanto, sólo las soluciones impares del pozo unidimensional (apartado 8.3) son válidas en este problema. Los niveles de energía vienen determinados por la condición de continuidad de R y dR/dr (o, equivalentemente, χ y $d\chi/dr$) en $r = a$ (véase ecuación [8.3.6]):

$$\left. \frac{1}{\chi} \frac{d\chi}{dr} \right|_{r=a} = k_1 \operatorname{cotg} k_1 a = -k_2 \quad [12.2.5]$$

Los métodos de solución de la ecuación trascendente [12.2.5] ya fueron descritos en el apartado 8.3. El número de estados ligados del pozo esférico con $\ell = 0$ corresponderá al número de soluciones impares del pozo cuadrado unidimensional y, aplicando el razonamiento del final del apartado 8.3, vendrá dado por

$$N = \left[\frac{1}{2} + \frac{av}{\pi} \right]$$

siendo $v = \sqrt{-2\mu V_0/\hbar^2}$ y $[\cdot]$ la función parte entera. Por tanto, en el caso del pozo esférico, no hay estados ligados con $\ell = 0$ si $-V_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2 / 8\mu$.

Soluciones para ℓ arbitrario

En el caso general, es más conveniente trabajar con la función radial R en lugar de χ . La ecuación radial [11.4.15] toma la forma:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[k_1^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R &= 0 \quad \text{para } r < a \\ \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[-k_2^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R &= 0 \quad \text{para } r > a \end{aligned} \quad [12.2.6]$$

donde k_1 y k_2 fueron definidos en [12.2.4].

Haciendo el cambio de la variable radial r a la variable adimensional $\rho = k_1 r$, la ecuación radial para $r < a$ pasa a ser:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \quad [12.2.7]$$

La solución general de la ecuación diferencial [12.2.7] es una combinación lineal de las funciones esféricas de Bessel de primera y segunda clase, j_ℓ e y_ℓ (apéndice C):

$$R(r) = A j_\ell(k_1 r) + B y_\ell(k_1 r) \quad [12.2.8]$$

Estas funciones pueden expresarse como suma de productos de $\sin \rho$, $\cos \rho$ con polinomios en $1/\rho$. En particular, para los primeros valores de ℓ :

$$\begin{aligned} j_0(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho} & , & & y_0(\rho) &= -\frac{\cos \rho}{\rho} \\ j_1(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho} & , & & y_1(\rho) &= \frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho} \\ j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho & , & & y_2(\rho) &= \left(-\frac{3}{\rho^3} + \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho \end{aligned}$$

De forma general, pueden escribirse como:

$$j_\ell(\rho) = \rho^\ell \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\sin \rho}{\rho} \quad , \quad y_\ell(\rho) = -\rho^\ell \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\cos \rho}{\rho} \quad , \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Su comportamiento asintótico cuando $\rho \rightarrow 0$ es:

$$j_\ell(\rho) \sim \frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!} \quad , \quad y_\ell(\rho) \sim -\frac{(2\ell-1)!!}{\rho^{\ell+1}}$$

Por tanto, por condiciones de regularidad en el origen, el coeficiente B en [12.2.8] se anula:

$$R(r) = A j_\ell(k_1 r) \quad \text{para} \quad r < a \quad [12.2.9]$$

Fuera del pozo ($r > a$), volvemos a obtener la ecuación [12.2.7] mediante el cambio de variable $\rho = ik_2 r$. La solución será, por tanto, de la forma:

$$R(r) = A'j_\ell(ik_2 r) + B'y_\ell(ik_2 r)$$

y deberá comportarse adecuadamente cuando $r \rightarrow \infty$, de forma que la función de ondas sea de cuadrado integrable.

El comportamiento asintótico de las funciones esféricas de Bessel cuando $\rho \rightarrow \infty$ es de la forma (para $|\arg \rho| < \pi$):

$$j_\ell(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \cos \left[\rho - \frac{1}{2}(\ell + 1)\pi \right] \quad , \quad y_\ell(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \text{sen} \left[\rho - \frac{1}{2}(\ell + 1)\pi \right]$$

Resulta conveniente, en este caso, definir las combinaciones lineales (funciones esféricas de Bessel de tercera clase):

$$h_\ell^{(1)}(\rho) = j_\ell(\rho) + iy_\ell(\rho)$$

$$h_\ell^{(2)}(\rho) = j_\ell(\rho) - iy_\ell(\rho)$$

con comportamiento asintótico cuando $\rho \rightarrow \infty$:

$$h_\ell^{(1)}(\rho) \sim \frac{1}{\rho} e^{i\left[\rho - \frac{1}{2}(\ell + 1)\pi\right]} \quad , \quad h_\ell^{(2)}(\rho) \sim \frac{1}{\rho} e^{-i\left[\rho - \frac{1}{2}(\ell + 1)\pi\right]}$$

Como $\rho = ik_2 r$, la combinación lineal con comportamiento asintótico correcto será $h_\ell^{(1)}(ik_2 r)$, con lo que la función radial para $r > a$ toma la forma:

$$R(r) = Bh_\ell^{(1)}(ik_2 r) = B[j_\ell(ik_2 r) + iy_\ell(ik_2 r)] \quad \text{para } r > a \quad [12.2.10]$$

Las primeras tres funciones son:

$$h_0^{(1)}(ik_2 r) = -\frac{1}{k_2 r} e^{-k_2 r}$$

$$h_1^{(1)}(ik_2 r) = i \left(\frac{1}{k_2 r} + \frac{1}{k_2^2 r^2} \right) e^{-k_2 r}$$

$$h_2^{(1)}(ik_2 r) = \left(\frac{1}{k_2 r} + \frac{3}{k_2^2 r^2} + \frac{3}{k_2^3 r^3} \right) e^{-k_2 r}$$

Los niveles de energía se obtienen, para cada valor de ℓ , por la condición de continuidad en $r = a$ de la derivada logarítmica de $R(r)$. De las expresiones [12.2.9] y [12.2.10], es inmediato que

$$\frac{1}{R} \frac{dR}{dr} \Big|_{r=a} = k_1 \frac{j'_\ell(k_1 a)}{j_\ell(k_1 a)} = ik_2 \frac{h_\ell^{(1)'}(ik_2 a)}{h_\ell^{(1)}(ik_2 a)} \quad [12.2.11]$$

donde la prima indica derivada respecto al argumento de la función de Bessel correspondiente.

La expresión [12.2.11] puede simplificarse si usamos la fórmula de recurrencia (apéndice C):

$$j'_\ell(\rho) = j_{\ell-1}(\rho) - \frac{\ell-1}{\rho} j_\ell(\rho) = -j_{\ell+1}(\rho) + \frac{\ell}{\rho} j_\ell(\rho)$$

que también se verifica para $y_\ell(\rho)$ y, por tanto, para $h_\ell^{(1)}(\rho)$. Con estas fórmulas, la relación [12.2.11] puede escribirse como

$$k_1 \frac{j_{\ell+1}(k_1 a)}{j_\ell(k_1 a)} = ik_2 \frac{h_{\ell+1}^{(1)}(ik_2 a)}{h_\ell^{(1)}(ik_2 a)} \quad [12.2.12]$$

o bien como

$$k_1 \frac{j_{\ell-1}(k_1 a)}{j_\ell(k_1 a)} = ik_2 \frac{h_{\ell-1}^{(1)}(ik_2 a)}{h_\ell^{(1)}(ik_2 a)} \quad \text{cuando } \ell > 0 \quad [12.2.13]$$

Cuando aplicamos la condición de continuidad de la función de ondas al caso $\ell > 0$, obtenemos la igualdad [12.2.5]. Para el caso $\ell = 1$, se obtiene fácilmente de [12.2.13] la condición:

$$\frac{\cotg \xi}{\xi} - \frac{1}{\xi^2} = \frac{1}{\eta} + \frac{1}{\eta^2}, \quad \text{con } \xi^2 + \eta^2 = -\frac{2\mu V_0 a^2}{\hbar^2} \quad [12.2.14]$$

donde $\xi = k_1 a$ y $\eta = k_2 a$. La ecuación no puede verificarse para $0 \leq \xi < \pi$, ya que entonces $\cotg \xi < 1/\xi$. Por tanto, es inmediato de [12.2.14] que si $-V_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2 / 2\mu$, no podemos tener estados ligados con $\ell = 1$.

La condición que debe verificar el pozo para que haya estados ligados es, pues, más restrictiva en el caso $\ell = 1$ que para $\ell = 0$: el valor mínimo de $-V_0 a^2$ para el que existen

estados ligados con $\ell = 1$ es mayor que el valor mínimo correspondiente con $\ell = 0$. Como ya comentamos en la introducción, el término en ℓ en la ecuación de ondas radial tiene el papel de una energía potencial adicional, correspondiente a la «fuerza centrífuga», que da lugar a un potencial efectivo con menor profundidad y anchura media a medida que ℓ aumenta (figura 12.2). Una partícula con momento angular requiere, para estar ligada, un potencial atractivo más fuerte que una partícula sin momento angular. El valor mínimo de la cantidad $-V_0 a^2$ requerido para ligar una partícula con un número cuántico ℓ correspondiente al momento angular orbital, aumenta monótonamente con el valor de ℓ .

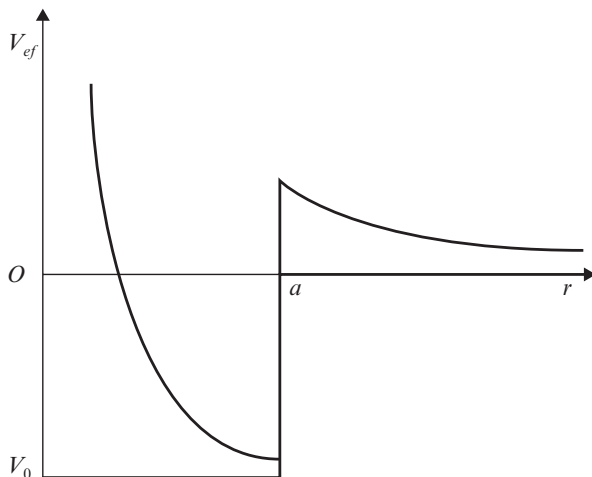


Figura 12.2. Potencial efectivo del pozo esférico con $\ell = 0$ y $\ell \neq 0$.

Como consecuencia del razonamiento anterior, es interesante destacar que en tres dimensiones, al contrario que en el caso unidimensional, puede ocurrir que no existan estados ligados de un pozo de potencial. Éste será el caso cuando la anchura y profundidad del pozo esférico verifiquen que $-V_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2 / 8\mu$. La otra diferencia importante es que en el caso tridimensional el espectro de energías para estados ligados es, en general, degenerado (siempre que tengamos soluciones con $\ell > 0$), mientras que en una dimensión vimos que el espectro era no degenerado.

A modo de ilustración, en la figura 12.3 se representan los niveles de energía $E_{n\ell}$ ($n = 1, 2, \dots$) y sus correspondientes funciones radiales $rR_{n\ell}(r)$ para un pozo de profundidad y anchura tales que $-2\mu V_0 a^2 / \hbar^2 = 25$. Para designar los distintos valores de ℓ se utiliza en la figura la notación espectroscópica, cuyo origen es anterior al desarrollo de la Mecánica Cuántica y corresponde a una clasificación empírica de las distintas rayas observadas en los espectros atómicos. Esta notación asocia letras del alfabeto a los distintos valores de ℓ : la letra *s* corresponde a $\ell = 0$, la letra *p* a $\ell = 1$, la letra *d* a $\ell = 2$, la letra *f* a $\ell = 3$, la letra *g* a $\ell = 4$, y así sucesivamente en orden alfabético.

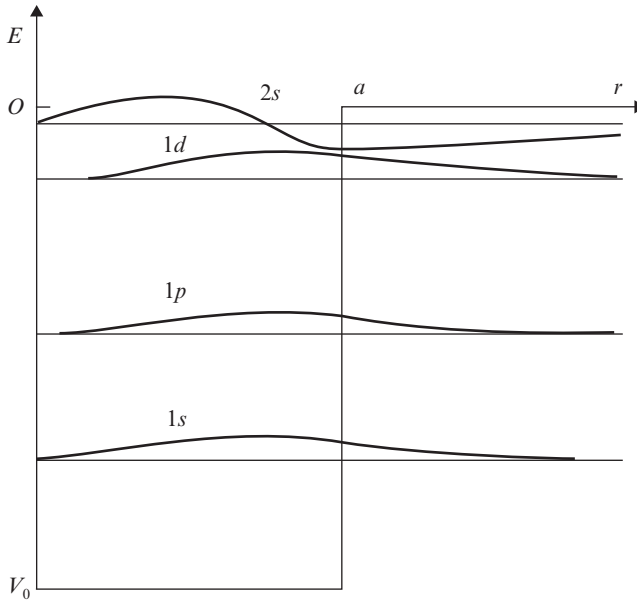


Figura 12.3. Funciones radiales $rR_{nl}(r)$ para un pozo esférico. Las gráficas están representadas en el nivel de energía correspondiente.

El número de estados ligados en el caso representado en la figura 12.3 es cuatro: dos con $\ell = 0$ (onda s), uno con $\ell = 1$ (onda p) y otro con $\ell = 2$ (onda d). Para un valor fijo de ℓ , el número cuántico n designa el espectro de energías, en orden creciente con n . Hay que hacer notar que el número cuántico n es el número de nodos dentro del pozo de la función producto de r por la autofunción radial $R_{nl}(r)$ (figura 12.3). Para un valor fijo de n , el espectro de energías es creciente con ℓ , ya que, como se vio anteriormente, la energía necesaria para ligar la partícula al pozo aumenta con la magnitud del momento angular. Este hecho es independiente de la forma del pozo de potencial, así como lo es el comportamiento de la autofunción radial cerca del origen: $R_{nl}(r) \sim r^\ell$ cuando $r \rightarrow 0$, que hace que la probabilidad de encontrar la partícula cerca del origen disminuya a medida que ℓ aumenta, para un valor de n dado.

12.3. POTENCIAL COULOMBIANO: ÁTOMO DE HIDRÓGENO

El segundo tipo de potencial que vamos a estudiar, cuya correspondiente ecuación de autovalores puede resolverse analíticamente, es de la forma:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \tag{12.3.1}$$

Este potencial describe la energía coulombiana de interacción entre un núcleo de carga $Z|e|$ y un electrón de carga e . Es un caso particularmente interesante, ya que fue el primer sistema al que Schrödinger aplicó su ecuación y las energías obtenidas coincidieron con el modelo de Bohr y los resultados experimentales, sirviendo como primera verificación de la teoría de Schrödinger. Además, la solución de la ecuación de Schrödinger proporciona una información mucho mayor que la teoría de Bohr, ya que no sólo predice los autoestados, sino también las autofunciones. De éstas, se puede obtener información acerca de las siguientes propiedades:

1. La densidad de probabilidad, que nos permite conocer la estructura del átomo sin que haya una violación del principio de incertidumbre, como ocurría con las órbitas precisas del modelo de Bohr.
2. El momento angular del átomo, que fue incorrectamente predicho por el modelo de Bohr.
3. El ritmo con que el átomo hace transiciones de estados excitados al fundamental, que no puede predecirse del modelo de Bohr.

En este apartado se van a estudiar los autovalores y autofunciones para un átomo hidrogenoideo, entendiendo por tal un átomo con un sólo electrón (átomo de hidrógeno, átomo de helio ionizado una vez, isótopos del hidrógeno: deuterio, tritio, etc.). No se va a incluir en el estudio el espín ni los efectos relativistas, ni tampoco se van a estudiar las transiciones entre niveles de energía. Todas estas propiedades se analizarán detalladamente en los capítulos 19 y 20.

La ecuación radial, para un valor de ℓ dado, es de la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} R + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} R = ER \quad [12.3.2]$$

siendo μ la masa reducida del electrón y el núcleo y r la distancia relativa entre ellos. En la figura 12.4 se representa el potencial efectivo para un valor dado de ℓ (con $\ell \neq 0$, aunque los razonamientos son los mismos para $\ell = 0$). El espectro de energías tiene una parte continua correspondiente a $E > 0$ en la que no existe ninguna restricción a los valores posibles de la energía, y una parte discreta correspondiente a $E < 0$ (estados ligados), en la que los valores que puede tomar la energía están determinados por las condiciones de regularidad de la función de ondas en el origen y en el infinito. En el caso clásico, el movimiento está limitado a un intervalo radial cuando la energía es negativa, tal como se muestra en la figura.

Estamos interesados en el cálculo del espectro de energías discreto y sus autofunciones correspondientes. Mediante el cambio a una variable adimensional $\rho = \alpha r$, donde la constante α será definida a continuación, la ecuación radial pasa a ser:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[\frac{2\mu}{\alpha^2 \hbar^2} E + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \quad [12.3.3]$$

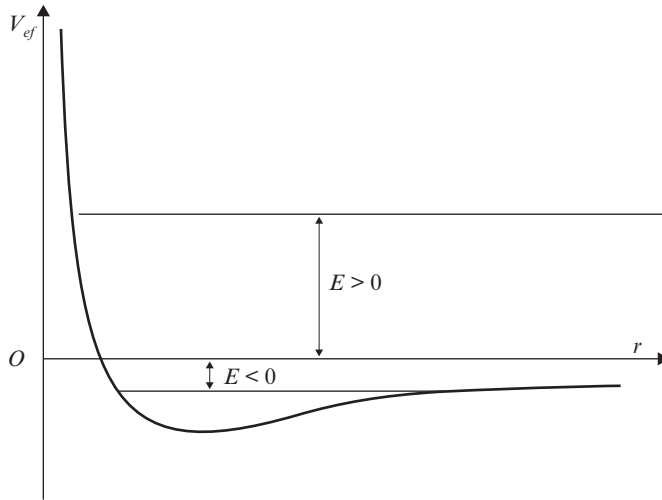


Figura 12.4. Potencial efectivo de Coulomb cuando $\ell \neq 0$.

donde

$$\lambda = \frac{1}{\alpha} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\mu}{\hbar^2}$$

Por conveniencia, elegimos α de tal forma que el coeficiente constante que multiplica a R sea $-1/4$, con lo que:

$$\alpha = \sqrt{-\frac{8\mu E}{\hbar^2}} \quad , \quad \lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \sqrt{-\frac{\mu}{2E}} \quad [12.3.4]$$

En el límite asintótico $\rho \rightarrow \infty$, la ecuación puede escribirse como

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{1}{4} R = 0$$

que tiene como solución $R = \rho^n e^{\pm \rho/2}$, siendo n un número entero. Esto sugiere escribir R como el producto de la función $e^{-\rho/2}$ por un polinomio en ρ (la exponencial creciente no es una solución válida por diverger cuando $\rho \rightarrow \infty$):

$$R(\rho) = F(\rho)e^{-\rho/2} \quad [12.3.5]$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación [12.3.3], se obtiene la ecuación que debe verificar F :

$$\frac{d^2 F}{d\rho^2} + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right) \frac{dF}{d\rho} + \left[\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho^2}\right] F = 0 \quad [12.3.6]$$

Llamando s a la potencia más baja del polinomio F , éste se puede escribir en la forma:

$$F(\rho) = \rho^s L(\rho), \quad \text{donde } L(\rho) = a_0 + a_1 \rho + \dots \quad \text{con } a_0 \neq 0 \quad [12.3.7]$$

La ecuación diferencial que debe verificar L se obtiene de forma inmediata de [12.3.6]:

$$\rho^2 \frac{d^2 L}{d\rho^2} + \rho[2(s + 1) - \rho] \frac{dL}{d\rho} + [\rho(\lambda - s - 1) + s(s + 1) - \ell(\ell + 1)]L = 0 \quad [12.3.8]$$

Para $\rho = 0$, queda: $[s(s + 1) - \ell(\ell + 1)]L(0) = 0$. Pero $L(0)$ no puede anularse, luego

$$s(s + 1) - \ell(\ell + 1) = 0 \Rightarrow \begin{cases} s = \ell \\ s = -(\ell + 1) \end{cases}$$

Como $\ell \geq 0$, sólo la primera de las soluciones verifica la condición de regularidad en el origen. Este resultado era previsible, ya que, como se vio anteriormente, la autofunción radial se comporta como r^ℓ cerca del origen.

En resumen, la solución de la ecuación radial para un potencial coulombiano puede escribirse como:

$$R(\rho) = \rho^\ell L(\rho) e^{-\rho/2}, \quad \text{con } L = a_0 + a_1 \rho + \dots \quad (a_0 \neq 0), \quad \rho = ar \quad [12.3.9]$$

donde L satisface la ecuación diferencial:

$$\rho \frac{d^2 L}{d\rho^2} + (2\ell + 2 - \rho) \frac{dL}{d\rho} + (\lambda - \ell - 1)L = 0 \quad [12.3.10]$$

y las constantes α y λ están definidas en [12.3.4].

La ecuación [12.3.10] puede resolverse mediante la sustitución de L por la serie de potencias [12.3.9] en dicha ecuación. Se puede ver fácilmente de igualar a cero el coeficiente de ρ^j en [12.3.10], que la relación de recurrencia para los sucesivos coeficientes viene dada por:

$$a_{j+1} = \frac{j + \ell + 1 - \lambda}{(j + 1)(j + 2\ell + 2)} a_j \quad [12.3.11]$$

Si la serie de potencias tuviese infinitos términos, su comportamiento asintótico vendría determinado por los coeficientes con $j \rightarrow \infty$:

$$\frac{a_{j+1}}{a_j} \xrightarrow{j \rightarrow \infty} \frac{1}{j}$$

Este comportamiento corresponde a la serie de potencias de $\rho^n e^\rho$, con n finito. De la expresión [12.3.9], es inmediato que en este caso la función radial divergería en el infinito. Por tanto, L ha de ser un polinomio con un número finito de términos. Si la potencia más alta del polinomio es ρ^{n_r} , con $n_r \geq 0$ finito, de la condición [12.3.11], se obtiene, haciendo $a_{n_r+1} = 0$, que λ ha de ser un entero n positivo tal que

$$\lambda = n = n_r + \ell + 1 \quad [12.3.12]$$

El comportamiento correcto de la autofunción en el infinito nos lleva a una discretización de los posibles valores de λ y, consecuentemente, de la energía, ya que de la expresión [12.3.4] es inmediato que el espectro de energías para un ℓ dado viene dado por:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \quad \text{con } n = \ell + 1, \ell + 2, \dots \quad [12.3.13]$$

El índice n_r se llama número cuántico radial, mientras n es el número cuántico principal.

Al contrario que el pozo esférico finito, el potencial de Coulomb da lugar a un número infinito de energías posibles comprendidas entre E_1 y 0. Esto es debido a que es una interacción de largo alcance que decae lentamente cuando $r \rightarrow \infty$.

Autovalores y autofunciones

En este punto es conveniente hacer una aclaración sobre la diferencia de notación empleada en el pozo esférico y el potencial coulombiano. En el caso del pozo esférico, se obtiene, para un valor de ℓ dado, un espectro de niveles de energía $E_{n\ell}$, $n = 1, 2, \dots$, con sus correspondientes autofunciones radiales $R_{n\ell}(r)$. El número cuántico n coincide con el número de nodos de la función $rR_{n\ell}(r)$. En el caso de un potencial de Coulomb, para un valor de ℓ dado, los autovalores y autofunciones del hamiltoniano vienen descritos por el número cuántico n_r ($n_r = 0, 1, \dots$), que es el orden del polinomio L correspondiente. El número de nodos de la función $rR(r)$ será $n_r + 1$. Por tanto, el índice $n_r + 1$ tiene en el potencial coulombiano el mismo papel que el índice n en el pozo esférico. Sin embargo, el índice n que usamos en el potencial coulombiano para describir el espectro de energías, E_n y sus autofunciones correspondientes, $R_{n\ell}(r)$, no es $n_r + 1$, sino $n_r + 1 + \ell$. El motivo de este cambio de notación es que, en el potencial coulombiano, la energía es la misma para todas las autofunciones con números cuánticos n_r y ℓ tales que $n = n_r + 1 + \ell$ sea constan-

te, de ahí que resulte un número cuántico mucho más conveniente. Resumiendo, el índice que llamamos n en el caso del potencial coulombiano es $n + \ell$ en el problema del pozo esférico y, mientras en este último caso, para un ℓ dado, n puede tomar cualquier valor (limitado sólo por el número de estados ligados del problema que se trate), en el caso del potencial de Coulomb, n , por definición, es siempre mayor que ℓ (o, dicho de otra forma, los valores posibles de ℓ para un n dado son: $0, 1, 2, \dots, n - 1$).

Volviendo a las autofunciones del potencial de Coulomb, vimos que podían expresarse en función de unos polinomios L de orden $n - \ell - 1$ con una ley de recurrencia [12.3.11] conocida. Sólo quedaría por determinar el coeficiente a_0 , y esto se hace mediante la condición de normalización de la función de ondas. Estos polinomios L son proporcionales a los polinomios generalizados de Laguerre, descritos en el apéndice C, de los que vamos a dar aquí sus propiedades más importantes.

Los polinomios de Laguerre $L_q(\rho)$ son polinomios de orden q , que verifican la ecuación diferencial:

$$\rho L_q'' + (1 - \rho)L_q' + qL_q = 0 \quad [12.3.14]$$

mientras que los generalizados vienen definidos por

$$L_q^p(\rho) = (-1)^p \frac{d^p}{d\rho^p} L_{q+p}(\rho)$$

y satisfacen la ecuación:

$$\rho L_q^{p''} + (p + 1 - \rho)L_q^{p'} + qL_q^p = 0 \quad [12.3.15]$$

que es idéntica a [12.3.10] si hacemos $\lambda = n$, $p = 2\ell + 1$, $q = n - \ell - 1$. Por tanto, la solución de [12.3.10] es proporcional al polinomio generalizado de Laguerre $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho)$. La forma explícita de este polinomio es:

$$L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n-\ell-1} (-1)^k \frac{(n + \ell)! \rho^k}{(n - \ell - 1 - k)! (2\ell + 1 + k)! k!}$$

La normalización de las autofunciones radiales [12.3.9] se obtiene utilizando la evaluación de las integrales (apéndice C):

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2\ell} [L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho)]^2 \rho^2 d\rho = \frac{2n(n + \ell)!}{(n - \ell - 1)!}$$

Antes de pasar a escribir la expresión de la autofunción radial, vamos a expresar α de una forma más conveniente usando [12.3.4] y [12.3.13]:

$$\alpha = \sqrt{\frac{8\mu}{\hbar^2} \frac{\mu}{2\hbar^2 n^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}} = \frac{2Z}{na_0} \quad , \quad \text{donde} \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$$

Las autofunciones radiales debidamente normalizadas son:

$$R_{n\ell}(r) = \frac{2}{n^2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left[\frac{(n-\ell-1)!}{(n+\ell)!} \right]^{1/2} e^{-\rho/2} \rho^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho) \quad [12.3.16]$$

donde

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \quad , \quad \rho = \frac{2Z}{na_0} r \quad [12.3.17]$$

mientras los niveles de energía pueden escribirse en la forma:

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2} \quad , \quad \text{donde} \quad E_I = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z^2 e^2}{2a_0} \quad [12.3.18]$$

En el caso de un átomo hidrogenoide, E_I es la energía de ionización del átomo, es decir, la energía necesaria para liberar del átomo un electrón que se encuentra en el estado fundamental (estado de energía más baja: $n = 1$).

La expresión explícita de las autofunciones con $n = 1, 2, 3$, es:

$$\begin{aligned} R_{10} &= \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0} \quad , \quad R_{20}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} \\ R_{30}(r) &= \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \left[2 - 4\frac{Zr}{3a_0} + \frac{4}{3}\left(\frac{Zr}{3a_0}\right)^2\right] e^{-Zr/3a_0} \\ R_{21}(r) &= \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{\sqrt{3}a_0} e^{-Zr/2a_0} \quad , \quad R_{31}(r) = \left(\frac{2Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{9a_0} \left(2 - \frac{Zr}{3a_0}\right) e^{-Zr/3a_0} \\ R_{32}(r) &= \left(\frac{2Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{3\sqrt{5}} \left(\frac{Zr}{3a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0} \end{aligned}$$

En la figura 12.5 se representa la distribución de la densidad de probabilidad de presencia de la partícula entre r y $r + dr$, dada por $|R_{n\ell}(r)|^2 r^2$, para $n = 1, 2, 3$. Se observa que,

para cada par de números cuánticos n y ℓ , la densidad de probabilidad tiene un valor apreciable sólo en un determinado rango de la coordenada radial. Es decir, la partícula tiene una alta probabilidad de encontrarse en una «capa» definida por dos esferas concéntricas centradas en el origen. Una forma de ver esta propiedad de una manera cuantitativa es mediante el cálculo del valor esperado de r y r^2 . De la evaluación de las integrales resultantes (apéndice C), se obtiene que:

$$\langle r \rangle_{n\ell} = \int_0^\infty r |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr = [3n^2 - \ell(\ell + 1)] \frac{a_0}{2Z} \quad [12.3.19]$$

$$\langle r^2 \rangle_{n\ell} = \int_0^\infty r^2 |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr = [5n^2 + 1 - 3\ell(\ell + 1)] \frac{n^2 a_0^2}{2Z^2} \quad [12.3.20]$$

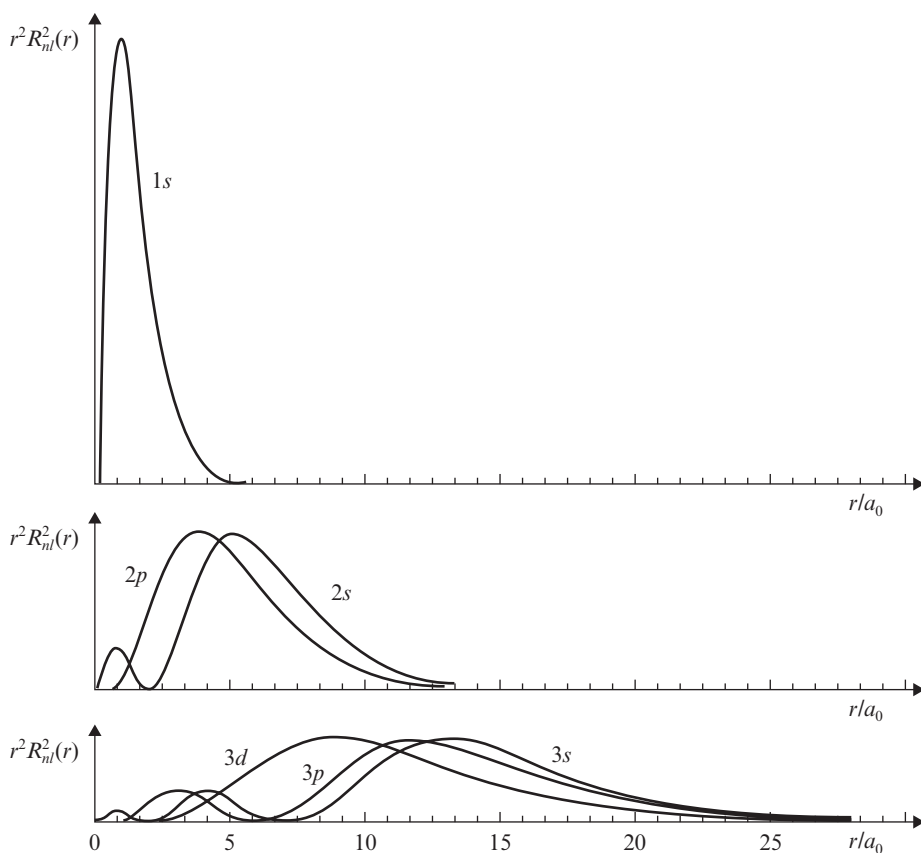


Figura 12.5. Densidad de probabilidad $r^2 R_n^2(r)$ para las primeras autofunciones del átomo de hidrógeno.

El valor esperado de r caracteriza el radio de la «capa», mientras su anchura viene determinada por la desviación cuadrática media $\Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2}$. Para un valor dado de n , $\langle r \rangle$ y Δr decrecen con ℓ , variando entre

$$\langle r \rangle_{n,0} = \frac{3}{2} \frac{n^2 a_0}{Z} \quad , \quad (\Delta r)_{n,0} = \sqrt{n^2 + 2} \frac{n a_0}{2Z} \quad [12.3.21]$$

y

$$\langle r \rangle_{n,n-1} = (2n+1) \frac{n a_0}{2Z} \quad , \quad (\Delta r)_{n,n-1} = \sqrt{2n+2} \frac{n a_0}{2Z} \quad [12.3.22]$$

De las fórmulas anteriores se desprende que el valor esperado de r depende fundamentalmente de n y esta dependencia con el número cuántico principal es cuadrática: $\langle r \rangle_{n\ell} \propto n^2 a_0 / Z$. El factor de proporcionalidad varía entre 1 y 3/2, dependiendo del valor de ℓ . La fuerte dependencia del valor medio del radio con n es una consecuencia de la forma del potencial de Coulomb. Como puede verse en la figura 12.4, el pozo de potencial efectivo se ensancha rápidamente cuando el valor absoluto de la energía se hace pequeño (n grande).

Otra cantidad interesante en la caracterización de las autofunciones radiales es el valor de r para el que la densidad de probabilidad se hace máxima, que denotaremos como $r_{\text{máx}}$. Cuando $\ell = n - 1$, la densidad de probabilidad tiene un único máximo local en la posición radial

$$(r_{\text{máx}})_{n,n-1} = \frac{n^2 a_0}{Z} \quad [12.3.23]$$

Degeneración accidental

Para un ℓ fijado, existe un número infinito de autovalores posibles de la energía, que vienen dados por la fórmula [12.3.13]. Como se vio en el capítulo anterior, cada uno de ellos está degenerado al menos $2\ell + 1$ veces: es lo que se conoce como degeneración «esencial» y está ligada al hecho de que la ecuación radial no depende del número cuántico magnético m . Pero, además, en el caso del potencial de Coulomb, existe una degeneración «accidental»: la fórmula [12.3.12] indica que valores propios del hamiltoniano, correspondientes a ecuaciones radiales diferentes ($\ell \neq \ell'$), son iguales cuando $n_r + \ell = n'_r + \ell'$. Como n_r es un entero mayor o igual que cero, habrá un número finito de valores de ℓ asociados a un mismo valor de n . Éstos serán, de acuerdo con [12.3.12], $\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. En la figura 12.6 se representan los niveles de energía desde $n = 1$ a $n = 4$. Éstos vienen dados por la fórmula [12.3.18]. Se han separado los diferentes valores de ℓ para mostrar más claramente la degeneración accidental. En un átomo, el número cuántico principal n ca-

racteriza una «capa electrónica», que a su vez está formada por «subcapas» correspondientes a los distintos valores de ℓ .

Las autofunciones asociadas al autovalor del hamiltoniano E_n son, por tanto,

$$\Phi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \quad , \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

$$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell - 1, \ell$$
[12.3.24]

Las funciones radiales $R_{n\ell}$ están definidas por [12.3.16] y los armónicos esféricos fueron descritos en el capítulo anterior. Estas funciones de onda son autofunciones comunes del hamiltoniano, L^2 y L_z , que forman un conjunto completo de observables que conmutan.

La degeneración total del nivel de energía E_n es, pues,

$$g_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2 \frac{(n-1)n}{2} + n = n^2$$
[12.3.25]

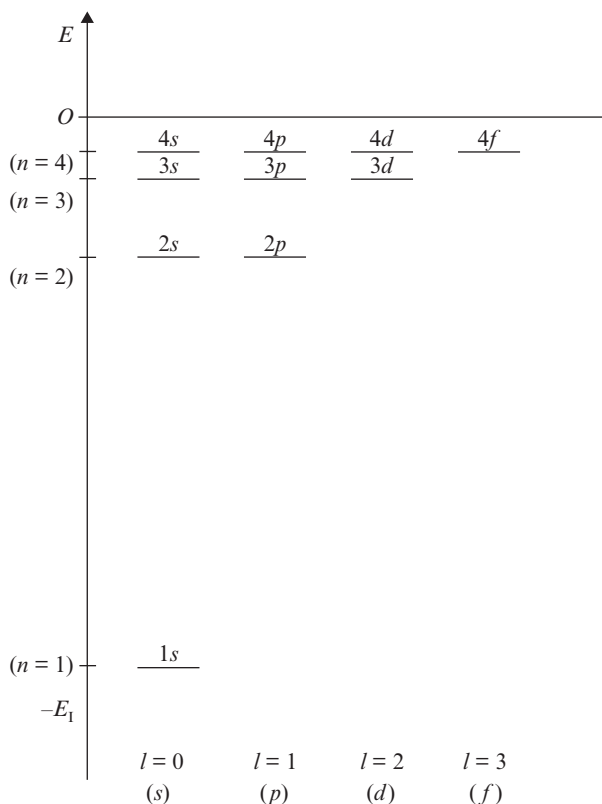


Figura 12.6. Primeros niveles de energía del átomo de hidrógeno.

Átomo de hidrógeno. Comparación con el modelo de Bohr

Las fórmulas [12.3.17] y [12.3.18] nos permiten calcular el orden de magnitud de la energía y las dimensiones espaciales para el átomo de hidrógeno. Pueden escribirse en la forma

$$E_I = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu c^2 \quad , \quad a_0 = \frac{1}{\alpha} \frac{\lambda_c}{2\pi} \quad [12.3.26]$$

donde α es la constante de estructura fina, que es una constante adimensional muy importante en física:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad [12.3.27]$$

y λ_c viene definido por:

$$\lambda_c = \frac{h}{\mu c} \quad [12.3.28]$$

Como μ es muy parecida a m_e , masa del electrón en reposo, λ_c es prácticamente igual a la longitud de onda Compton del electrón. Se deduce de [12.3.26] que el radio de Bohr, a_0 , es dos órdenes de magnitud mayor que la longitud de onda Compton del electrón dividida entre 2π , mientras que la energía de ligadura del electrón es casi cinco órdenes de magnitud menor que la energía en reposo del electrón, $m_e c^2$. Los valores aproximados de estas magnitudes son:

$$\frac{\lambda_c}{2\pi} \approx 3.8 \times 10^{-3} \text{ \AA} \quad , \quad m_e c^2 \approx 0.51 \times 10^6 \text{ eV}$$

$$a_0 = 0.529 \text{ \AA} \quad , \quad E_I \approx 13.6 \text{ eV}$$

Como $E_I \ll m_e c^2$, está plenamente justificado usar la ecuación de Schrödinger, no-relativista, para la descripción del átomo de hidrógeno.

En el capítulo 5 se describió el modelo de Bohr para el átomo de hidrógeno. Los niveles de energía en dicho modelo coinciden con los obtenidos en la teoría cuántica. En cuanto a la probabilidad de presencia, en el modelo de Bohr se supone que el electrón se encuentra siempre en órbitas circulares, siendo $L = n\hbar$. Para valores de n grandes, corresponde al caso en que $\ell = n - 1$. De [12.3.22] se deduce que, en esta situación, el electrón se encuentra en una capa de radio $\langle r \rangle \approx n^2 a_0$ y anchura, Δr , despreciable. A su vez, el valor esperado del radio coincide con la posición radial donde la densidad de probabilidad es

máxima, como es inmediato de [12.3.23]. Por tanto, el radio de las órbitas de Bohr coincide con el obtenido de la ecuación de Schrödinger en el límite de n grande.

12.4. OSCILADOR ARMÓNICO ISÓTROPO

El problema del oscilador armónico en tres dimensiones ya fue tratado en el apartado 10.3. Si el oscilador es isótropo, el potencial es central:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 \quad [12.4.1]$$

donde μ es la masa de la partícula y ω la frecuencia de oscilación en cualquier dirección espacial. Por consiguiente, existe un conjunto de vectores propios comunes a H , L^2 y L_z . Para obtenerlos, hemos de resolver la ecuación radial de autovalores del hamiltoniano que, para un valor dado de ℓ , es de la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R = ER \quad [12.4.2]$$

En el límite asintótico $r \rightarrow \infty$, la ecuación se reduce a:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \alpha^4 r^2 R = 0 \quad \text{con} \quad \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

con soluciones de la forma $r^\ell e^{\pm \alpha^2 r^2/2}$. Esto sugiere escribir $R(r)$ como producto de la función $e^{-\alpha^2 r^2/2}$ por un polinomio en r . Al igual que en el caso del potencial de Coulomb, del comportamiento del polinomio en el origen se obtiene que el orden más bajo es r^ℓ . Por tanto, sustituimos la función $R(r)$ por:

$$R(r) = r^\ell L(r) e^{-\alpha^2 r^2/2}, \quad \text{con} \quad L = a_0 + a_1 r + \dots \quad (a_0 \neq 0) \quad [12.4.3]$$

La ecuación que debe verificar $L(r)$ se obtiene fácilmente de [12.4.2]:

$$r \frac{d^2 L}{dr^2} + 2(\ell + 1 - \alpha^2 r^2) \frac{dL}{dr} + \alpha^2 r [2\lambda - (2\ell + 3)] L = 0 \quad [12.4.4]$$

con

$$\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}, \quad \lambda = \frac{E}{\hbar\omega} \quad [12.4.5]$$

La ecuación diferencial [12.4.4] es invariante bajo la transformación $r \rightarrow -r$. Por tanto, sus soluciones han de ser funciones pares o impares en r . Dado que en el desarrollo en serie de potencias [12.4.3], $a_0 \neq 0$, todos los coeficientes de potencias impares serán nulos. Eso quiere decir que podemos expresar L como un polinomio en r^2 . Mediante el cambio a la variable adimensional $\rho = \alpha^2 r^2$, la ecuación [12.4.4] pasa a ser:

$$\rho \frac{d^2 L}{d\rho^2} + \left(\ell + \frac{3}{2} - \rho \right) \frac{dL}{d\rho} + \frac{1}{2} \left[\lambda - \left(\ell + \frac{3}{2} \right) \right] L = 0 \quad [12.4.6]$$

con

$$L(\rho) = a_0 + a_1 \rho + \dots \quad (a_0 \neq 0) \quad [12.4.7]$$

Si la serie de potencias [12.4.7] tiene un número infinito de términos, la función radial $R(r)$ diverge cuando $r \rightarrow \infty$. Para que esto no ocurra, el coeficiente de L en la ecuación [12.4.6] ha de ser un número entero no negativo n_r igual al orden del polinomio $L(\rho)$. Por tanto, λ está discretizado y toma los valores:

$$\lambda = 2n_r + \ell + \frac{3}{2}, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad [12.4.8]$$

El espectro de energías vendrá dado, de acuerdo con la expresión [12.4.5], por

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega, \quad \text{con } n = 2n_r + \ell, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad [12.4.9]$$

Como los autovalores del hamiltoniano dependen sólo del índice $n = 2n_r + \ell$, en este problema, como en el potencial de Coulomb, existe una degeneración accidental. Hay que hacer notar que la mayoría de potenciales centrales no tienen degeneración accidental. De hecho, la degeneración accidental sólo existe para potenciales atractivos con dependencia radial $1/r$ o r^2 .

Fijada una energía E_n , con $n \geq 0$, de [12.4.9] se obtiene que le podemos asociar los siguientes valores de n_r y ℓ :

$$(n_r, \ell) = (0, n), (1, n-2), \dots, \left(\frac{n}{2} - 1, 2 \right), \left(\frac{n}{2}, 0 \right) \quad \text{si } n \text{ es par} \quad [12.4.10]$$

$$(n_r, \ell) = (0, n), (1, n-2), \dots, \left(\frac{n-1}{2} - 1, 3 \right), \left(\frac{n-1}{2}, 1 \right) \quad \text{si } n \text{ es impar}$$

La degeneración del nivel de energía E_n será, por tanto,

$$g_n = \sum_{\ell=0,2,\dots,n} (2\ell + 1) = \sum_{p=0}^{n/2} (4p + 1) = \frac{1}{2}(n + 1)(n + 2) \quad \text{para } n \text{ par} \quad [12.4.11]$$

$$g_n = \sum_{\ell=1,3,\dots,n} (2\ell + 1) = \sum_{p=0}^{(n-1)/2} (4p + 3) = \frac{1}{2}(n + 1)(n + 2) \quad \text{para } n \text{ impar}$$

que, como es lógico, coincide con el valor obtenido al separar la ecuación de autovalores en coordenadas cartesianas.

La ecuación [12.4.6] es idéntica a la que verifican los polinomios generalizados de Laguerre [12.3.15] con $p = \ell + 1/2$, $q = k = (n - \ell)/2$. Por tanto, las autofunciones radiales tendrán la forma:

$$R_{n\ell}(r) = N_{n\ell} r^\ell e^{-\rho/2} L_{(n-\ell)/2}^{\ell+1/2}(\rho) \quad \text{donde } \rho = \alpha^2 r^2$$

y $N_{n\ell}$ es una constante de normalización. De las relaciones de ortogonalidad de los polinomios generalizados de Laguerre (apéndice C), es inmediato que:

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{\ell+1/2} [L_{(n-\ell)/2}^{\ell+1/2}(\rho)]^2 d\rho = \frac{(n + \ell + 1)!!}{2^{(n+\ell)/2} [(n - \ell)/2]!} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

y las funciones radiales debidamente normalizadas son:

$$R_{n\ell}(r) = 2 \left\{ \frac{2^{(n+\ell)/2} [(n - \ell)/2]!}{(n + \ell + 1)!!} \right\}^{1/2} \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2 r^2/2} (\alpha r)^\ell L_{(n-\ell)/2}^{\ell+1/2}(\alpha^2 r^2) \quad [12.4.12]$$

La forma explícita de las autofunciones correspondientes a los tres primeros niveles de energía es:

$$\Phi_{000}(r, \theta, \varphi) = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{3/4}} e^{-\alpha^2 r^2/2}$$

$$\Phi_{11m}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{8}{3}} \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} \alpha r e^{-\alpha^2 r^2/2} Y_1^m(\theta, \varphi) \quad , \quad m = -1, 0, 1$$

$$\Phi_{200}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{3/4}} \left(1 - \frac{2}{3} \alpha^2 r^2 \right) e^{-\alpha^2 r^2/2}$$

$$\Phi_{22m}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{16}{15}} \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} \alpha^2 r^2 e^{-\alpha^2 r^2/2} Y_2^m(\theta, \varphi) \quad , \quad m = -2, -1, 0, 1, 2$$

La autofunción con $n = 0$ es, lógicamente, la misma que la obtenida en cartesianas con $n_x = n_y = n_z = 0$. Para $n = 1$ y $n = 2$, las autofunciones obtenidas son combinación lineal de las correspondientes al hacer la separación de variables en coordenadas cartesianas. Se trata únicamente de un cambio de base de autofunciones comunes a los observables H , L^2 , L_z , a la base de autofunciones en coordenadas cartesianas.

EJERCICIOS

12.1. En el estudio del pozo esférico pueden aparecer, para ciertos valores de $V_0 a^2$, estados ligados con $E = 0$ cuando $\ell > 0$. Encontrar la condición que debe verificar el parámetro $V_0 a^2$ para que se dé esa circunstancia y la forma de las autofunciones. A partir de ahí, discutir cuál es el número de estados ligados de un pozo esférico.

Ayuda: usar la condición [12.2.13].

12.2. Encontrar y expresar en notación espectroscópica los 10 primeros niveles del pozo esférico infinito:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r < a \\ +\infty & \text{si } r \geq a \end{cases}$$

Dato: tabla de los primeros ceros de las funciones esféricas de Bessel de primera clase j_ℓ :

$\ell =$	0	1	2	3	4	5	6
	3.1416	4.4934	5.7635	6.9879	8.1826	9.3558	10.5128
	6.2832	7.7253	9.0950	10.4171	11.7049	12.9665	14.2074
	9.4248	10.9041	12.3229	13.6980	15.0397	16.3547	17.6480
	12.5664	14.0662	15.5146	16.9236	18.3013	19.6532	20.9835

12.3. La función de ondas normalizada del estado fundamental para el electrón en el átomo de hidrógeno es:

$$\Phi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

Hallar en dicho estado:

- La incertidumbre de la coordenada radial Δr .
- El valor medio del momento $\langle \mathbf{p} \rangle$.

- c) La probabilidad de que el electrón tenga su trimomento en un pequeño elemento de volumen $\hbar^3 d^3\mathbf{k}$ en torno al valor $\hbar\mathbf{k}$.

$$\text{Dato: } \int_0^\infty r e^{-r/a} \text{sen}(kr) dr = \frac{2ka^3}{(1+k^2a^2)^2}$$

12.4. Un átomo de hidrógeno se encuentra en un estado

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-iE_1t/\hbar} \Phi_{100}(\mathbf{r}) + e^{-iE_2t/\hbar} \Phi_{210}(\mathbf{r})]$$

Calcular $\langle z \rangle$, $\langle p_z \rangle$ y relacionarlos.

12.5. Un átomo de hidrógeno tiene su electrón en un estado de función de ondas:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} e^{-r/2a_0} \left[\sqrt{2} + \frac{r}{a_0} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \text{sen } \theta \text{sen } \varphi - \frac{\sqrt{2}}{2} + \cos \theta \right) \right]$$

Calcular los valores medios de L^2 y L_z . Si se mide L_z , ¿qué resultados son posibles y con qué probabilidades?

12.6. Un átomo de hidrógeno se encuentra en un estado de cuya función de ondas se sabe lo siguiente:

- Al medir la energía sólo se obtienen los valores $-13.6/4$ eV y $-13.6/9$ eV, ambos con igual probabilidad.
- Al medir L^2 sólo se obtienen los valores $2\hbar^2$ y $6\hbar^2$, ambos con igual probabilidad.
- Al medir L_z siempre se obtiene cero.

Se pide:

- La forma general de la función de ondas y su dependencia temporal.
- ¿Cómo varía con el tiempo la densidad de probabilidad?
- La incertidumbre de la energía.
- Calcular el valor esperado de L^2 .

12.7. La función de ondas normalizada de un estado de un átomo de hidrógeno es:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{81} \sqrt{\frac{2}{\pi}} a_0^{-3/2} \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/3a_0} \text{sen } \theta \cos \theta \cos \varphi$$

- i) ¿Es Φ autoestado de los operadores H, L^2, L_z ?
 Consideremos ahora que el átomo de hidrógeno se encuentra en un estado Ψ del que se conoce lo siguiente:
- a) Ψ es autoestado de L_z con autovalor \hbar .
 - b) Al medir la energía sólo pueden obtenerse valores menores que -1 eV.
 - c) La energía media es $(-13/72) \times 13.6$ eV.
 - d) La probabilidad de encontrarlo en el estado Φ es $1/4$.
- ii) ¿Cuál es la forma general de la función Ψ y su dependencia temporal?
- iii) ¿Variará en el tiempo la densidad de probabilidad? ¿Cómo?
- iv) Hállense los valores medios de los operadores x, y, z, p_x, p_y, p_z para un tiempo t .

12.8. Calcular, usando los resultados del apéndice C, el valor medio de r^2 para las autofunciones comunes a H, L^2 y L_z del oscilador armónico isótropo.

13

Espín

Antonio Muñoz Sudupe

13.1. INTERACCIÓN DE UN ÁTOMO CON UN CAMPO MAGNÉTICO

Este capítulo trata de una característica común a todas las partículas elementales y a sus estados ligados. Tal propiedad es completamente cuántica, sin que exista para ella un análogo clásico. Esta magnitud se llama *espín* (spin en inglés) y debe considerarse como una característica más de las partículas, en pie de igualdad con otras tales como su masa o su carga, por ejemplo.

Una descripción teórica completa del espín utiliza normalmente una formulación relativista que escapa a las pretensiones de este texto; sin embargo, es posible presentarlo desde un punto de vista estrictamente no-relativista.

El espín se introdujo a raíz de las experiencias de Stern y Gerlach, en las que se analizó la interacción de los átomos neutros con campos magnéticos. Discutiremos brevemente la interacción de un átomo hidrogenoide con un campo magnético para, posteriormente, analizar dichos experimentos.

Como ya vimos en [7.11], el hamiltoniano de un átomo hidrogenoide en un campo magnético es, en el sistema de Gauss,

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{r}) \quad [13.1.1]$$

donde e es la carga del electrón $e = -1.602 \times 10^{-19}$ C. Para pasar la expresión anterior al sistema SI basta con hacer el cambio $A_G \rightarrow cA_{SI}$.

Para un campo magnético \mathbf{B} constante (independiente del tiempo) y uniforme (independiente de la posición), el potencial vector \mathbf{A} puede elegirse como

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \quad [13.1.2]$$

Sustituyendo esta ecuación en [13.1.1] y desarrollando el cuadrado, obtenemos

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + \frac{e^2}{2m_e c^2} A^2 + \frac{i\hbar e}{2m_e c} (\nabla \times \mathbf{A}) + \frac{i\hbar e}{m_e c} \mathbf{A} \times \nabla + V(\mathbf{r}) \quad [13.1.3]$$

Suponiendo que el campo magnético, y, por tanto, el potencial vector, sean pequeños, podemos despreciar frente a los demás el término que va como A^2 en [13.1.3]. Teniendo en cuenta además la condición de Lorentz, que en este caso se escribe $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, llegamos a que el hamiltoniano [13.1.3] puede aproximarse por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + \frac{i\hbar e}{m_e c} \mathbf{A} \nabla + V(\mathbf{r}) \quad [13.1.4]$$

Por último, usando [13.1.2] y la relación vectorial $\mathbf{a} \times \mathbf{b} \times \mathbf{c} = \mathbf{c} \times \mathbf{a} \times \mathbf{b}$, tenemos

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + \frac{i\hbar e}{2m_e c} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla) + V(\mathbf{r}) \quad [13.1.5]$$

Vemos que en el segundo término del miembro de la derecha aparece el operador momento angular $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Por analogía con la magnitud clásica correspondiente, se llama operador momento dipolar magnético a

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2m_e c} \mathbf{L} \quad [13.1.6]$$

con lo que la ecuación [13.1.5] resulta

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} + V(\mathbf{r}) \quad [13.1.7]$$

La constante $\mu_B = -e\hbar/(2m_e c)$ se llama magnetón de Bohr, su valor es $\mu_B = 9.27 \times 10^{-24}$ J T⁻¹ y resulta especialmente útil para medir momentos dipolares magnéticos atómicos. En Física Nuclear se emplean magnitudes análogas para el protón y neutrón; sus magnitudes son unas 2000 veces menores al depender inversamente de la masa.

La discusión anterior se puede resumir diciendo que la presencia del campo magnético \mathbf{B} uniforme, constante y pequeño, modifica el hamiltoniano en ausencia del mismo, con un término de acoplamiento entre \mathbf{B} y el momento dipolar magnético $\boldsymbol{\mu}$. Como éste es proporcional al momento angular \mathbf{L} , la modificación introducida está relacionada, por tanto, con las posibles orientaciones de la órbita del electrón.

Una imagen clásica apropiada para la discusión que sigue es representar el átomo como una esfera cargada que gira con un momento dipolar magnético $\boldsymbol{\mu}$. Clásicamente, la energía potencial asociada con la interacción entre el campo magnético y el dipolo es $W = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$. Debido al momento angular orbital, el dipolo precede alrededor de \mathbf{B} de forma que el ángulo entre $\boldsymbol{\mu}$ y \mathbf{B} permanece constante (figura 13.1).

Si el campo magnético es uniforme, la fuerza sobre el átomo $\mathbf{F} = -\nabla W$ es nula. Si, por el contrario, \mathbf{B} es no uniforme según una dirección, que llamamos eje Z , aparece una fuerza sobre el átomo que es proporcional a la componente μ_z del momento dipolar. Es decir

$$\mathbf{F} = -\mu_z \nabla B_z$$

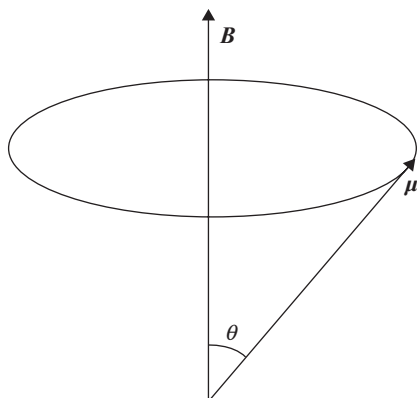


Figura 13.1. Precesión del momento dipolar alrededor del campo magnético.

En el experimento de Stern y Gerlach se prepara un haz de átomos de plata neutros, de manera que, tras atravesar un imán que crea un campo magnético no uniforme (figura 13.2), éstos se depositen en una placa de vidrio (figura 13.3). Si el momento angular L de los átomos puede estar orientado al azar, el momento dipolar magnético asociado μ también y la componente μ_z recorre un rango continuo de valores, de tal forma que los átomos se depositan sobre la placa formando una mancha continua. Por el contrario si μ_z sólo puede tomar valores en un conjunto discreto, entonces se observarán manchas aisladas.

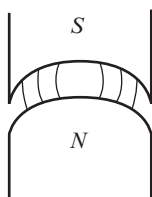


Figura 13.2. Esquema del imán empleado en el experimento de Stern-Gerlach. El campo magnético creado no es uniforme.

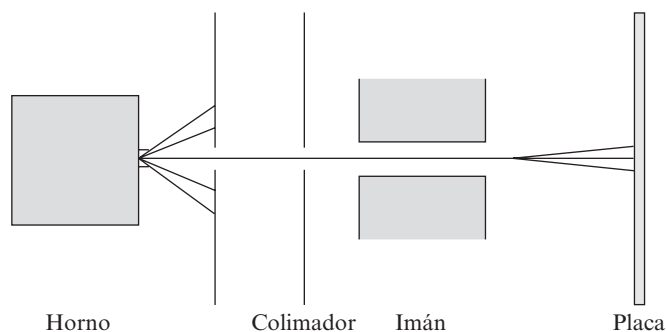


Figura 13.3. Esquema del experimento de Stern-Gerlach.

13.2. DESCRIPCIÓN DEL EXPERIMENTO

Puede sorprender la utilización de átomos de plata neutros en este experimento. Sería mucho más fácil utilizar partículas cargadas, como electrones o iones, por ejemplo, que son más sencillos de manejar. El problema que se plantea con partículas cargadas es que las interacciones electromagnéticas entre ellas son típicamente mucho mayores que el acoplamiento del momento dipolar con el campo magnético y enmascaran las desviaciones que se pretende medir.

Para que el haz atómico pueda recorrer la distancia requerida (~ 1 m) sin sufrir colisiones con moléculas del aire es preciso mantener un vacío del orden de 10^{-8} atm, pues a presión atmosférica normal, los átomos tienen un recorrido libre medio de alrededor de 10^{-4} cm. El imán suele medir del orden de 20 cm y la placa se encuentra a unos 30 cm del imán.

Los resultados más importantes del experimento son:

- En ausencia de campo, se observa una sola línea,
- Con un campo magnético $\mathbf{B} \sim 1$ T y un gradiente del campo según el eje Z de $\partial B/\partial z \sim 10^2$ T/m, se observan dos líneas separadas ~ 1 mm que se corresponden con valores iguales y opuestos de μ_z .

Este experimento se repitió en 1927 por Phipps y Taylor con átomos de hidrógeno, obteniéndose resultados análogos.

13.3. DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS DEL EXPERIMENTO

El hecho mismo del desdoblamiento en dos haces supone una evidencia experimental directa de la cuantificación de μ_z y, por tanto, de la cuantificación del momento angular de los átomos. Por otra parte, de acuerdo con [13.1.6] μ_z es proporcional a L_z , que puede tomar $2l + 1$ valores diferentes, siendo l el número cuántico del momento angular. Si l es entero, $2l + 1$ es impar, de donde se sigue que debería encontrarse un número impar de haces, en contradicción con el número par (dos) observado en el experimento. De hecho, si los átomos de plata están en el estado fundamental $l = 0$, $m = 0$ debería detectarse un solo haz.

La separación observada no puede atribuirse al momento dipolar magnético del núcleo, pues su magnitud sería, como poco, unas 1000 veces menor que la observada, al depender el momento dipolar del inverso de la masa del núcleo. Tiene, por tanto, el electrón un momento magnético intrínseco, pues, si no, el haz no se desdoblaría, que será necesario atribuir a un momento angular semientero como veremos en la sección 13.4. En 1925, Uhlenbeck y Goldsmit propusieron su hipótesis del electrón giratorio (*spinning electron*) para explicar el origen de ese momento angular. Tal hipótesis es incorrecta, pues, para que una esfera cargada en rotación produzca el desdoblamiento observado, su radio debe ser del orden del radio atómico ($R \sim 10^{-10}$ m), cuando el electrón es muchísimo menor: su radio clásico vale

$$r_e = \frac{\alpha \hbar}{m_e c} = 2.8 \times 10^{-15} \text{ m}$$

siendo α la constante de estructura fina adimensional $\alpha = 1/137.04$. Otra posibilidad igualmente absurda es que el electrón gire a velocidades relativistas.

El momento angular intrínseco del electrón se llama espín \mathbf{S} . Esta magnitud es asociable no sólo al electrón, sino a cualquier partícula, átomo o núcleo atómico.

El espín de una partícula está relacionado con las propiedades de transformación de su función de onda bajo rotaciones. Así, los resultados de un experimento con una partícula de espín 0 no se modifican si se gira el dispositivo experimental un ángulo arbitrario alrededor de un eje cualquiera. Por ello se dice de tal partícula que es un escalar. Por otra parte, una partícula de espín 1 es invariante bajo giros de ángulo 2π según cualquier eje. Lo que resulta sorprendente de las partículas de espín 1/2 es que sean invariantes bajo giros de 4π radianes, como se ilustra en el ejercicio 13.6.

13.4. FUNCIÓN DE ONDA E INTERPRETACIÓN PROBABILÍSTICA

Como operador de momento angular sus autoestados son comunes a S^2 y S_z y los denotaremos como $|s, m_s\rangle$, y verifican (véase la sección 11.6)

$$S^2 |s, m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle \quad [13.4.1]$$

$$S_z |s, m_s\rangle = m_s \hbar |s, m_s\rangle \quad [13.4.2]$$

Las relaciones de conmutación de las componentes son $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$ y cíclicas. En el caso del electrón $s = 1/2$ y $m_s = +1/2, -1/2$ para poder así explicar la existencia de dos haces en el experimento de Stern-Gerlach. El momento dipolar magnético intrínseco del electrón $\boldsymbol{\mu}_s$ guarda con \mathbf{S} una relación de la forma

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{g_s \mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \quad [13.4.3]$$

La constante g_s se llama factor giromagnético de espín. Para el electrón vale $g_s = 2.00232$. Para otras partículas como el protón y el neutrón, que tienen así mismo espín semientero, el factor giromagnético toma un valor distinto del anterior, como veremos en el capítulo 36.

La función de onda que describe una partícula de espín 1/2 es, en general, un objeto de dos componentes al que se denomina *espinor*, es decir

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_+(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_-(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$$

Suponiendo que el espinor está normalizado, se tiene

$$1 = \int d^3r \Psi^\dagger \Psi = \int d^3r [|\Psi_+(r, t)|^2 + |\Psi_-(r, t)|^2]$$

de donde se sigue que $|\Psi_+(r, t)|^2 d^3r$ ($|\Psi_-(r, t)|^2 d^3r$) pueda interpretarse como la probabilidad de que, en el instante t , la partícula esté en el elemento de volumen d^3r en torno a r con tercera componente de espín igual a $+1/2$ ($-1/2$).

El operador S^2 es constante, y para una partícula de espín $1/2$ vale

$$S^2 = 3/4 \hbar^2 \mathbf{1}$$

donde $\mathbf{1}$ es la identidad.

Una representación adecuada de los operadores de espín se consigue con las matrices de Pauli $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$, definidas por

$$S = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$$

Es fácil demostrar, a partir de las reglas de conmutación de las componentes de S , las siguientes propiedades de tales matrices

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &= 2i\sigma_z & [\sigma_z, \sigma_x] &= 2i\sigma_y & [\sigma_y, \sigma_z] &= 2i\sigma_x \\ \sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 & &= \mathbf{1} \\ \{\sigma_x, \sigma_y\} &= 0 & \{\sigma_x, \sigma_z\} &= 0 & \{\sigma_z, \sigma_y\} &= 0 \end{aligned}$$

donde $\{a, b\} = a \cdot b + b \cdot a$ se denomina anticonmutador de a y b .

Suele ser habitual elegir la representación como matrices 2×2 complejas en la que σ_z es diagonal y σ_x es real:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad [13.4.4]$$

Las autofunciones de S_z , y, por tanto, de σ_z , son en esta notación espinores de dos componentes (parejas de números complejos) que elegimos con módulo unidad. Así, la autofunción de σ_z con autovalor $+1$ (-1), que denotamos κ_+ (κ_-), satisface

$$\sigma_z \kappa_+ = \kappa_+ (\sigma_z \kappa_- = -\kappa_-)$$

y se representa por el vector

$$\kappa_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \left(\kappa_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right)$$

Un estado de espín será en general una combinación lineal de las autofunciones anteriores $c_+\kappa_+ + c_-\kappa_-$ donde $|c_+|^2$ ($|c_-|^2$) es la probabilidad de que al medir S_z en ese estado se encuentre el valor $+\hbar/2$ ($-\hbar/2$), a condición de que ese estado esté normalizado $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$.

Veamos un ejemplo. Supongamos que un haz de átomos de espín $1/2$ se hace pasar a través de un dispositivo Stern-Gerlach orientado según una dirección que llamamos eje Z . Como hemos descrito, este haz se desdobra en dos haces correspondientes a las dos posibles proyecciones del espín según el eje Z . Si seleccionamos el haz con proyección $+1/2$, por ejemplo, y lo hacemos pasar a través de un segundo Stern-Gerlach que supondremos orientado según el eje X , la pregunta que surge de manera natural es: ¿cuántos haces se observarán y con qué intensidades relativas?

El haz seleccionado en el primer Stern-Gerlach tiene como autofunción de espín

$$\kappa_+^z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

pues es autoestado de σ_z con autovalor $+1$. De acuerdo con [13.4.4], el estado anterior no es autoestado de σ_x como es inmediato comprobar. Un sencillo cálculo muestra que los autoestados de σ_x son

$$\kappa_+^x = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \quad \kappa_-^x = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

de donde se tiene que el estado seleccionado en el primer Stern-Gerlach es una combinación lineal de los autoestados correspondientes al operador de espín según la dirección del segundo Stern-Gerlach, es decir, se tiene

$$\kappa_+^z = \frac{1}{\sqrt{2}} (\kappa_+^x + \kappa_-^x)$$

Por tanto, aparecen dos nuevos haces con intensidades iguales, pues los coeficientes de la combinación lineal anterior al cuadrado, son las probabilidades respectivas de que al atravesar el segundo Stern-Gerlach el haz se desdoble hacia un lado o hacia el otro.

La introducción del espín del electrón, o de cualquier otra partícula, añade un nuevo número cuántico a la función de onda de cualquier sistema.

Supongamos que estamos estudiando una partícula de espín $1/2$ en un potencial central $V(r)$. Los números cuánticos que caracterizan el estado de la partícula son: n (energía), l (momento angular), m (proyección del momento angular) y m_s (proyección del momento angular de espín). Es decir, las autofunciones $\Phi_{nlm m_s}(r, \theta, \varphi)$, comunes a H , L^2 , L_z , S^2 y S_z satisfacen

$$\begin{aligned}
 H\Phi_{nlm m_s}(r, \theta, \varphi) &= E_n \Phi_{nlm m_s}(r, \theta, \varphi) \\
 L^2\Phi_{nlm m_s}(r, \theta, \varphi) &= l(l+1)\hbar^2\Phi_{nlm m_s}(r, \theta, \varphi) \\
 L_z\Phi_{nlm m_s}(r, \theta, \varphi) &= m\hbar\Phi_{nlm m_s}(r, \theta, \varphi) \\
 S^2\Phi_{nlm m_s}(r, \theta, \varphi) &= \frac{3}{4}\hbar^2\Phi_{nlm m_s}(r, \theta, \varphi) \\
 S_z\Phi_{nlm m_s}(r, \theta, \varphi) &= m_s\hbar\Phi_{nlm m_s}(r, \theta, \varphi)
 \end{aligned}$$

siendo n y l enteros, $-l \leq m \leq l$ y $m_s = \pm 1/2$. En la notación de espinores el estado $\Phi_{nlm_l + 1/2}$ se escribe

$$\Phi_{nlm_l(+1/2)} = \Phi_{nlm_l} \cdot \kappa_+ = \begin{pmatrix} \Phi_{nlm_l} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Una expresión análoga puede escribirse para la autofunción de la partícula con proyección de espín $-1/2$

$$\Phi_{nlm_l(-1/2)} = \Phi_{nlm_l} \cdot \kappa_- = \begin{pmatrix} 0 \\ \Phi_{nlm_l} \end{pmatrix}$$

13.5. COMPOSICIÓN DE ESPINES

En un sistema formado por dos partículas con espines $1/2$ como el sistema electrón-protón, por ejemplo, los estados de espín posibles son

$$\kappa_+^1\kappa_+^2 \quad \kappa_+^1\kappa_-^2 \quad \kappa_-^1\kappa_+^2 \quad \kappa_-^1\kappa_-^2 \tag{13.5.1}$$

donde se han representado de manera ordenada los productos de las funciones de onda de espín de las dos partículas. Los estados representados en [13.5.1] son autofunciones comunes de S_1^2 , S_2^2 , $S_{1,z}$, $S_{2,z}$, así, por ejemplo,

$$\begin{aligned}
 S_1^2\kappa_+^1\kappa_+^2 &= S_2^2\kappa_+^1\kappa_+^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\hbar^2\kappa_+^1\kappa_+^2 \\
 S_{1,z}\kappa_+^1\kappa_+^2 &= S_{2,z}\kappa_+^1\kappa_+^2 = +\frac{1}{2}\hbar\kappa_+^1\kappa_+^2
 \end{aligned}$$

y expresiones análogas para los demás estados y operadores.

Veamos que algunas combinaciones lineales de [13.5.1] son también autoestados de los operadores de espín total:

$$S^2 = (S_1 + S_2)^2 \quad \text{y} \quad S_z = S_{1,z} + S_{2,z}$$

Probaremos, por ejemplo, que $\kappa_+^1 \kappa_+^2$ es autoestado de S^2 con autovalores $2\hbar^2$. Para ello necesitamos calcular primero $S_1 \times S_2 \kappa_+^1 \kappa_+^2$. Teniendo en cuenta que

$$S_x \kappa_+ = \frac{1}{2} \hbar \kappa_- \quad \text{y} \quad S_y \kappa_+ = \frac{i}{2} \hbar \kappa_-$$

es fácil verificar que

$$S_1 \cdot S_2 \kappa_+^1 \kappa_+^2 = S_{1,z} S_{2,z} \kappa_+^1 \kappa_+^2 = \frac{\hbar^2}{4} \kappa_+^1 \kappa_+^2$$

y, por tanto, se tiene

$$S^2 \kappa_+^1 \kappa_+^2 = 2\hbar^2 \kappa_+^1 \kappa_+^2$$

Se tiene entonces que $\kappa_+^1 \kappa_+^2$ es un autoestado de S^2 con momento angular (de espín total) $S = 1$. Actuando ahora con el operador S_z sobre $\kappa_+^1 \kappa_+^2$ tenemos

$$S_z \kappa_+^1 \kappa_+^2 = \hbar \kappa_+^1 \kappa_+^2$$

de donde se sigue que $\kappa_+^1 \kappa_+^2$ es un autoestado de espín total con proyección $+\hbar$ sobre la tercera componente. En la notación $|s, m_s\rangle$, empleada en [13.4.1], podemos escribir

$$\kappa_+^1 \kappa_+^2 = |1\ 1\rangle$$

De manera análoga para el estado

$$\kappa_-^1 \kappa_-^2 = |1\ -1\rangle$$

Los estados $\kappa_+^1 \kappa_-^2$ y $\kappa_-^1 \kappa_+^2$ no son autoestados de los operadores S^2 y S_z , pero sí lo son sus combinaciones lineales, convenientemente normalizadas

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} [\kappa_+^1 \kappa_-^2 + \kappa_-^1 \kappa_+^2] \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\kappa_+^1 \kappa_-^2 - \kappa_-^1 \kappa_+^2] \end{aligned} \quad [13.5.2]$$

con autovalores que se pueden calcular sin ninguna dificultad, obteniéndose

$$S^2 \frac{1}{\sqrt{2}} [\kappa_+^1 \kappa_-^2 + \kappa_-^1 \kappa_+^2] = 2\hbar^2 \frac{1}{\sqrt{2}} [\kappa_+^1 \kappa_-^2 + \kappa_-^1 \kappa_+^2]$$

$$S^2 \frac{1}{\sqrt{2}} [\kappa_+^1 \kappa_-^2 - \kappa_-^1 \kappa_+^2] = 0$$

$$S_z \frac{1}{\sqrt{2}} [\kappa_+^1 \kappa_-^2 + \kappa_-^1 \kappa_+^2] = 0$$

$$S_z \frac{1}{\sqrt{2}} [\kappa_+^1 \kappa_-^2 - \kappa_-^1 \kappa_+^2] = 0$$

Podemos, por tanto, identificar las combinaciones lineales [13.5.2] con los autoestados de momento angular total

$$|1\ 0\rangle \text{ y } |0\ 0\rangle$$

respectivamente. Los tres estados con espín total 1, es decir,

$$|1\ 1\rangle \quad |1\ 0\rangle \quad |1\ -1\rangle$$

se conocen con el nombre de *estado triplete*, mientras que el estado con espín total 0,

$$|0\ 0\rangle$$

se llama *estado singlete*. Nótese que bajo el cambio de las marcas de las partículas $1 \leftrightarrow 2$, las funciones de onda del estado triplete no cambian, por lo que se denominan simétricas, mientras que la función de ondas del estado singlete cambia de signo bajo dicha transformación y se dice antisimétrica. Estas propiedades de simetría tienen grandes repercusiones dentro de la física cuántica, por lo que aparecerán en próximos capítulos donde se analizarán en detalle.

El singlete es el ejemplo más simple e importante de estado *enredado* (*entangled* en inglés). Este tipo de estados presentan características sorprendentes que desafían nuestra intuición y, lo que es mucho más importante, constituyen la base de prometedoras aplicaciones de la Mecánica Cuántica, entre las que podemos citar por su interés: la computación cuántica, la criptografía cuántica y la teleportación.

Un estado enredado se caracteriza por no ser factorizable en estados de cada subsistema, cada partícula en el caso del singlete, y por mantener correlaciones que no existen en la Física Clásica. Así, en el caso del singlete, los spines de las dos partículas están correlacionados: las medidas de sus componentes de espín, según una dirección arbitraria, proporcionarán siempre valores opuestos $\pm\hbar/2$, y esto sucederá aunque las partículas se encuentren separadas. En la práctica, estas correlaciones se han verificado experimentalmente en distancias de hasta 10 km.

En apariencia, se produce una violación de la causalidad. Al separar las dos partículas que forman el singlete y enviarlas a dos laboratorios A y B distantes, el resultado de la medida en A de la componente de espín de la partícula correspondiente «obliga» al espín de la otra en B a tomar el valor opuesto. Obviamente, mientras los dos laboratorios no confrontan sus resultados por algún procedimiento, que no supera la velocidad de la luz, no es posible establecer esta correlación. Véase el apéndice R.

En general, dados dos sistemas con espines s_1 y s_2 , los autoestados del sistema, comunes a $\{\mathcal{S}_1^2, \mathcal{S}_2^2, \mathcal{S}_{1,z}, \mathcal{S}_{2,z}\}$ serán de la forma

$$|s_1\ s_2\ m_1\ m_2\rangle$$

y ellos mismos o algunas combinaciones lineales apropiadas de ellos serán autoestados del sistema comunes a $\{\mathcal{S}^2, \mathcal{S}_z, \mathcal{S}_1^2, \mathcal{S}_2^2\}$, que se pueden escribir como

$$|s\ m_s\ s_1\ s_2\rangle$$

siendo $\mathcal{S} = \mathcal{S}_1 + \mathcal{S}_2$. Los coeficientes de las combinaciones lineales antes mencionadas se llaman coeficientes de Clebsh-Gordan $C_{m_1, m_2}^{s_1, s_2}$, y se definen como

$$|s \ m_s \ s_1 \ s_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{m_1, m_2}^{s_1, s_2} |s_1 \ s_2 \ m_1 \ m_2\rangle$$

o, lo que es lo mismo,

$$C_{m_1, m_2}^{s_1, s_2} = \langle s_1 \ s_2 \ m_1 \ m_2 | s \ m_s \ s_1 \ s_2 \rangle$$

El valor máximo para el momento angular total es $s_1 + s_2$, y el valor mínimo es, como comprobaremos, $|s_1 - s_2|$, tomando todos los valores enteros o semiimpares comprendidos. Así, por ejemplo, la composición de los espines $1/2, 1/2$ nos ha producido estados con momento angular 1 y 0. Un sistema con espines 1, $1/2$ proporcionaría estados con momento angular $3/2, 1/2$.

Veamos que el valor mínimo del espín total es $|s_1 - s_2|$. Para ello podemos comprobar que el número de estados es el mismo en las dos bases, en la de espines individuales está claro que el número total va a ser $(2s_1 + 1)(2s_2 + 1)$. Para calcular el número de estados en la base de espín total, supongamos que $s_1 > s_2$. Resulta claro que el espín máximo será $s_1 + s_2$. Si llamamos s_m al menor valor del espín total, tendremos que

$$\begin{aligned} (2s_1 + 1)(2s_2 + 1) &= \sum_{s=s_m}^{s=s_1+s_2} (2s + 1) \\ &= (s_m + s_1 + s_2)(s_1 + s_2 - s_m + 1) + s_1 + s_2 - s_m + 1 \\ &= (s_m + s_1 + s_2 + 1)(s_1 + s_2 - s_m + 1) \end{aligned} \quad [13.5.3]$$

de donde resulta que, como queríamos probar,

$$s_m = s_1 - s_2$$

Si hubiéramos supuesto que $s_2 > s_1$, habríamos obtenido que $s_m = s_2 - s_1$. Por tanto, el valor mínimo es $s_m = |s_1 - s_2|$.

EJERCICIOS

13.1. Sean los operadores $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$, para partículas de espín $1/2$. Demuéstranse las siguientes propiedades:

$$S_{\pm}^{\dagger} = S_{\mp} \quad , \quad [S_+, S_-] = 2\hbar S_z \quad , \quad [S_{\pm}, S_z] = \mp \hbar S_{\pm}$$

13.2. Utilizando los conmutadores del ejercicio anterior, probar que

$$S_{\pm} \kappa_{\mp}$$

son autoestados de S_z . ¿Con qué autovalores?

13.3. Demostrar, a partir de los dos ejercicios anteriores, que es posible elegir una fase de forma que se tenga

$$S_{\pm} \kappa_{\mp} = \hbar \kappa_{\pm}$$

13.4. Calcular un estado con proyección de espín $+\hbar/2$ según la dirección del vector $(1, 1, 0)$.

13.5. Se prepara un estado con proyección de espín $+\hbar/2$ según la dirección $(0, 0, 1)$. Calcular la probabilidad de obtener $+\hbar/2$ al medir según la dirección $(1, 1, 1)$.

13.6. Probar que la función de onda de espín $1/2$ cambia de signo bajo un giro de 2π radianes.

13.7. El hamiltoniano de interacción entre el espín $1/2$ y el campo magnético \mathbf{B} es $H = g_s \mu_B \mathbf{S} \times \mathbf{B}$. Probar que es posible fijar la magnitud del campo magnético de forma que, al cabo de un tiempo t , el resultado de la interacción sea análogo al de un giro de 2π radianes de todo el dispositivo experimental.

13.8. Encontrar las matrices de espín análogas a las matrices de Pauli para una partícula de espín 1.

14

Métodos de aproximación

Luis García Gonzalo
Antonio Muñoz Sudupe

14.1. INTRODUCCIÓN

El número de sistemas físicamente relevantes resolubles de manera exacta es muy reducido, tanto en la física clásica como en la cuántica. Incluso algunos de los que se han resuelto, como el potencial coulombiano, al ser aplicados a situaciones realistas, como en el átomo de hidrógeno, necesitan de nuevas, aunque pequeñas, correcciones (véase capítulo 19) para explicar los resultados de experimentos precisos.

Se hacen imprescindibles los métodos de aproximación, tanto analíticos como numéricos, para estimar las energías de los autoestados del hamiltoniano. En este capítulo introduciremos algunas de las técnicas analíticas de aproximación: la teoría de perturbaciones y el método variacional. Los métodos numéricos serán tratados brevemente en el apéndice P.

La teoría de perturbaciones es especialmente aplicable cuando el hamiltoniano que describe el sistema puede ser separado en dos partes $H = H_0 + H_1$, siendo H_0 resoluble de manera exacta, y mucho mayor que H_1 , al que se llama perturbación. El método de perturbaciones se divide en dos grandes grupos según H_1 dependa o no del tiempo. Básicamente consiste en desarrollar las energías y autofunciones del hamiltoniano en una serie de potencias de un parámetro real adimensional λ , $H_1 = \lambda W$, que llamaremos constante de acoplo. Este método se ha aplicado con gran éxito en la teoría cuántica de campos que describe la interacción entre partículas relativistas cargadas (electrodinámica cuántica). El acuerdo entre las predicciones teóricas, obtenidas mediante los métodos perturbativos, y los resultados experimentales es una de las mejores concordancias obtenidas entre teoría y experimento. Piénsese que en este caso la constante de acoplo de las interacciones electromagnéticas (en el sistema de unidades de Gauss) es la constante de estructura fina $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137 \ll 1$. Para otras interacciones la constante de acoplo no es tan pequeña y los desarrollos perturbativos carecen de sentido¹.

El método variacional resulta especialmente útil para estimar la energía del estado fundamental de un hamiltoniano. Su éxito depende de la elección adecuada de funciones de onda prueba. En esta elección desempeñan un papel importante la simetrías de dicho hamiltoniano.

¹ Incluso se sospecha que los resultados obtenidos para la electrodinámica cuántica empeoran al considerar más términos en el desarrollo. Este tipo de comportamiento es característico de las series asintóticas (véase Galindo, Pascual).

14.2. TEORÍA DE PERTURBACIONES ESTACIONARIAS. NIVELES NO DEGENERADOS

Supongamos conocidos los autoestados $|n\rangle_0$ y autoenergías $E_{n,0}$ del hamiltoniano no perturbado H_0 , es decir,

$$H_0|n\rangle_0 = E_{n,0}|n\rangle_0 \quad [14.2.1]$$

donde hemos supuesto el espectro discreto y hemos omitido índices en la descripción del estado si éste fuese degenerado. Tratamos de resolver de manera aproximada la ecuación de autovalores

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad [14.2.2]$$

donde $H = H_0 + H_1 = H_0 + \lambda W$. E_n y $|n\rangle$ son funciones de λ que verifican

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} E_n = E_{n,0} \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0} |n\rangle = |n\rangle_0$$

Supongamos que E_n y $|n\rangle$ admiten desarrollos en series de potencias de λ ,

$$E_n = E_{n,0} + \lambda E_{n,1} + \lambda^2 E_{n,2} + \dots$$

$$|n\rangle = |n\rangle_0 + \lambda |n\rangle_1 + \lambda^2 |n\rangle_2 + \dots \quad [14.2.3]$$

En esta sección supondremos que el nivel $E_{n,0}$ es no degenerado; en la próxima sección veremos cómo se aplica este método a niveles degenerados.

Utilizando los desarrollos formales [14.2.3] en [14.2.2], e igualando los coeficientes de las diferentes potencias de λ , obtenemos

$$H_0|n\rangle_0 = E_{n,0}|n\rangle_0 \quad [14.2.4]$$

$$W|n\rangle_0 + H_0|n\rangle_1 = E_{n,1}|n\rangle_0 + E_{n,0}|n\rangle_1 \quad [14.2.5]$$

$$W|n\rangle_1 + H_0|n\rangle_2 = E_{n,2}|n\rangle_0 + E_{n,1}|n\rangle_1 + E_{n,0}|n\rangle_2 \quad [14.2.6]$$

La ecuación [14.2.4], orden 0 en teoría de perturbaciones, se satisface por hipótesis.

Primer orden. La ecuación [14.2.5] nos permite calcular $E_{n,1}$ y $|n\rangle_1$. Multiplicando ambos miembros por el bra ${}_0\langle n|$ (véase apéndice B), tenemos

$${}_0\langle n|W|n\rangle_0 + {}_0\langle n|H_0|n\rangle_1 = E_{n,1} + {}_0\langle n|n\rangle_1 E_{n,0} \quad [14.2.7]$$

donde se ha supuesto que $|n\rangle_0$ está normalizado ${}_0\langle n|n\rangle_0 = 1$. Los dos segundos términos de ambos miembros en [14.2.7] son idénticamente nulos, como probaremos más adelante (por

otra parte, se cancelarían mutuamente si no lo fueran). Por tanto, tenemos que la corrección en primer orden a la energía del estado no-perturbado, no degenerado, viene dada por

$$E_{n,1} = {}_0\langle n|W|n\rangle_0 \quad [14.2.8]$$

es decir, $E_{n,1}$ es el valor esperado de la perturbación en el estado $|n\rangle_0$.

Antes de proceder al cálculo de la corrección en primer orden a la función de ondas, veamos cómo se normaliza el estado. La libertad en la elección de una fase global para $|n\rangle$ permite imponer la siguiente condición

$${}_0\langle n|n\rangle = 1$$

De esta forma, teniendo en cuenta que el estado no-perturbado está normalizado ${}_0\langle n|n\rangle_0 = 1$, se cumple que

$${}_0\langle n|n\rangle_i = 0 \quad \forall i \geq 1 \quad [14.2.9]$$

Obsérvese que el estado $|n\rangle$ con la condición anterior no tiene norma unidad. Es necesario tras realizar el cálculo al orden considerado, renormalizar el estado. Este punto se verá con detalle al hacer el cálculo a segundo orden.

Calculemos a continuación $|n\rangle_1$, la corrección en primer orden al estado. Sea $|m\rangle_0$ (con $m \neq n$) uno cualquiera de los autoestados (posiblemente degenerado) del hamiltoniano H_0 , con autovalor $E_{m,0} \neq E_{n,0}$. Multiplicando los dos miembros de [14.2.5] por el bra correspondiente ${}_0\langle m|$ tenemos

$${}_0\langle m|W|n\rangle_0 + {}_0\langle m|H_0|n\rangle_1 = {}_0\langle m|n\rangle_1 E_{n,0} \quad [14.2.10]$$

donde se ha usado que $|n\rangle_0$ y $|m\rangle_0$ son ortogonales. Como H_0 es autoadjunto, se tiene ${}_0\langle m|H_0|n\rangle_1 = {}_0\langle m|n\rangle_1 E_{m,0}$, de donde se sigue

$${}_0\langle m|n\rangle_1 = \frac{{}_0\langle m|W|n\rangle_0}{E_{n,0} - E_{m,0}} \quad (m \neq n) \quad [14.2.11]$$

Teniendo en cuenta que ${}_0\langle m|n\rangle_1$ son los coeficientes del desarrollo de $|n\rangle_1$ en la base de autoestados de H_0 y que $|n\rangle_1$ no puede tener componente según $|n\rangle_0$ por ser ortogonales, tenemos

$$|n\rangle_1 = \sum_{m \neq n} \frac{{}_0\langle m|W|n\rangle_0}{E_{n,0} - E_{m,0}} |m\rangle_0 \quad [14.2.12]$$

Si el espectro de H_0 tuviese parte continua, entonces el sumatorio de la ecuación anterior sería una integral. Insistiremos por último en que nada impide que los estados $|m\rangle_0$ con $m \neq n$ sean degenerados, con tal de que $|n\rangle_0$ no lo sea.

Segundo orden. Para obtener la corrección en segundo orden a la energía, multiplicamos los dos miembros de [14.2.6] por el bra ${}_0\langle n|$. Usando además que, como hemos visto, $|n\rangle_0$ y $|n\rangle_1$ son ortogonales, se tiene

$${}_0\langle n|W|n\rangle_1 + {}_0\langle n|H_0|n\rangle_2 = E_{n,2} + {}_0\langle n|n\rangle_2 E_{n,0} \quad [14.2.13]$$

Al ser H_0 autoadjunto, se tiene ${}_0\langle n|H_0|n\rangle_2 = {}_0\langle n|n\rangle_2 E_{n,0}$, y los segundos términos de ambos miembros se cancelan, con lo que resulta

$$E_{n,2} = {}_0\langle n|W|n\rangle_1 \quad [14.2.14]$$

Utilizando por último la ecuación [14.2.12] para $|n\rangle_1$, llegamos a la expresión buscada

$$E_{n,2} = \sum_{m \neq n} \frac{|{}_0\langle m|W|n\rangle_0|^2}{E_{n,0} - E_{m,0}} \quad [14.2.15]$$

Si parte del espectro de H_0 fuera continuo, las sumas en [14.2.15] serían integrales. De nuevo, los estados no perturbados $|m\rangle_0$ como $m \neq n$ pueden ser degenerados.

Resulta difícil dar criterios generales de convergencia para los desarrollos [14.2.3]; de manera no rigurosa podemos ver que para que las correcciones [14.2.12] y [14.2.15] sean pequeñas, es preciso que

$$\lambda |{}_0\langle m|W|n\rangle_0| \ll |E_{n,0} - E_{m,0}| \quad (m \neq n) \quad [14.2.16]$$

Esta condición puede fallar, y así ocurre en situaciones físicamente relevantes, cuando haya niveles no perturbados $E_{m,0}$ muy próximos al nivel $E_{n,0}$. No obstante, existen recursos (véase Galindo, Pascual) que permiten salvar este tipo de situaciones modificando el hamiltoniano no perturbado H_0 y la perturbación W .

La corrección en segundo orden al estado, $|n\rangle_2$, se calcula a partir de [14.2.6] multiplicando ambos miembros por el bra ${}_0\langle m|$ con $m \neq n$. Un cálculo similar al realizado para obtener [14.2.12] conduce a

$${}_0\langle m|n\rangle_2 = \frac{1}{E_{n,0} - E_{m,0}} \left\{ \sum_{j \neq n} \frac{{}_0\langle m|W|j\rangle_0 {}_0\langle j|W|n\rangle_0}{E_{n,0} - E_{j,0}} - \frac{{}_0\langle m|W|n\rangle_0 E_{n,1}}{E_{n,0} - E_{m,0}} \right\} \quad [14.2.17]$$

De esta manera, la corrección en segundo orden queda

$$|n\rangle_2 = \sum_{m \neq n} {}_0\langle m|n\rangle_2 |m\rangle_0 \quad [14.2.18]$$

Como se ha mencionado previamente, el estado calculado hasta segundo orden $|n\rangle = |n\rangle_0 + \lambda |n\rangle_1 + \lambda^2 |n\rangle_2$ no tiene norma unidad, pues al orden considerado $\langle n|n\rangle = 1 + \lambda^2 {}_1\langle n|n\rangle_1$. Llamando $Z_2 = 1 - (1/2)\lambda^2 {}_1\langle n|n\rangle_1$ tendremos que $Z_2 |n\rangle$ estará normalizado hasta segundo orden.

Ejemplo. Nivel no degenerado. Consideremos un oscilador armónico unidimensional $H_0 = p^2/2m + kx^2/2$ al que se añade una perturbación $H_1 = \gamma x^4$. Piénsese, por ejemplo, en que el potencial armónico en H_0 corresponde al primer orden de aproximación de un potencial y la perturbación H_1 es la corrección introducida al considerar el siguiente término del desarrollo del potencial. Escribamos la perturbación en la forma $H_1 = \lambda W$. Un sencillo cálculo dimensional muestra que $\lambda = \gamma/(\hbar\omega\alpha^4)$, siendo $\omega = \sqrt{k/m}$ y $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$. La perturbación queda $W = \hbar\omega\alpha^4 x^4$.

Calculemos la corrección en primer orden, $E_{n,1}$, al nivel no degenerado $E_{n,0} = (n + 1/2)\hbar\omega$, por efecto de la perturbación. De acuerdo con [14.2.8], tenemos

$$E_{n,1} = {}_0\langle n | \hbar\omega\alpha^4 x^4 | n \rangle_0 \quad [14.2.19]$$

Usando, por ejemplo, los operadores de creación y destrucción a^\dagger , a introducidos en el capítulo 8, resulta

$$E_{n,1} = \frac{3}{4}(2n^2 + 2n + 1)\hbar\omega \quad [14.2.20]$$

La corrección en primer orden al estado $|n\rangle_0$ vendrá dada, de acuerdo con [14.2.12], por

$$|n\rangle_1 = \sum_{m \neq n} \frac{{}_0\langle m | \alpha^4 x^4 | n \rangle_0}{(n - m)} |m\rangle_0 \quad [14.2.21]$$

Un cálculo largo pero sencillo conduce a

$$\begin{aligned} |n\rangle_1 = & \frac{1}{16} (-\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} |n+4\rangle_0 - 4(2n+3)\sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2\rangle_0 + \\ & + 4(2n-1)\sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle_0 + \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} |n-4\rangle_0) \end{aligned}$$

donde hemos supuesto que $n \geq 4$.

Una vez realizado este laborioso cálculo, es fácil obtener el segundo orden para la energía $E_{n,2}$:

$$E_{n,2} = -\frac{1}{16} (68n^3 + 102n^2 + 110n + 42)\hbar\omega \quad n \geq 4 \quad [14.2.22]$$

Como puede verse a partir de las expresiones obtenidas para $E_{n,1}$ y $E_{n,2}$, los coeficientes de las diferentes potencias de n son cada vez mayores en valor absoluto. Cálculos de los órdenes superiores (Galindo y Pascual) confirman esta sospecha; los coeficientes de los sucesivos órdenes alternan en signo y crecen rapidísimamente: como $k!$, siendo k el orden de perturbaciones. De modo que, por muy pequeña que sea la constante de acoplo λ , siempre existe un orden de perturbaciones suficientemente elevado a partir del cual la

serie perturbativa empieza a sufrir enormes oscilaciones y la aproximación carece de sentido. Este tipo de series perturbativas se llaman asintóticas y se caracterizan por el hecho de que unos pocos términos conducen a buenas aproximaciones, pero añadir otros nuevos conduce a peores resultados. Existen técnicas para solventar este tipo de problemas, llamadas de resumación, que consisten en sumar la serie de manera distinta, obteniéndose así buenas aproximaciones.

14.3. TEORÍA DE PERTURBACIONES. NIVELES DEGENERADOS

Supongamos que el nivel $E_{n,0}$ de H_0 es degenerado g_n veces. Existen entonces g_n autoestados $|n, 1\rangle_0, |n, 2\rangle_0, \dots, |n, g_n\rangle_0$, correspondientes al mismo autovalor de H_0 .

En la ecuación [14.2.5], cualquier combinación lineal de los g_n estados degenerados es válida como estado no perturbado $|n\rangle_0$. Una expresión válida para él será

$$|n\rangle_0 = \sum_{j=1}^{g_n} {}_0\langle n, j|n\rangle_0 |n, j\rangle_0 \quad [14.3.1]$$

Multiplicando los dos miembros de [14.2.5] por ${}_0\langle n, i|$, tenemos

$${}_0\langle n, i|W|n\rangle_0 + {}_0\langle n, i|H_0|n\rangle_1 = {}_0\langle n, i|n\rangle_0 E_{n,1} + {}_0\langle n, i|n\rangle_1 E_{n,0} \quad [14.3.2]$$

Los segundos términos de ambos miembros se cancelan, y usando [14.3.1], se tiene

$$\sum_{j=1}^{g_n} {}_0\langle n, i|W|n, j\rangle_0 {}_0\langle n, j|n\rangle_0 = E_{n,1} \sum_{j=1}^{g_n} {}_0\langle n, i|n, j\rangle_0 {}_0\langle n, j|n\rangle_0 \quad [14.3.3]$$

Esta ecuación que acabamos de obtener es un sistema homogéneo de g_n ecuaciones lineales con g_n incógnitas ${}_0\langle n, 1|n\rangle_0, {}_0\langle n, 2|n\rangle_0, \dots, {}_0\langle n, g_n|n\rangle_0$, que son las componentes del estado $|n\rangle_0$ en la base del subespacio asociado al autovalor $E_{n,0}$. Los valores de $E_{n,1}$ para los que el sistema anterior tiene solución distinta de la trivial ($|n\rangle_0 = 0$), son las raíces del polinomio característico

$$\begin{vmatrix} {}_0\langle n, 1|W|n, 1\rangle_0 - E_{n,1} & {}_0\langle n, 1|W|n, 2\rangle_0 & \cdots & {}_0\langle n, 1|W|n, g_n\rangle_0 \\ {}_0\langle n, 2|W|n, 1\rangle_0 & {}_0\langle n, 2|W|n, 2\rangle_0 - E_{n,1} & \cdots & {}_0\langle n, 2|W|n, g_n\rangle_0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ {}_0\langle n, g_n|W|n, 1\rangle_0 & {}_0\langle n, g_n|W|n, 2\rangle_0 & \cdots & {}_0\langle n, g_n|W|n, g_n\rangle_0 - E_{n,1} \end{vmatrix} = 0 \quad [14.3.4]$$

Dicho de otra forma, las correcciones en primer orden a la energía $E_{n,1}$ son los autovalores de la matriz formada con los elementos de matriz de la perturbación en los estados degenerados no perturbados.

Los autoestados en orden 0 de perturbaciones $|n\rangle_0$ son los vectores propios correspondientes a los autovalores no degenerados calculados en [14.3.4]. Cuando la dimensión asociada al autovalor sea mayor que uno, habrá que recurrir a órdenes superiores para su cálculo. Por ello, las simetrías de H_0 y H_1 desempeñan un papel importante a la hora de estudiar el efecto de una perturbación sobre los estados no perturbados.

Ejemplo. Nivel degenerado. Como ejemplo, consideremos un rotor rígido con hamiltoniano no perturbado $H_0 = L^2/2I$, donde I es el momento de inercia, al que se añade una perturbación del tipo $H_1 = \gamma L_z$. Tal situación ocurriría, por ejemplo, al colocar el rotor en un campo magnético orientado según el eje Z . Vamos a estudiar, en primer orden de perturbaciones, las correcciones a la energías de los estados propios de H_0 . De acuerdo con lo visto en el capítulo 11, los autoestados de H_0 son de la forma $|l, m_l\rangle_0$, verificándose

$$H_0|l, m_l\rangle_0 = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)|l, m_l\rangle_0$$

siendo $l = 0, 1, 2, \dots$ y $m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. La degeneración es igual al número de valores posibles de m_l , por tanto, $g_l = 2l+1$. Usando el cálculo dimensional introducimos una constante de acoplo adimensional $\lambda = \gamma I/\hbar$ para poder escribir $H_1 = \lambda W$ con $W = (\hbar/I)L_z$.

De acuerdo con [14.3.4] necesitamos los elementos de matriz de la perturbación entre los estados no perturbados. En este caso el cálculo es extraordinariamente simple porque los estados no perturbados son autoestados de la perturbación, pues, como vimos en el capítulo 11,

$$L_z|l, m_l\rangle_0 = m_l\hbar|l, m_l\rangle_0$$

de donde se sigue que la matriz buscada es diagonal y, por tanto, hay $2l+1$ raíces del polinomio característico [14.3.4] dadas por

$$E_{n,l}(m_l) = \frac{\hbar^2}{I} m_l \quad , \quad m_l = -l, \dots, l \quad [14.3.5]$$

En resumen, la perturbación introducida ha roto completamente la degeneración, separando el nivel inicial en $2l+1$ niveles equidistantes.

14.4. MÉTODO VARIACIONAL

El método variacional se emplea, principalmente, en la determinación del nivel de energía fundamental de un sistema físico del que no se conoce un problema aproximado con solución exacta, de forma que el método de perturbaciones estacionarias no es aplicable.

Consideremos un sistema físico cualquiera cuyo hamiltoniano H es independiente del tiempo. Supondremos, por sencillez, que el espectro de H es discreto y no degenerado:

$$H|\Phi_n\rangle = E_n|\Phi_n\rangle \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [14.4.1]$$

El método variacional se aplica al caso en que no conocemos los autovalores ni autofunciones de H . Si tomamos un estado cualquiera del sistema en un tiempo dado t y lo desarrollamos sobre la base de autofunciones $\{|\Phi_n\rangle\}$, obtendremos:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n |\Phi_n\rangle \quad [14.4.2]$$

Si la función de ondas está normalizada, el valor medio de la energía para ese estado vendrá dado por

$$\langle H \rangle_\Psi = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n$$

Reemplazando cada energía E_n en la suma de la parte derecha de la igualdad por la energía más baja E_0 , se obtiene la desigualdad:

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle \geq \sum_n |c_n|^2 E_0 = E_0 \sum_n |c_n|^2 \quad [14.4.3]$$

Como $\sum_n |c_n|^2 = 1$ para una función de ondas normalizada, la desigualdad [14.4.3] pasa a ser:

$$E_0 \leq \langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

En el caso general de que la función de ondas $|\Psi\rangle$ no esté normalizada, teniendo en cuenta que $\sum_n |c_n|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle$, la desigualdad [14.4.3] puede escribirse en la forma

$$E_0 \leq \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad [14.4.4]$$

verificándose la igualdad sólo en el caso de que el estado $|\Psi\rangle$ sea un vector propio de H con autovalor E_0 . La demostración de la desigualdad [14.4.4] se generaliza fácilmente al caso en el que el espectro de H sea degenerado o tenga una parte continua.

La propiedad [14.4.4] es la base del método variacional de aproximación para hallar el estado fundamental E_0 . Para ello, se escoge una familia de kets prueba $|\Phi(\alpha)\rangle$, que depende de un número de parámetros que denotamos por α , se calcula el valor esperado de la energía $\langle H \rangle(\alpha)$ para los estados de la familia y se minimiza $\langle H \rangle(\alpha)$ con respecto a los parámetros α . El valor así obtenido es, de acuerdo con [14.4.4], una cota superior a la energía del estado fundamental del sistema, y será más próximo a E_0 cuanto más parecida sea la función prueba $|\Phi(\alpha)\rangle$ a la autofunción (véase ejercicio 14.5). Es, por tanto, muy importante utilizar criterios físicos y toda la información posible al elegir la familia $|\Phi(\alpha)\rangle$.

El método variacional puede utilizarse en algunos casos para el cálculo de niveles excitados. Imaginemos que conocemos el subespacio vectorial \mathcal{E}_0 de autofunciones correspondientes al nivel fundamental. Si las funciones prueba son ortogonales al subespacio \mathcal{E}_0 , al hacer el desarrollo [14.4.2] para estas funciones, el coeficiente c_0 se anulará, con lo que podemos obtener la desigualdad [14.4.3] con E_1 en lugar de E_0 . El problema es que, en la práctica, se desconoce \mathcal{E}_0 . Sin embargo, en muchos problemas de interés físico existen observables cuyas autofunciones tienen una estructura conocida, como, por ejemplo, el momento angular en un problema con simetría esférica. Si la familia de funciones prueba pertenece al subespacio de autofunciones correspondientes a un número cuántico dado del observable, estaremos seguros de que los valores esperados del hamiltoniano en esos estados no son inferiores al menor nivel de energía con dicho número cuántico. En el ejemplo del problema con simetría esférica, correspondería a tomar funciones prueba con ℓ y m fijados.

La restricción de que las funciones prueba pertenezcan a un subespacio vectorial determinado puede servir no sólo para el cálculo de niveles excitados, sino también para simplificar en algunos casos notablemente el problema variacional. Éste es el caso del método de combinación lineal de orbitales atómicos, utilizado en Física Molecular. El método consiste esencialmente en la búsqueda de funciones de onda de los electrones en la molécula como combinaciones lineales de autofunciones asociadas a los diversos átomos que constituyen la molécula, tratados como si estuvieran aislados (véase apartado 24.5). Limitamos, por tanto, la búsqueda de estados moleculares a un subespacio escogido sobre la base de consideraciones físicas.

Aplicación a un ejemplo sencillo: el oscilador armónico en una dimensión

El método variacional tiene grandes aplicaciones en muy distintos campos de la Física. Ya hemos comentado su utilidad para el estudio de moléculas. Es igualmente importante en el estudio de núcleos, sólidos y átomos complejos. La aplicación del método al cálculo de los niveles energéticos del átomo de helio se describe en sección 22.4. Aquí vamos a aplicarlo al cálculo de la energía del estado fundamental del oscilador armónico en una dimensión. El hamiltoniano es, por tanto, de la forma:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad [14.4.5]$$

Como el hamiltoniano es par, la función de onda del estado fundamental será una función par. Escogeremos, por tanto, como funciones de ensayo, funciones pares. Elegimos la familia de exponenciales decrecientes dependientes de un parámetro α :

$$\Phi_\alpha(x) = e^{-\alpha x^2}, \quad \alpha > 0 \quad [14.4.6]$$

El cuadrado de la norma del ket $|\Phi_\alpha\rangle$ es, por tanto,

$$\langle \Phi_\alpha | \Phi_\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx$$

mientras que integrando por partes, se encuentra fácilmente que:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_\alpha | H | \Phi_\alpha \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] e^{-\alpha x^2} dx = \\ &= \left(\frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{1}{8} m \omega^2 \frac{1}{\alpha} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx \end{aligned}$$

de forma que:

$$\langle H \rangle(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{1}{8} m \omega^2 \frac{1}{\alpha} \quad [14.4.7]$$

La derivada de la función $\langle H \rangle(\alpha)$ se anula para

$$\alpha = \alpha_0 = \frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} \quad [14.4.8]$$

y, por tanto,

$$\langle H \rangle(\alpha_0) = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad [14.4.9]$$

El valor mínimo de $\langle H \rangle(\alpha)$ es, en este caso, exactamente igual a la energía del nivel fundamental. Es un resultado debido a la sencillez del problema estudiado: la función de onda del estado fundamental es, precisamente, una de las funciones prueba, y el método variacional nos proporciona la solución exacta del problema.

14.5. PERTURBACIONES DEPENDIENTES DEL TIEMPO

Consideremos un sistema físico descrito por un hamiltoniano H_0 independiente del tiempo. Supondremos, por sencillez, que su espectro de autovalores es discreto y no degenerado:

$$H_0 | \Phi_n \rangle = E_n | \Phi_n \rangle \quad [14.5.1]$$

En un instante t_0 , que tomaremos como origen de tiempos ($t_0 = 0$), se aplica una perturbación al sistema. El hamiltoniano pasa a ser

$$H(t) = H_0 + H_1(t) \quad [14.5.2]$$

donde se hace la hipótesis de que la perturbación es pequeña: $H_1(t) = \lambda W(t)$, siendo λ un parámetro adimensional introducido por conveniencia de forma que: $\lambda \ll 1$, $W \sim H_0$, $W(t) = 0$ para $t < 0$.

Inicialmente, suponemos que el sistema se encuentra en un estado estacionario $|\Phi_i\rangle$. A partir de $t = 0$, el sistema evoluciona debido a la perturbación. Se trata de calcular la probabilidad $P_{if}(t)$ de encontrar el sistema, en un tiempo t , en otro estado propio $|\Phi_f\rangle$ de H_0 . En otras palabras, se trata de estudiar las transiciones que pueden ser inducidas por la perturbación $H_1(t)$ entre estados estacionarios del sistema no perturbado.

Entre 0 y t , el sistema evoluciona de acuerdo con la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = [H_0 + H_1(t)] |\Psi(t)\rangle \quad [14.5.3]$$

La solución de esta ecuación, conocido $|\Psi(t=0)\rangle = |\Phi_i\rangle$, es única. La probabilidad buscada $P_{if}(t)$ es:

$$P_{if}(t) = |\langle \Phi_f | \Psi(t) \rangle|^2 \quad [14.5.4]$$

El problema exacto es, en general, difícil de resolver. Sin embargo, si λ es suficientemente pequeña, se puede hacer un desarrollo en potencias de λ para el cálculo aproximado de $P_{if}(t)$.

Como los estados propios $|\Phi_i\rangle$ y $|\Phi_f\rangle$ intervienen explícitamente en el problema, usaremos para representar el ket $|\Psi(t)\rangle$ su desarrollo en la base $\{|\Phi_n\rangle\}$:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\Phi_n\rangle \quad [14.5.5]$$

donde $c_n(t) = \langle \Phi_n | \Psi(t) \rangle$. En esta base, que supondremos normalizada, el operador hamiltoniano (sin perturbar) vendrá representado por una matriz diagonal:

$$\langle \Phi_n | H_0 | \Phi_k \rangle = E_n \delta_{nk} \quad [14.5.6]$$

Si se multiplica escalarmente la ecuación de Schrödinger [14.5.3] por $|\Phi_n\rangle$, se obtiene:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) &= \sum_k \langle \Phi_n | H_0 | \Phi_k \rangle \langle \Phi_k | \Psi(t) \rangle + \sum_k \langle \Phi_n | H_1(t) | \Phi_k \rangle \langle \Phi_k | \Psi(t) \rangle = \\ &= E_n c_n(t) + \lambda \sum_n W_{nk}(t) c_k(t) \end{aligned} \quad [14.5.7]$$

siendo $W_{nk}(t)$ el elemento de matriz $\langle \Phi_n | W(t) | \Phi_k \rangle$ del operador $W(t)$ en la base $\{|\Phi_n\rangle\}$, donde hemos hecho uso de la igualdad [14.5.6] y de la relación de cierre (completitud de la base): $\sum_k |\Phi_k\rangle \langle \Phi_k| = 1$. Encontrar la solución de la ecuación de Schrödinger [14.5.3] es equivalente a resolver el sistema de ecuaciones diferenciales lineales acopladas [14.5.7] para los coeficientes $c_n(t)$.

Cuando $\lambda W(t) = 0$, las ecuaciones [14.5.7] se desacoplan y su solución es conocida:

$$c_n(t) = a_n e^{-iE_n t/\hbar}$$

donde las constantes a_n dependen de las condiciones iniciales. Si $\lambda W(t) \neq 0$ y $\lambda \ll 1$, es de esperar que la solución sea muy próxima, por lo que introducimos para representar el ket $|\Psi(t)\rangle$ unos nuevos coeficientes $a_n(t)$, definidos por la relación:

$$c_n(t) = a_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \quad [14.5.8]$$

Cuando $\lambda \ll 1$, la variación temporal de los coeficientes $a_n(t)$ será lenta comparada con la fase de la exponencial. Sustituyendo las expresiones [14.5.8] en las ecuaciones [14.5.7], se obtiene para $a_n(t)$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_n(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk}t} W_{nk}(t) a_k(t) \quad [14.5.9]$$

donde

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar} \quad [14.5.10]$$

es la frecuencia de Bohr.

El sistema de ecuaciones [14.5.9] es equivalente a la ecuación de Schrödinger [14.5.3]. Su solución exacta no puede, en general, obtenerse analíticamente. Por ello, se utiliza, para resolver el sistema, un desarrollo de los coeficientes $a_n(t)$ en series de potencias de λ , que supondremos convergentes si λ es suficientemente pequeño:

$$a_n(t) = a_n^{(0)}(t) + \lambda a_n^{(1)}(t) + \lambda^2 a_n^{(2)}(t) + \dots \quad [14.5.11]$$

Si sustituimos este desarrollo en la ecuación [14.5.9] e igualamos los coeficientes de λ^p en los miembros de la izquierda y derecha de la igualdad, se obtiene, al orden 0:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_n^{(0)}(t) = 0 \quad [14.5.12]$$

Por tanto, el coeficiente $a_n^{(0)}$ es independiente del tiempo. Corresponde al hecho de que a_n es una constante si $\lambda = 0$. Para un orden $p \neq 0$, la ecuación pasa a ser:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_n^{(p)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} W_{nk}(t) a_n^{(p-1)}(t) \quad [14.5.13]$$

Por tanto, la solución de orden cero queda completamente determinada por las condiciones iniciales, mientras que las relaciones de recurrencia [14.5.13] permiten obtener la solución en cualquier otro orden.

Solución de orden 1 en λ

Por hipótesis, el sistema se encuentra en un estado estacionario $|\Phi_i\rangle$ cuando $t < 0$. Por tanto, todos los coeficientes $a_n(t)$, a excepción de $a_i(t)$, son nulos. En $t = 0$, aparece una discontinuidad finita en la ecuación de Schrödinger al añadir el término $\lambda W(t)$ al hamiltoniano. Como la perturbación es finita, la solución $|\Psi(t)\rangle$ será continua en $t = 0$: $a_n(t = 0) = \delta_{ni}$, siendo esta igualdad válida para cualquier valor de λ . Por consiguiente, los coeficientes del desarrollo [14.5.11] verifican las condiciones iniciales:

$$a_n^{(0)}(t = 0) = \delta_{ni} \quad , \quad a_n^{(p)}(t = 0) = 0 \quad \text{si } p > 0 \quad [14.5.14]$$

De [14.5.12] es inmediato que

$$a_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} \quad [14.5.15]$$

La solución de orden cero es la correspondiente al hamiltoniano sin perturbar H_0 , como era de esperar. Sustituyendo este resultado en la ecuación [14.5.13] para $p = 1$, se obtiene:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_n^{(1)}(t) = e^{i\omega_{ni}t} W_{ni}(t) \quad [14.5.16]$$

La integración de esta ecuación es inmediata. Teniendo en cuenta las condiciones iniciales [14.5.14], su solución viene dada por:

$$a_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} W_{ni}(t') dt' \quad [14.5.17]$$

Si ahora sustituimos las expresiones [14.5.15] y [14.5.17] en [14.5.8] y esta expresión, a su vez, en [14.5.5], obtenemos el estado $|\Psi(t)\rangle$ del sistema en el instante t , calculado hasta orden 1 en λ .

La probabilidad de transición $P_{if}(t)$ viene dada por la expresión [14.5.4]. Del desarrollo [14.5.5] y la definición [14.5.8], es inmediato que:

$$P_{if}(t) = |a_f(t)|^2$$

donde $a_f(t)$ viene dado por el desarrollo [14.5.11]. En general, estaremos interesados en el estudio de transiciones inducidas por $\lambda W(t)$ entre dos estados estacionarios distintos de H_0 : los estados $|\Phi_i\rangle$ y $|\Phi_f\rangle$ serán diferentes. Por consiguiente, $a_f^{(0)}(t) = 0$ y la expresión para la probabilidad de transición $P_{if}(t)$ pasa a ser (al primer orden):

$$P_{if}(t) = \lambda^2 |a_f^{(1)}(t)|^2$$

De la expresión [14.5.17], y reemplazando $\lambda W(t)$ por $H_1(t)$, se obtiene finalmente:

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} H_{1_{fi}}(t') dt' \right|^2 \quad [14.5.18]$$

donde $H_{1_{fi}}(t)$ es el elemento de matriz $\langle \Phi_f | H_1(t) | \Phi_i \rangle$ del operador $H_1(t)$ entre los estados inicial y final. Si la perturbación $H_1(t)$ tiene una duración finita, la probabilidad de transición es proporcional, de acuerdo con [14.5.18], al cuadrado del módulo de la transformada de Fourier del elemento de matriz $H_{1_{fi}}(t)$, calculada para una frecuencia igual a la frecuencia de Bohr asociada con la transición.

Casos particularmente interesantes de aplicación de este método son las perturbaciones constantes (ejercicio 14.10) y aquellas que dependen sinusoidalmente del tiempo. Estas últimas son tratadas en el estudio de la interacción de la materia con una onda electromagnética (sección 21.3).

EJERCICIOS

14.1. Una partícula de masa $m = 10 \text{ MeV}$ y carga $q = -e$ está sometida a un potencial unidimensional $V(x) = kx^2/2$ con $k = 1 \text{ MeV/fm}^2$. Estudiar la corrección que experimentan los niveles de energía cuando se somete la partícula a un campo eléctrico uniforme $\mathcal{E} = 8.3 \times 10^{-2} \text{ MeV}^{1/2}\text{fm}^{-3/2}$. Compárese con el resultado exacto.

14.2. Un rotor rígido está sometido a una perturbación $H_1 = \gamma L_x$. Estudia en primer orden de perturbaciones, las correcciones a su primer estado excitado.

14.3. Un oscilador armónico isótropo bidimensional está sometido a una perturbación $H_1 = \lambda xy$. Calcular, en primer orden de perturbaciones, la corrección a su segundo estado excitado.

14.4. Un pozo de potencial unidimensional, centrado en torno al origen, de paredes infinitas se perturba con $H_1 = \lambda \delta(x)$. Estudia en primer y segundo orden la corrección a sus niveles de energía.

14.5. Supongamos que una función prueba $|\Phi\rangle$ en el método variacional difiere de la autofunción $|\Phi_0\rangle$ correspondiente al estado fundamental en una pequeña cantidad, de forma que puede escribirse como $|\Phi\rangle = |\Phi_0\rangle + \varepsilon|\tilde{\Phi}\rangle$, donde $|\Phi_0\rangle$ y $|\tilde{\Phi}\rangle$ están normalizadas y $\varepsilon \ll 1$. Demostrar que $\langle H \rangle$ difiere de E_0 en un término de orden ε^2 y encontrar dicho término.

14.6. Una partícula de masa μ se encuentra sometida al potencial $V(r) = V_0 e^{-r/a}$, donde $-\mu V_0 a^2 / \hbar^2 = 4/3$. Obtener una aproximación al nivel de energía más bajo mediante el método variacional con una función prueba $e^{-\alpha r}$.

14.7. Suponiendo que las $n - 1$ primeras autofunciones de un hamiltoniano son conocidas, escribir la expresión formal de una función prueba, que pueda usarse para encontrar un límite superior al nivel de energía E_n mediante el método variacional.

14.8. Encontrar, mediante la aplicación del método variacional, el primer estado excitado del oscilador armónico en una dimensión.

Ayuda: la autofunción del estado excitado será ortogonal a la autofunción del estado fundamental.

14.9. Discutir la validez de la aproximación de primer orden en λ en la resolución aproximada del problema de las perturbaciones dependientes del tiempo. Para ello, comparar las expresiones [14.5.9] y [14.5.16].

14.10. Considérese un sistema físico descrito por un hamiltoniano H_0 independiente de t , al que se aplica una perturbación H_1 constante en el instante $t = 0$ ($H_1 \ll H_0$). Calcular, al primer orden, la probabilidad de transición $P_{ij}(t)$ entre dos autoestados $|\Phi_i\rangle$ y $|\Phi_j\rangle$ de H_0 . Discutir la validez de la aproximación.

15

Partículas idénticas. Fotones

Ramón F. Álvarez-Estrada

15.1. PARTÍCULAS IDÉNTICAS EN MECÁNICA CLÁSICA Y CUÁNTICA

Dos o más partículas (macroscópicas o microscópicas) son idénticas si tienen iguales *todas* sus propiedades y características físicas (masa, carga eléctrica, espín...). La cuestión importante planteada por los sistemas que contienen partículas idénticas es si éstas son distinguibles o indistinguibles. Si, pese a ser idénticas, fuese posible *distinguir*las entre sí *de alguna forma*, entonces su estudio, *tras atribuir una etiqueta diferenciadora a cada una*, no generaría ningún aspecto novedoso. Si, por el contrario, por ser idénticas fuesen *indistinguibles*, ya no sería posible etiquetarlas, y surgirían problemas nuevos en su descripción, que habrían de ser entendidos y resueltos. Procedamos a un análisis rápido de lo que ocurre para partículas macroscópicas (en Mecánica Clásica) y microscópicas (en Mecánica Cuántica), sucesivamente.

El estudio de dos o más partículas casi puntuales macroscópicas idénticas no da lugar a situaciones nuevas casi nunca. Para aclarar esta observación y fijar las ideas, nos limitaremos a dos partículas, en principio sometidas a interacción. Un observador externo puede analizar (sin perturbarlas) su evolución en el tiempo mientras están separadas, distinguiendo netamente una de otra. Por tanto, puede denominar a una de ellas «la partícula 1» (es decir, atribuir a su posición y a su momento los subíndices «1»: $\mathbf{r}_{cl,1}(t)$, $\mathbf{p}_{cl,1}(t)$) y asignar a la otra las etiquetas de «la partícula 2» (esto es, su posición y su momento se designan mediante $\mathbf{r}_{cl,2}(t)$, $\mathbf{p}_{cl,2}(t)$). Todo esto puede hacerse sin ambigüedad mientras no haya choques entre las dos partículas. Si éstas chocan, por tratarse de entidades casi puntuales que coinciden en una región del espacio también prácticamente puntual, pueden hacerse indistinguibles durante el instante o el breve intervalo temporal que dure la colisión, y, así, «es como si perdiesen sus etiquetas». Pero al separarse de nuevo, justo después de la colisión, ya se les puede atribuir otra vez «etiquetas», con lo que vuelven a ser distinguibles. Véase la figura 15.1. En resumen (y con la eventual excepción de choques), las partículas macroscópicas idénticas siempre pueden tratarse como distinguibles.

Ahora trataremos el caso de dos partículas microscópicas idénticas donde sí hay aspectos nuevos. Supongamos, por sencillez, que las dos partículas tienen espín cero y están libres, y que cada una tiene asociado un paquete $\Psi_j(\mathbf{r}_j, t)$ tal como [6.3.3]. Mientras ambos paquetes *no* se solapan (es decir, *no* haya ninguna región del espacio tridimensional en la que sean apreciables simultáneamente las magnitudes de ambas funciones de onda), las

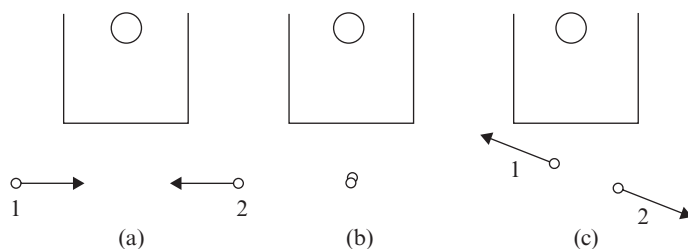


Figura 15.1. Evolución de dos partículas macroscópicas idénticas en Mecánica Clásica (O es un observador externo). (a) Por estar separadas son distinguibles y O puede «etiquetarlas» arbitrariamente, pero sin ambigüedad. (b) Durante la colisión, pueden dejar de ser distinguibles (por ser puntuales). (c) Tras el choque, por estar separadas de nuevo, vuelven a ser distinguibles y pueden ser «etiquetadas» otra vez.

dos partículas idénticas pueden tratarse como distinguibles (véase figura 15.2). La situación es similar a la del caso clásico: un observador externo puede entonces, atribuir sendas etiquetas a cada paquete, y decir cuál es «1» y cuál es «2». Entonces, ambas partículas pueden describirse mediante una función de onda global tal como [7.12.6]. El problema surge cuando ambos paquetes se solapan (que es la situación genuina): entonces, en una misma región, en un instante dado, hay una probabilidad apreciable de encontrar a ambas partículas. Las incertidumbres en las posiciones de cada partícula pueden ser, en general, del orden de magnitud del tamaño de la región en que se solapan ambos paquetes. Entonces, al observador externo le resulta ya imposible decir cuál es cuál y, por tanto, continuar atribuyendo «etiquetas» distintivas a las partículas (véase figura 15.2). La inclusión de interacciones, que tampoco distinguen a las partículas entre sí, no resuelve la dificultad. En resumen, las partículas microscópicas idénticas, aunque puedan ser aproximadamente dis-

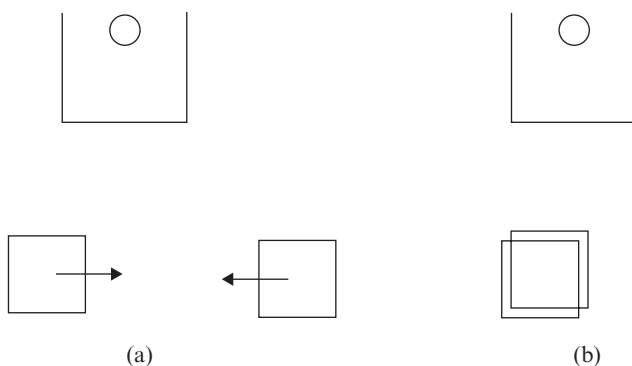


Figura 15.2. Evolución de dos partículas microscópicas idénticas en Mecánica Cuántica (O es un observador externo). (a) Por no solaparse los dos paquetes, son distinguibles y O puede atribuir etiquetas distintivas a cada partícula. (b) Los paquetes solapan muy apreciablemente (situación genuina en Mecánica Cuántica): las partículas son indistinguibles.

tinguibles cuando sus paquetes asociados no se solapen, son, en principio, genuinamente indistinguibles. Así pues, la descripción probabilística para dos o más partículas microscópicas *distintas que pueden estar en la misma región del espacio*, introducida en la sección 7.12, ha de ser revisada críticamente en el caso de que sean idénticas. Habrá que formular una nueva descripción para éstas que tenga en cuenta el hecho general de su indistinguibilidad. Ésa es la tarea de las secciones que siguen.

15.2. DOS PARTÍCULAS MICROSCÓPICAS IDÉNTICAS: FUNCIÓN DE ONDA

Hagamos explícito el criterio con el que, implícitamente, hemos representado, hasta ahora, la función de onda de dos partículas. Así, en $\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, t)$ el primer hueco dentro del paréntesis (hasta la primera coma) se reserva para el vector posición (y eventualmente, otros números cuánticos como la proyección del espín) de la partícula «1», y el segundo (entre la primera y la segunda coma) para el (o los) de la partícula «2». Suponiendo que cada una de las partículas tiene espín s (0 o $1/2$, para fijar las ideas), estamos designando por σ el autovalor de la tercera componente del espín (0 o $\pm 1/2$, respectivamente). Por tanto, $\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, t)$ es la función de onda cuando la partícula 1 está en r_1 , con proyección de espín σ_1 , y la 2 en r_2 con σ_2 (en t); por el mismo criterio, $\Psi(r_2\sigma_2, r_1\sigma_1, t)$ es la función de onda cuando la partícula 1 está en r_2 con σ_2 y la 2 en r_1 con σ_1 (también en t). Estos criterios continuarán siendo adoptados en lo que sigue.

La idea básica de que las partículas microscópicas idénticas, libres o sometidas a interacción son indistinguibles hace natural que $\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, t)$ y $\Psi(r_2\sigma_2, r_1\sigma_1, t)$ representen el mismo estado, es decir, postularemos que

$$\Psi(r_2\sigma_2, r_1\sigma_1, t) = \alpha\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, t), \quad \Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, t) = \alpha\Psi(r_2\sigma_2, r_1\sigma_1, t) \quad [15.2.1]$$

siendo α una constante. Es físicamente lógico que α sea una constante independiente de $r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, t$ y, más aún, que sea la misma en ambos intercambios globales de vectores de posición y proyecciones de espín respecto a partículas: los argumentos de la sección 15.1 son consistentes con estas ideas. La combinación de ambas ecuaciones [15.2.1] implica

$$\alpha^2 = 1 \quad , \quad \alpha = \pm 1 \quad [15.2.2]$$

Supongamos que la función de onda está normalizada (incluyendo el efecto del espín, cuando éste es no nulo), es decir

$$\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3r_1 d^3r_2 |\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, t)|^2 = 1 \quad [15.2.3]$$

que debe compararse con [7.12.14] y con la sección 13.4.

Consideremos, ahora, la probabilidad de que, en el instante t , la partícula 1 esté en d^3r_1 en torno a r_1 con proyección de espín σ_1 y la 2 en d^3r_2 en torno a r_2 , con proyección en el espín σ_2 :

$$|\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, t)|^2 d^3r_1 d^3r_2 \quad [15.2.4]$$

La probabilidad de que la partícula 1 esté en d^3r_2 en torno a r_2 con espín σ_2 , y la 2 en d^3r_1 con σ_1 , en torno a r_1 (en t) es

$$|\Psi(r_2\sigma_2, r_1\sigma_1, t)|^2 d^3r_1 d^3r_2 \quad [15.2.5]$$

De nuevo, la idea de que las dos partículas microscópicas idénticas sean indistinguibles hace natural aceptar que

$$|\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, t)|^2 = |\Psi(r_2\sigma_2, r_1\sigma_1, t)|^2 \quad [15.2.6]$$

Pues bien, es obvio que [15.2.6] se verifica como consecuencia de ambas ecuaciones [15.2.1] para cualquier $\alpha = \pm 1$, lo cual muestra la consistencia interna de este planteamiento.

El signo de α es genuinamente característico del tipo de partículas. Es un hecho que para una especie determinada de partículas idénticas (por ejemplo, sistemas de electrones o de protones) la posibilidad $\alpha = -1$, es decir

$$\Psi(r_2\sigma_2, r_1\sigma_1, t) = -\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, t) \quad [15.2.7]$$

se da en todos los casos, pero nunca $\alpha = +1$. Las partículas de esta clase reciben el nombre de fermiones, y se dice que obedecen a la estadística cuántica de Fermi-Dirac o antisimétrica. Ejemplos de ellas son parejas de electrones o de protones o de neutrones.

Recíprocamente, para otras clases de partículas idénticas, $\alpha = +1$ se verifica siempre, esto es

$$\Psi(r_2\sigma_2, r_1\sigma_1, t) = \Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, t) \quad [15.2.8]$$

estando $\alpha = -1$ prohibida absolutamente. Las partículas de este tipo se denominan bosones, y se dice que satisfacen la estadística cuántica de Bose-Einstein o simétrica.

Un ejemplo de ella lo constituye un sistema de dos átomos de helio 4 (cada átomo se considera ahora como una partícula). Los ejemplos quizá más interesantes de sistemas de bosones los proporcionan los fotones. La presentación de tales ejemplos se hará posteriormente en este capítulo: ello requerirá una introducción previa a la Mecánica Cuántica de un fotón.

15.3. EJEMPLO: DOS PARTÍCULAS MICROSCÓPICAS LIBRES

Construyamos, a continuación, funciones de onda explícitas para sistemas de dos fermiones y dos bosones con masa m , en el caso en que esas partículas están libres. Entonces,

su ecuación de ondas es [7.12.9-10] con $V = 0$. Una solución tipo onda plana es, de acuerdo con [7.12.12-13]:

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, t) = \exp \frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_1\mathbf{r}_1 + \mathbf{p}_2\mathbf{r}_2 - Et)\kappa(\sigma_1)\kappa(\sigma_2) \quad , \quad E = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} \quad [15.3.1]$$

$\kappa(\sigma_1)$ y $\kappa(\sigma_2)$ son las funciones de onda de espín. Si las partículas tienen espín nulo, σ_1 y σ_2 son nulas: estos símbolos, así como $\kappa(\sigma_1)$ y $\kappa(\sigma_2)$, desaparecen entonces de [15.3.1]. Si aquéllas tienen espín $1/2$, entonces $\sigma_1, \sigma_2 = \pm 1/2$ y las κ son las dadas en el capítulo 13. A fin de conectar con los convenios utilizados allí, nótese que para una partícula de espín $1/2$ con $\sigma = +1/2$, entonces

$$\exp \frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)\kappa(+1/2) = \begin{pmatrix} \exp \frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\mathbf{r} - Et) \\ 0 \end{pmatrix}$$

es la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ con dos componentes (en este caso, no normalizable).

Supondremos que $\mathbf{p}_1 \neq \mathbf{p}_2$, en general. ¿Verifica [15.3.1] las condiciones [15.2.1]? Nótese que

$$\Psi_0(\mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1, t) = \exp \frac{i}{\hbar} [\mathbf{p}_1\mathbf{r}_2 + \mathbf{p}_2\mathbf{r}_1 - Et]\kappa(\sigma_2)\kappa(\sigma_1) \quad [15.3.2]$$

de acuerdo con el criterio notacional explicado al comienzo de la sección 15.2. Pues bien, es inmediato comprobar que ninguna de las ecuaciones [15.2.1], para ningún valor de $\alpha (= \pm 1)$, es satisfecha por [15.3.1] o [15.3.2]. Más aún, estas últimas tampoco verifican [15.2.6].

Afortunadamente, es fácil construir nuevas funciones de onda, a partir de [15.3.1-2], que sí satisfacen aquellos requisitos. En efecto:

$$\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, t) = \Psi_0(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, t) - \Psi_0(\mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1, t) \quad [15.3.3]$$

verifica ambas condiciones [15.2.1] con $\alpha = -1$ (así como [15.2.6], aunque esto último es menos relevante, pues [15.3.3] no es normalizable). Es, pues, una función de onda para dos fermiones. La función de onda de espín para dos electrones (omitiendo la parte espacial, es decir, las ondas planas en [15.3.3]) se dio en la sección 13.5.

Por otra parte,

$$\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, t) = \Psi_0(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, t) + \Psi_0(\mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1, t) \quad [15.3.4]$$

cumple ambas condiciones [15.2.1] con $\alpha = 1$, y también [15.2.6]. Es, por tanto, una función de onda para dos bosones.

Para una discusión complementaria, véase el capítulo 22.

15.4. $N(>2)$ PARTÍCULAS MICROSCÓPICAS IDÉNTICAS (I): FUNCIÓN DE ONDA

Cuando $N(>2)$ partículas microscópicas idénticas están en una región donde los paquetes asociados a aquéllas pueden solaparse, son también indistinguibles. Este hecho ha de reflejarse en la función de onda global, así como en la interpretación probabilística. Procederemos a presentar la generalización de [15.2.6-8] para $N(>2)$ partículas microscópicas idénticas, en general sometidas a interacción. Análogamente al caso de dos partículas, en la función de onda de N partículas microscópicas idénticas $\Psi(\cdot^1, \cdot^2, \dots, \cdot^N, t)$, el primer hueco (antes de la primera coma) se reserva para el vector posición y la proyección del espín de la partícula 1, ... el N -ésimo hueco (entre la coma $(N-1)$ -ésima y la N -ésima) se deja para el vector posición y la proyección de espín de la partícula N -ésima. Así, si la partícula 1 está en r_1 con proyección de espín σ_1 , etc., la función de onda en el instante t es $\Psi(r_1\sigma_1, \dots, r_N\sigma_N, t)$.

Sea (i_1, \dots, i_N) una permutación cualquiera de $(1, \dots, N)$, es decir, una ordenación cualquiera de N elementos. Por ejemplo, si $N = 2$, las permutaciones de 1, 2 son (1, 2) y (2, 1). Análogamente, si $N = 3$, las permutaciones de 1, 2, 3 son (1, 2, 3), (2, 3, 1), (1, 3, 2), (2, 1, 3), (3, 1, 2) y (3, 2, 1). En general, el número total de permutaciones distintas de $1, \dots, N$ es $N!$ Consideremos una permutación cualquiera (i_1, \dots, i_N) y, en ella, intercambiemos dos elementos entre sí, dejando los $N-2$ restantes en las posiciones que tenían: se dice, entonces, que la nueva permutación resultante se ha obtenido efectuando una transposición a partir de (i_1, \dots, i_N) . Así, si $N = 3$, (3, 1, 2), se obtiene a partir de (2, 1, 3) transponiendo 3 con 2. En general, se puede obtener cualquier permutación (i_1, \dots, i_N) a partir de $(1, \dots, N)$ mediante, al menos, una serie de n transposiciones sucesivas. Más aún, puede haber varias series distintas de transposiciones sucesivas con esa propiedad, es decir, todas llevan de $(1, \dots, N)$ a (i_1, \dots, i_N) , y, así, el número de transposiciones necesarias en unas y otras series difiere. Una importante propiedad general es: las paridades de los números de transposiciones en todas las series distintas que llevan de $(1, \dots, N)$ a (i_1, \dots, i_N) son siempre las mismas. Es decir, todos esos números son siempre pares o impares. Esa paridad (par o impar) se conoce como la paridad de la permutación (i_1, \dots, i_N) [respecto de $(1, \dots, N)$], y es claramente una característica genuina de ella: se la designará con el símbolo δ . Así, se puede pasar de (1, 2, 3) a (3, 2, 1) mediante, al menos, las dos series de transposiciones que se indican:

- a) (1, 2, 3) \rightarrow (3, 2, 1)
- b) (1, 2, 3) \rightarrow (1, 3, 2) \rightarrow (3, 1, 2) \rightarrow (3, 2, 1)

Por tanto, el número de transposiciones es impar en ambos casos y la paridad de (3, 2, 1) es impar.

Parece natural que el carácter bosónico ($\alpha = +1$) o fermiónico ($\alpha = -1$), que caracteriza el comportamiento de dos partículas microscópicas idénticas, determine también el de un sistema de más de dos, es decir, las propiedades de su función de onda. Sea $\Psi(r_{i_1}\sigma_{i_1}, \dots, r_{i_N}\sigma_{i_N}, t)$ la función de onda cuando la partícula 1 está en r_{i_1} , con proyección

de espín σ_{i_1}, \dots y la N -ésima está en \mathbf{r}_{i_N} con proyección de espín σ_{i_N} , en el instante t . Pues bien, aceptaremos que si las N partículas idénticas son bosones, entonces

$$\Psi(\mathbf{r}_{i_1}\sigma_{i_1}, \dots, \mathbf{r}_{i_N}\sigma_{i_N}, t) = \Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t) \quad [15.4.1]$$

para cualquier permutación (i_1, \dots, i_N) .

También postularemos que si las N partículas idénticas son fermiones, entonces

$$\Psi(\mathbf{r}_{i_1}\sigma_{i_1}, \dots, \mathbf{r}_{i_N}\sigma_{i_N}, t) = (-1)^\delta \Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t) \quad [15.4.2]$$

Como δ es la paridad de la permutación (i_1, \dots, i_N) respecto a la permutación $(1, \dots, N)$, se tiene que

$$(-1)^\delta = \begin{cases} +1, & \delta \text{ par} \\ -1, & \delta \text{ impar} \end{cases} \quad [15.4.3]$$

Supondremos que la función de onda está normalizada, es decir

$$\sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \int d^3\mathbf{r}_1, \dots, d^3\mathbf{r}_N |\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t)|^2 = 1 \quad [15.4.4]$$

que constituye la generalización de [15.2.3].

En ambos casos de bosones y fermiones se verifica la generalización de [15.2.6]. Esto es, en el instante t , la probabilidad de encontrar la partícula 1 en $d^3\mathbf{r}_1$ en torno a \mathbf{r}_{i_1} con proyección de espín σ_{i_1}, \dots la N en $d^3\mathbf{r}_N$ en torno a \mathbf{r}_{i_N} con proyección de espín σ_{i_N} iguala a la de encontrar la 1 en $d^3\mathbf{r}_1$ en torno a \mathbf{r}_1 con σ_1, \dots la N en $d^3\mathbf{r}_N$ en torno a \mathbf{r}_N con σ_N :

$$|\Psi(\mathbf{r}_{i_1}\sigma_{i_1}, \mathbf{r}_{i_N}\sigma_{i_N}, t)|^2 = |\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t)|^2 \quad [15.4.5]$$

En efecto, es inmediato comprobar que [15.4.1] y [15.4.2] satisfacen [15.4.5].

15.5. $N(> 2)$ PARTÍCULAS MICROSCÓPICAS IDÉNTICAS (II): ALGUNAS PROPIEDADES GENERALES

a) Sea $\Psi_0(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t)$ una función de onda para las N partículas idénticas en interacción que *no* cumple ni [15.4.1] ni [15.4.2], pero que es normalizable

$$\sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \int d^3\mathbf{r}_1, \dots, d^3\mathbf{r}_N |\Psi_0(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t)|^2 < +\infty$$

A partir de ella, y generalizando el procedimiento de la sección 15.3, es posible construir otras nuevas que sí verifican esas condiciones en cada caso.

Así, si las partículas son bosones, consideremos

$$\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t) = \sum_{i_1, \dots, i_N} \Psi_0(\mathbf{r}_{i_1}\sigma_{i_1}, \dots, \mathbf{r}_{i_N}\sigma_{i_N}, t) \quad [15.5.1]$$

donde \sum_{i_1, \dots, i_N} designa una suma sobre las $N!$ permutaciones de $(1, \dots, N)$. Es inmediato verificar que [15.5.1] satisface [15.4.1] y [15.4.5].

Si las partículas son fermiones, construimos

$$\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t) = \sum_{i_1, \dots, i_N} (-1)^\delta \Psi_0(\mathbf{r}_{i_1}\sigma_{i_1}, \dots, \mathbf{r}_{i_N}\sigma_{i_N}, t) \quad [15.5.2]$$

donde δ es la paridad de la permutación (i_1, \dots, i_N) respecto de $(1, \dots, N)$. Es también fácil probar que [15.5.2] satisface [15.4.2] y [15.4.5].

Puede justificarse también (aunque no lo haremos aquí) que [15.5.1] y [15.5.2] son también normalizables. Las operaciones que, efectuadas en los lados derechos de [15.5.1] y [15.5.2] sobre $\Psi_0(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t)$ generan las funciones de onda físicamente aceptables dadas en los lados izquierdos se denominan simetrización y antisimetrización, respectivamente.

- b) Supongamos que Ψ está normalizada, es decir, [15.4.4]. La probabilidad de encontrar, en t , al menos dos fermiones en el mismo punto del espacio con las mismas proyecciones de espín es nula. En efecto, sean 1 y 2 esos fermiones, hagamos $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$, $\sigma_1 = \sigma_2$, y consideremos la permutación que se reduce a una simple transposición de 1 y 2, con lo que $(-1)^\delta = -1$. Entonces, [15.4.2] implica

$$\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_3\sigma_3, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t) = -\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_3\sigma_3, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t) \quad [15.5.3]$$

y, por tanto

$$\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_3\sigma_3, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t) = 0 \quad [15.5.4]$$

Este importante resultado se conoce como principio de exclusión.

- c) Dado un conjunto de partículas microscópicas idénticas, en interacción en general. ¿Cómo puede saberse si se trata de fermiones o bosones? Afortunadamente, dicho criterio existe con completa generalidad, y se conoce como «conexión espín-estadística». El espín resulta ser el dato clave para resolver la cuestión planteada. La conexión espín-estadística es el conjunto de las dos propiedades siguientes:
1. Si las partículas poseen espín semientero $(1/2, 3/2, \dots)$, son necesariamente fermiones, es decir, su función de onda satisface [15.4.2].
 2. Si las partículas poseen espín entero $(0, 1, 2, \dots)$, son bosones, y su función de onda verifica [15.4.1].

En el nivel en el que estamos, aceptaremos la validez de las dos propiedades fundamentales 1 y 2 y no nos preocuparemos de su justificación más teórica, que existe y es conocida, pero requiere recursos de nivel superior al de este libro. Las propiedades 1 y 2 están completamente de acuerdo con todos los resultados experimentales conocidos. En particular, la sección 39.5 ofrecerá nuevos ejemplos de la conexión espín-estadística.

Es interesante formular los análogos de [15.2.7-8] y [15.4.1-2] para las funciones de onda en el espacio de momentos. En el ejercicio 15.1 presentamos lo correspondiente al sistema de fermiones, así como la forma que, entonces, adquiere el principio de exclusión. El caso bosónico se verá en la sección 15.8, en relación con sistemas de varios fotones. Nos limitaremos a mencionar que los bosones manifiestan una tendencia a la «proximidad» entre sí, que es opuesta a la que, según el principio de exclusión, experimentan los fermiones. Esto se ilustra, mediante un ejemplo sencillo, en los ejercicios 15.2 y 15.3. En forma intuitiva, puede decirse que los fermiones tienen una tendencia a no estar en el mismo estado, ya sea en el espacio ordinario [15.5.4] o en el de momentos (ejercicio 15.1). Los bosones manifiestan, en general, la tendencia contraria, es decir, tienden a «concentrarse» en el mismo estado.

Para un estudio más riguroso de las partículas microscópicas idénticas, remitiremos al lector a otras referencias¹.

15.6. $N > 2$ FERMIONES EN POTENCIAL EXTERIOR

Supongamos N fermiones que no interaccionan entre sí: cada uno puede estar libre o sometido a un potencial exterior. Así, sea $\Psi_a(\mathbf{r}, t)$ una función de onda para una de esas partículas, con un conjunto de números cuánticos que designaremos colectivamente por a . En particular, a puede incluir la proyección del espín que, por conveniencia notacional y sin riesgo de confusión, ya *no* aparece dentro del paréntesis. En general, supondremos que (compárese con la sección 13.4)

$$\int d^3\mathbf{r} \Psi_a^+(\mathbf{r}, t) \Psi_a(\mathbf{r}, t) = 1 \quad [15.6.1]$$

$$\int d^3\mathbf{r} \Psi_a^+(\mathbf{r}, t) \Psi_{a'}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad a \neq a' \quad [15.6.2]$$

[15.6.1] indica que si los fermiones están libres, han de estar representados por paquetes del tipo [6.3.3]. [15.6.2] muestra que dos funciones de onda para una partícula en las que, al menos, un número cuántico es distinto, son ortogonales (recuérdese [7.10.6]).

El análogo de la función Ψ_0 considerada en el apartado a) de la sección 15.5 es el producto:

$$\Psi_{a_1}(\mathbf{r}_1, t) \cdots \Psi_{a_N}(\mathbf{r}_N, t) \quad [15.6.3]$$

¹ A. Galindo y P. Pascual, *Mecánica Cuántica*, vol. 2, Eudema Universidad, Madrid, 1989.

La función de onda física de los N fermiones está dada en términos de [15.6.3] por el análogo de [15.5.2], el cual puede reescribirse inmediatamente como un determinante. Incluyendo un factor global $(N!)^{-1/2}$, cuya conveniencia veremos en seguida, la función de onda de los N fermiones es:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_1, t) & \dots & \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_N, t) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \Psi_{a_N}(\mathbf{r}_1, t) & \dots & \Psi_{a_N}(\mathbf{r}_N, t) \end{vmatrix} \quad [15.6.4]$$

que recibe el nombre de determinante de Slater. Para que $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \neq 0$, es preciso que todos los conjuntos a_1, \dots, a_N sean distintos entre sí: en caso contrario, habría, al menos, dos filas iguales en el determinante [15.6.4], y ése sería idénticamente nulo. Éste es, de nuevo, el principio de exclusión.

El factor $(N!)^{-1/2}$ en [15.6.4] garantiza que Ψ está normalizada, es decir:

$$\int d^3r_1, \dots, d^3r_N \Psi^+(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = 1 \quad [15.6.5]$$

La justificación de [15.6.4] y de [15.6.5] para $N = 2$ constituye el ejercicio 15.4. Nótese que [15.6.5] es equivalente a [15.4.4].

15.7. INTRODUCCIÓN A LA MECÁNICA CUÁNTICA DE UN FOTÓN

Recopilemos la información que necesitaremos acerca de un fotón, que ha sido ya presentada en el capítulo 2 (en particular, en la sección 2.4). Así, un fotón libre es un corpúsculo de radiación electromagnética, con masa nula², que se propaga siempre a la velocidad de la luz. Si lleva momento \mathbf{q} y energía E , éstos verifican

$$E = c|\mathbf{q}| \quad [15.7.1]$$

El fotón lleva asociada, debido a sus aspectos corpusculares, una función de onda. Parece natural que ésta sea un vector. Las razones son:

- i) Debe estar íntimamente relacionada con las ondas electromagnéticas (de forma particularmente marcada, en el régimen de altas frecuencias y bajas longitudes de ondas), las cuales están descritas por *vectores* \mathbf{E} , \mathbf{B} .

² Un límite superior para la masa m del fotón, obtenido experimentalmente, es: $m_\gamma \leq 1.8 \times 10^{-51}$ gramos [véase K. A. Olive et al., Particle Data Group, *Chinese Physics*, C38, 09001 (2014)].

- ii) \mathbf{E} y \mathbf{B} no son independientes en cada punto y en cada instante, sino que están relacionados entre sí mediante las ecuaciones de Maxwell, así que un único vector (y no dos) como función de onda del fotón debe ser suficiente.

Formularemos la Mecánica Cuántica de un fotón individual³ (es decir, sus correspondientes ecuación de ondas e interpretación probabilística) directamente en el espacio de momentos. Ello es debido a ciertas dificultades que una formulación en el espacio tridimensional ordinario plantea, y que discutiremos al final de esta sección.

Recordaremos la Mecánica Cuántica de una partícula microscópica de masa m , no-relativista y libre en el espacio de momentos presentada en la sección 7.6 y en la cuestión complementaria 7.5. Basándonos en ella, y mediante una analogía directa, es natural formular la correspondiente a un fotón en el espacio de momentos. Sea

$$\tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{q}, t) = \begin{pmatrix} \tilde{f}_x \\ \tilde{f}_y \\ \tilde{f}_z \end{pmatrix} \quad [15.7.2]$$

la función de onda de un fotón libre en el espacio de momentos en el instante t . Supongamos que

$$\int |\tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{q}, t)|^2 d^3\mathbf{q} = 1 \quad [15.7.3]$$

donde la integral se extiende a todo el espacio de momentos del fotón, y

$$|\tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{q}, t)|^2 = \tilde{f}_x^* \tilde{f}_x + \tilde{f}_y^* \tilde{f}_y + \tilde{f}_z^* \tilde{f}_z \quad [15.7.4]$$

Interpretaremos

$$|\tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{q}, t)|^2 d^3\mathbf{q} \quad [15.7.5]$$

como la probabilidad de que el fotón tenga, en t , su momento en un intervalo $d^3\mathbf{q}$ en torno a \mathbf{q} , y así, el valor medio del momento del fotón es

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3\mathbf{q} \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{q}, t) \mathbf{q} \quad [15.7.6]$$

³ La evolución del fotón será considerada respecto a un referencial inercial. Véase la nota a pie de página en la sección 6.2.

Claramente, [15.7.3] y [15.7.6] son análogos a [7.6.3] y [7.6.4], respectivamente. Aceptaremos que la evolución de la función de onda de un fotón está dada por:

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = c|\mathbf{q}|\tilde{f}(\mathbf{q}, t) \quad [15.7.7]$$

Su solución es, claramente,

$$\tilde{f}(\mathbf{q}, t) = \tilde{f}(\mathbf{q}, t_0) \exp\left[-i \frac{c|\mathbf{q}|}{\hbar} (t - t_0)\right] \quad [15.7.8]$$

siendo $\tilde{f}(\mathbf{q}, t_0)$ la función de onda del fotón en cierto instante inicial t_0 . La justificación de [15.7.7] es muy natural. En efecto, [15.7.7] puede considerarse como la ecuación de Schrödinger del fotón en espacio de momentos. La analogía entre [15.7.7], por un lado, y expresiones análogas para una partícula no relativista en la cuestión 7.5, por otro, es muy estricta. Además, [15.7.7] tiene la estructura de [7.5.9], cuando H se interpreta como la energía en el espacio de momentos, dada en [15.7.1].

En el caso del fotón, hay peculiaridades específicas, asociadas al carácter vectorial de su función de onda y a que ésta debe reflejar las propiedades de las ondas electromagnéticas, como veremos. Recordando consideraciones previas sobre el momento angular de la radiación electromagnética (sección 2.5), así como los resultados generales relativos al momento angular (capítulo 11), el hecho de que f posea tres componentes indica que el fotón ha de tener un espín o momento angular intrínseco igual a 1. De esta forma, el número de posibles valores de la proyección del espín sobre un eje (es decir, 3) concuerda con el número de componentes de \tilde{f} . Recuérdese que el conjunto de las tres matrices 2×2 de Pauli permitió construir el operador de espín para electrones, protones, etc. (capítulo 13). Análogamente, es posible proponer un conjunto de tres matrices 3×3 (s_x, s_y, s_z) = \mathbf{s} , que corresponden a un espín igual a 1 y constituyen las variables dinámicas mecano-cuánticas de espín para el fotón. Son las siguientes:

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad [15.7.9]$$

Sus propiedades se presentan en el ejercicio 15.5. En el caso del fotón, es útil proyectar el espín sobre un vector unitario en la dirección y sentido del momento $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z)$. Sean $\chi(\mathbf{q}\sigma)$ las correspondientes autofunciones normalizadas:

$$\frac{s\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \chi(\mathbf{q}\sigma) = \sigma\chi(\mathbf{q}\sigma) \quad , \quad s\mathbf{q} = s_x q_x + s_y q_y + s_z q_z \quad [15.7.10]$$

$$\chi(\mathbf{q}\sigma) = \begin{pmatrix} \chi_x(\mathbf{q}\sigma) \\ \chi_y(\mathbf{q}\sigma) \\ \chi_z(\mathbf{q}\sigma) \end{pmatrix}, \quad |\chi_x(\mathbf{q}\sigma)|^2 + |\chi_y(\mathbf{q}\sigma)|^2 + |\chi_z(\mathbf{q}\sigma)|^2 = 1 \quad [15.7.11]$$

con $\sigma = 0, \pm 1$. La variable dinámica $s\mathbf{q}/|q|$ y su autovalor σ reciben el nombre de helicidad del fotón. La forma explícita de $\chi(\mathbf{q}\sigma)$ se da en el ejercicio 15.6.

Además, \tilde{f} ha de satisfacer la siguiente condición

$$\mathbf{q}\tilde{f}(\mathbf{q}, t) = q_x\tilde{f}_x + q_y\tilde{f}_y + q_z\tilde{f}_z = 0 \quad [15.7.12]$$

Con objeto de justificar [15.7.12], recuérdese que los campos eléctrico \mathbf{E} y magnético \mathbf{B} , asociados a las ondas electromagnéticas en ausencia de cargas eléctricas, han de tener divergencia nula: esta condición para el campo eléctrico es precisamente [1.5.9]. Es también natural que \tilde{f} satisfaga requisitos similares a los campos \mathbf{E} , \mathbf{B} . Pues bien, dicha condición para \tilde{f} , expresada directamente en el espacio de momentos, es precisamente [15.7.12].

La restricción [15.7.12] tiene una consecuencia física muy importante. La helicidad del fotón solamente puede tener dos valores: $\sigma = \pm 1$ y no tres, pues la posibilidad $\sigma = 0$ está prohibida (véase la figura 15.3). La justificación de esto se da en el ejercicio 15.7. Por tanto:

$$\tilde{f}(\mathbf{q}, t) = [\tilde{\phi}_{+1}(\mathbf{q})\chi(\mathbf{q}+1) + \tilde{\phi}_{-1}(\mathbf{q})\chi(\mathbf{q}-1)] \exp\left(-\frac{i}{\hbar}c|\mathbf{q}|t\right) \quad [15.7.13]$$

satisface [15.7.7] y [15.7.11]. $\tilde{\phi}_{\pm 1}(\mathbf{q})$ son funciones complejas arbitrarias de \mathbf{q} (¡no son vectores!), tales que [15.7.3] también se verifica. [15.7.13], que puede compararse con [15.7.8], es la forma general de la función de onda del fotón. Es posible (y útil) interpretar

$$\tilde{\phi}_{\sigma}(\mathbf{q}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}c|\mathbf{q}|t\right), \quad \sigma = \pm 1 \quad [15.7.14]$$

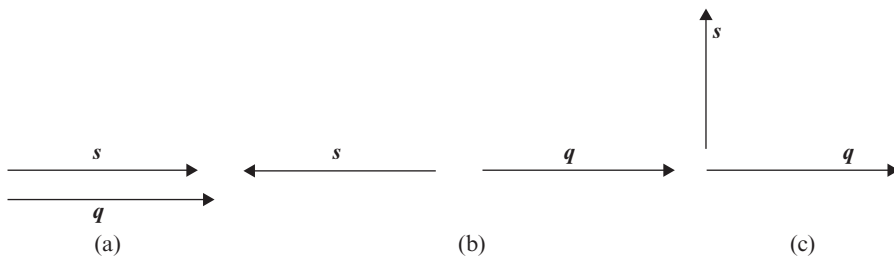


Figura 15.3. Representación gráfica de las posibles proyecciones del espín (como si fuese una variable clásica y no cuántica, lo que es realmente) sobre \mathbf{q} . (a) y (b) corresponden a helicidad $\sigma = +1$ y $\sigma = -1$, respectivamente, que son las situaciones físicas posibles. (c) correspondería a $\sigma = 0$.

como la función de onda del fotón con momento \mathbf{q} y helicidad σ , en el instante t , puesto que [15.7.3] puede reescribirse como

$$\int d^3\mathbf{q}[|\tilde{\phi}_{+1}(\mathbf{q})|^2 + |\tilde{\phi}_{-1}(\mathbf{q})|^2] = 1 \quad [15.7.15]$$

Es posible ofrecer justificaciones más formalizadas de [15.7.7], [15.7.12] y de la interpretación probabilística de $\tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{q}, t)$, pero creemos que caen fuera del nivel de este libro. El lector interesado en ellas puede consultar otras fuentes^{4,5,6}.

No parece posible formular una interpretación probabilística *estricta* para fotones en el espacio de posiciones ordinario. Así, sea $\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)$ la transformada de Fourier de $\tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{p}, t)$:

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^{3/2}\hbar^{3/2}} \exp i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar} \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{p}, t) \quad [15.7.16]$$

con lo cual

$$\int d^3\mathbf{r}|\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)|^2 = 1 \quad [15.7.17]$$

según puede justificarse siguiendo la pauta del ejercicio 7.5. No parece físicamente aceptable interpretar

$$|\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} \quad [15.7.18]$$

como la probabilidad estricta de encontrar el fotón en un elemento infinitesimal de volumen $d^3\mathbf{r}$ en torno a \mathbf{r} , en t . Más aún, no parece posible encontrar ninguna otra función, $\tilde{\mathbf{f}}_1(\mathbf{r}, t)$, a partir de $\tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{p}, t)$, que permita una tal interpretación probabilística en sentido estricto. Supongamos que el fotón está representado por el paquete de ondas $\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)$ dado en [15.7.16], siendo $\tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{p}, t)$ no nula en un intervalo $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ en torno a $\mathbf{p}_0 = (p_{0x}, p_{0y}, p_{0z})$ con $|p_{0x}| \gg \Delta p_x$, etc. Lo que no parece permisible es dar una interpretación probabilística que implique localizar el fotón en regiones de tamaño muy inferior a $\hbar/|\mathbf{p}_0| \equiv \lambda_0$, es decir, a la longitud de onda media. Pese a eso, sí es posible considerar localizaciones parciales de un fotón en regiones espaciales de tamaño mayor que λ_0 . Así, podemos decir en un sentido cualitativo o semicuantitativo que el fotón está localizado en una región de dimensión d , a condición de que $d > \lambda_0$. De esta forma, el análisis anterior es compatible con la

⁴ A. I. Akhiezer y V. B. Berestetskii, *Quantum Electrodynamics*, Interscience Publishers, Nueva York, 1965.

⁵ S. S. Schweber, *An Introduction to Quantum Field Theory*, Harper and Row, Nueva York, 1964.

⁶ F. J. Ynduráin. *Mecánica Cuántica Relativista*, Alianza Universidad Textos, Madrid, 1990.

interpretación de Einstein del contenido fotónico de una onda electromagnética discutido en la sección 3.

Supongamos que el paquete asociado al fotón es tal que $p_{0y} = p_{0z} = 0$, es decir, el centro de aquél se propaga según el eje x . La longitud de coherencia, L_c , según el eje x se define como

$$L_c = \frac{\lambda_0^2}{\Delta\lambda_x}, \quad \text{donde} \quad \Delta\lambda_x = \frac{h\Delta p_x}{p_{0x}^2}$$

puede considerarse como una incertidumbre en la longitud de onda de de Broglie. Físicamente, la longitud de coherencia describe la longitud o tamaño Δx del paquete asociado al fotón según el eje x en un instante dado. En efecto, $L_c = h/\Delta p_x \sim \Delta x$. Nótese que $L_c = \lambda_0(\lambda_0/\Delta\lambda_x) \gg \lambda_0$ (pues $\Delta\lambda_x \ll \lambda_0$), lo cual es consistente con la discusión precedente.

Explicaciones detalladas de las razones que parecen hacer imposible la interpretación probabilística estricta para el fotón en el espacio de posiciones, que exceden el nivel de este libro, pueden encontrarse en las tres referencias previamente citadas en esta sección [acerca de la interpretación probabilística de $\tilde{f}(\mathbf{q}, t)$].

15.8. SISTEMAS CON $N \geq 2$ FOTONES

Consideremos un sistema con $N(\geq 2)$ fotones libres. Dado que éstos tienen espín 1, en virtud de la conexión espín-estadística dicho sistema ha de tratarse como uno *bosónico*; por tanto, las funciones de onda han de ser simétricas. Las construiremos directamente en espacio de momentos. Recordando [15.7.13], y comparando con el ejercicio 15.1, consideremos el producto:

$$\tilde{\phi}_{\sigma_1}(\mathbf{q}_1) \exp\left(\frac{-ic|\mathbf{q}_1|t}{\hbar}\right) \cdots \tilde{\phi}_{\sigma_N}(\mathbf{q}_N) \exp\left(\frac{-ic|\mathbf{q}_N|t}{\hbar}\right) \equiv \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{q}_N\sigma_N, t) \quad [15.8.1]$$

donde cada $\tilde{\phi}_{\sigma_i}(\mathbf{q}_i)$ $i = 1, \dots, N$ satisface [15.7.15]. $\tilde{\phi}_0$ no está simetrizada y, así, desempeña el papel de Ψ_0 en el apartado *a*) de la sección 15.5. Pues bien, la función de onda físicamente aceptable para los N fotones libres es (compárese con [15.5.1])

$$\tilde{\phi}(\mathbf{q}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{q}_N\sigma_N, t) = \sum_{i_1, \dots, i_N} \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}_{i_1}\sigma_{i_1}, \dots, \mathbf{q}_{i_N}\sigma_{i_N}, t) \quad [15.8.2]$$

es decir, se suma sobre todas las permutaciones (i_1, \dots, i_N) de $(1, \dots, N)$. En efecto, es fácil ver que [15.8.2] es simétrica bajo cualquier permutación (i_1, \dots, i_N) de $(1, \dots, N)$:

$$\tilde{\phi}(\mathbf{q}_{i_1}\sigma_{i_1}, \dots, \mathbf{q}_{i_N}\sigma_{i_N}, t) = \tilde{\phi}(\mathbf{q}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{q}_N\sigma_N, t) \quad [15.8.3]$$

$\tilde{\phi}$ puede normalizarse generalizando directamente el método de la sección 6.8 al espacio de momentos.

Estas ideas serán básicas para estudiar un gas de fotones en equilibrio termodinámico dentro de una cavidad en el capítulo 17 y, así, obtener de otra forma la ley de Planck para el cuerpo negro.

EJERCICIOS

15.1. Sea $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{q}_N\sigma_N, t) = \tilde{\Psi}$ la función de onda de N fermiones en interacción cuando (de acuerdo con los convenios expuestos en las secciones 15.2 y 15.4) el fermión 1 tiene momento \mathbf{q}_1 y proyección de espín σ_1, \dots , y el N -ésimo tiene momento \mathbf{q}_N y proyección de espín σ_N en el instante t . Hallar los análogos para Ψ de [15.4.2] y del principio de exclusión [15.5.4].

15.2. Sean dos entidades microscópicas idénticas representadas por las siguientes funciones de onda, con dependencias angulares únicamente:

$$\Phi_1(\phi_1) = \frac{\exp im_1\phi_1}{(2\pi)^{1/2}}, \quad \Phi_2(\phi_2) = \frac{\exp im_2\phi_2}{(2\pi)^{1/2}}$$

siendo $0 \leq \phi_1, \phi_2 < 2\pi$. Los números cuánticos (de momento angular) m_1, m_2 son enteros, tales que $m_1 \neq m_2$. Considérese el sistema formado por ambas entidades y supónganse las tres posibles funciones de onda correspondientes a los casos siguientes:

1. Producto no simetrizado de Φ_1 y Φ_2 [$\Phi_0(\phi_1, \phi_2)$].
2. Fermiones [$\Phi_F(\phi_1, \phi_2)$].
3. Bosones [$\Phi_B(\phi_1, \phi_2)$].

Normalizar dichas funciones de onda y hallar las densidades de probabilidad de que ambas entidades estén en la configuración $\phi_1 = \phi_2$. ¿En qué casos son máxima y mínima esas densidades de probabilidad?

15.3. Considérese la misma situación que en el ejercicio 15.2 y supóngase $m_1 - m_2 = 2$. Se trata de caracterizar, de algún modo, la separación angular «media» entre ambas entidades microscópicas en los tres casos (1, 2 y 3). Con tal fin, evalúese el valor medio de $(\phi_1 - \phi_2)^2$ (aunque no es una variable angular periódica). ¿En qué caso es mayor o menor la separación angular media? Realícese un análisis similar para $[\sin(\phi_1 - \phi_2)]^2$ (que sí es una variable angular periódica).

15.4. Justificar [15.6.4] y [15.6.5] para $N = 2$.

15.5. Demostrar que las matrices dadas en [15.7.9] corresponden a un momento angular igual a la unidad.

15.6. Hallar los vectores $\chi(q\sigma)$ que verifican [15.7.10-11].

15.7. Basándose en la solución del ejercicio 15.6, demostrar que la helicidad σ del fotón ha de ser ± 1 , estando prohibida la posibilidad $\sigma = 0$. Justificar [15.7.15] a partir de [15.7.3] y [15.7.13].

16

Introducción a la Mecánica Estadística Cuántica

Ramón F. Álvarez-Estrada

16.1. ASPECTOS GENERALES

Consideremos un sistema macroscópico aislado que ocupa un volumen V en equilibrio termodinámico a temperatura absoluta T . Despreciaremos en él su interacción gravitatoria (en general, es muy pequeña) y lo supondremos con carga eléctrica *total* nula, para que todo el estudio resulte consistente. Sean E_T y S_T su energía y su entropía totales. El subíndice T en estas y en otras magnitudes indicará «total» y no debería ser confundido con el símbolo utilizado para la temperatura. Generalmente, el sistema será un gas, y P denotará la presión en él. De acuerdo con la Termodinámica, hay dos variables independientes, entre las mencionadas arriba, que caracterizan el estado de equilibrio termodinámico del sistema. Existen, entonces, relaciones (denominadas ecuaciones de estado) entre las dos variables independientes y cada una de las demás variables. Es suficiente conocer, en general, una ecuación de estado para determinar todas las demás variables. Supongamos que la ecuación de estado que se conoce da la entropía en función de T y V , es decir:

$$S_T = S_T(E_T, V) \quad [16.1.1]$$

Según la Termodinámica:

$$P = T \left(\frac{\partial S_T}{\partial V} \right)_{E_T}, \quad \frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S_T}{\partial E_T} \right)_V \quad [16.1.2]$$

Diferenciando [16.1.1], se obtiene

$$dS_T = \left(\frac{\partial S_T}{\partial E_T} \right)_V dE_T + \left(\frac{\partial S_T}{\partial V} \right)_{E_T} dV \quad [16.1.3]$$

y [16.1.3] se convierte, usando [16.1.2], en una ecuación que expresa conjuntamente los dos primeros principios de la Termodinámica, es decir:

$$dE_T = TdS_T - PdV \quad [16.1.4]$$

Algunos de los hechos importantes y generales que caracterizan la Mecánica Estadística (Clásica y Cuántica) son los siguientes:

1. Todos los sistemas materiales macroscópicos aislados considerados en ella contienen un número determinado N de constituyentes (moléculas y átomos) que es macroscópicamente grande. Típicamente, N puede ser del orden del número de Avogadro (6.023×10^{23}). Por esta razón, el comportamiento de los sistemas materiales considerados en Mecánica Estadística está regido por las leyes de los grandes números.
2. V es macroscópicamente grande.
3. El cociente N/V es finito. Más, matemáticamente, podemos imaginar que N y V tienden a infinito, de forma que su cociente N/V se aproxima a un valor constante, finito y no nulo.
4. E_T y S_T son muy grandes también, pero S_T/N , S_T/V , E_T/N y E_T/V tienden a valores constantes, finitos y no nulos.
5. T y P son independientes de N , V .

La ecuación de estado [16.1.1] para un sistema material macroscópico aislado también dependerá, en general, de N (aunque éste toma un valor fijo). De acuerdo con las características 1, 2, 3 y 4, y con la ecuación de estado [16.1.1], S_T/N es una función de N/V y de E_T/V , por ejemplo.

La discusión precedente, basada en la existencia de un número *fijo* (aunque muy grande) N de constituyentes, no se aplica *estrictamente* a casos como el de la radiación electromagnética en equilibrio termodinámico (aunque, entonces, también tiene sentido estudiar el número de fotones). En tal caso se requiere un análisis especial, que veremos más adelante. Véase también la sección 16.6.

En los diversos sistemas macroscópicos en equilibrio termodinámico, que son los únicos que analizaremos, la energía potencial de interacción entre los constituyentes puede ser despreciable o relevante. En todo caso, es muy importante señalar que las interacciones son, en general, esenciales para que un sistema, inicialmente fuera del equilibrio, lo alcance. En efecto, mediante ellas (en general, por medio de colisiones) la energía de los constituyentes se reparte de forma que puedan establecerse las distribuciones de equilibrio. Una vez alcanzado este último, la interacción puede, ciertamente, despreciarse en una serie de casos, de los que nos ocuparemos en detalle en las secciones 16.2-5. Sin embargo, hay sistemas en equilibrio en los que la interacción *no* puede omitirse: el tratamiento estadístico para ellos se esbozará en la sección 16.6.

En un sistema macroscópico en equilibrio termodinámico y sin interacción entre constituyentes, E_h , $h = 1 \dots$ será, genéricamente, un posible valor de la energía de una partícula o constituyente. Supondremos que, en general, ese constituyente puede estar en g_h estados físicamente distintos posibles, todos ellos con la misma energía E_h ; g_h se denominará factor de degeneración. Los constituyentes pueden tratarse como distinguibles (sección 16.2) o como indistinguibles. A su vez, estos últimos pueden ser fermiones (sección 16.3) o bosones (sección 16.4). En todos los casos (constituyentes distinguibles o indistinguibles) supondremos genéricamente una posible configuración del sistema. En ella habrá N_1 cons-

tituyentes con la misma energía E_1, \dots, N_h con la misma energía E_h , etc. Nótese que los N_1 constituyentes han de distribuirse entre los g_1 estados físicos distintos que tienen energía E_1, \dots , que los N_h han de repartirse entre los g_h estados posibles con energía E_h, \dots , etc. Supongamos que hay un número total fijo N de constituyentes materiales y que la energía total, E_T , del sistema está fijada. Entonces, la configuración N_1, N_2, \dots ha de verificar

$$\sum_h N_h = N \quad [16.1.5]$$

$$\sum_h E_h N_h = E_T \quad [16.1.6]$$

Sea W el número de configuraciones distintas y posibles, en todas las cuales hay N_1 constituyentes distribuidos en los g_1 estados de energía E_1, \dots, N_h en los g_h estados con energía E_h, \dots , etc. W se denomina probabilidad termodinámica (o peso estadístico). Obtendremos W para constituyentes distinguibles e indistinguibles (fermiones y bosones). Al variar la configuración N_1, \dots, N_h, \dots , es claro que W cambia. Nótese que no todas las N_1, \dots, N_h, \dots , pueden variar independientemente, puesto que se han de verificar las dos restricciones o ligaduras [16.1.5] y [16.1.6]. Estaremos interesados en hallar la configuración $N_{1, \text{máx}}, \dots, N_{h, \text{máx}}, \dots$, para la cual W es máxima, según se explicó en la sección 1.7. En el caso actual, se trata de encontrar dicho máximo bajo las restricciones [16.1.5] y [16.1.6]. Para ello, haremos uso del método de los multiplicadores de Lagrange, resumido en la cuestión complementaria 16.1: con objeto de utilizar notaciones ya habituales, denominaremos $-\alpha$ y $-\beta$ a los multiplicadores asociados, respectivamente, a las dos ligaduras [16.1.5] y [16.1.6]. Hay casos, como el de la radiación electromagnética, en donde el número de constituyentes (fotones) no puede considerarse como fijado de antemano. En tal caso, la primera restricción [16.1.5] no tiene sentido físico y, por tanto, tampoco lo tiene el multiplicador α . En la práctica, es como si $\alpha = 0$. Un análisis más cuidadoso se verá más adelante.

La Mecánica Estadística está, además, basada en la hipótesis de Boltzmann, ya discutida en la sección 1.7. Concretamente, tanto si los constituyentes son distinguibles como si son indistinguibles (fermiones y bosones), aceptaremos que la entropía total S_T del sistema macroscópico está dada por [1.7.2], que reescribiremos, por conveniencia, así

$$S_T = k_B \ln W_{\text{máx}} \quad [16.1.7]$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, ya discutida en la sección 1.5, y $W_{\text{máx}}$ es la probabilidad máxima, correspondiente a $N_{1, \text{máx}}, \dots$. Así pues, como S_T debe ser proporcional a N , encontramos otra característica fundamental de la Mecánica Estadística: la variación de $W_{\text{máx}}$ con N es exponencial. El multiplicador β está dado en términos de la temperatura absoluta T siempre así

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad [16.1.8]$$

Justificaremos [16.1.8] tanto si los constituyentes son distinguibles como indistinguibles (fermiones y bosones).

16.2. ESTADÍSTICA CLÁSICA DE BOLTZMANN CON DEGENERACIÓN: REVISIÓN DETALLADA

Comenzaremos tratando los constituyentes (átomos, moléculas...) del sistema macroscópico en equilibrio como distinguibles entre sí: esto da lugar a la estadística clásica de Boltzmann, que revisaremos en esta sección. Ello tendrá una considerable utilidad metodológica, pues marcará la pauta para el estudio de las estadísticas cuánticas en secciones posteriores. Para constituyentes distinguibles, la probabilidad termodinámica de la configuración N_1, \dots, N_h, \dots , es:

$$W = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_h! \dots} g_1^{N_1} g_2^{N_2} \dots g_h^{N_h} \dots \quad [16.2.1]$$

Analizaremos un ejemplo sencillo para ilustrar [16.2.1]: $N = 3$ partículas distinguibles, que designaremos por A, B, C . Supondremos que hay dos valores posibles de la energía E_1, E_2 con factores de degeneración $g_1 = 2, g_2 = 2$, y que representaremos por dos cajas, cada una con dos compartimentos. Las posibles configuraciones correspondientes a $N = 1, N_2 = 2$ se dan en la figura 16.1. En ella, en cada fila, se representa, a la izquierda, una posibilidad para el valor E_1 ; las correspondientes a E_2 se dan en la misma fila, a la derecha, y resultan ser 4. En total, pues, la configuración considerada puede ocurrir 24 veces.

Para el caso $N = 3, g_1 = 2, g_2 = 2, N_1 = 1, N_2 = 3$, la fórmula [16.2.1] da

$$W = \frac{3!}{1!2!} 2^1 2^2 = 24 \quad [16.2.2]$$

que coincide con el número de posibilidades representadas en la figura 16.1. La justificación general de [16.2.1] se presenta en la cuestión complementaria 16.2.

En un sistema macroscópico, las configuraciones de interés físico corresponden a

$$N_1 \gg 1, \dots, N_h \gg 1, \dots \quad [16.2.3]$$

Nótese que el ejemplo ofrecido en la figura 16.1 viola las condiciones físicas [16.2.3], pero esto no importa, ya que solamente se trataba de comprobar la validez de [16.2.1].

Tomando logaritmos en [16.2.1], utilizando [16.2.3], observando que $N, N_1, \dots, N_h, \dots$ son mucho mayores que 1 y usando la aproximación de Stirling [1.7.7], se obtiene:

$$\ln W \approx N \ln N - N - \sum_h (N_h \ln N_h - N_h) + \sum_h N_h \ln g_h \quad [16.2.4]$$

A		BC			BC	B	C	C	B
E_1		E_2		E_2		E_2		E_2	
	A	BC			BC	B	C	C	B
E_1		E_2		E_2		E_2		E_2	
B		AC			AC	A	C	C	A
E_1		E_2		E_2		E_2		E_2	
	B	AC			AC	A	C	C	A
E_1		E_2		E_2		E_2		E_2	
C		AB			AB	A	B	B	A
E_1		E_2		E_2		E_2		E_2	
	C	AB			AB	A	B	B	A
E_1		E_2		E_2		E_2		E_2	

Figura 16.1. Ejemplo de aplicación de [16.2.1]. Se representan todas las configuraciones posibles que corresponden a $N = 3$, $N_1 = 1$, $N_2 = 2$, $g_1 = g_2 = 2$.

No todas las N_h son independientes, puesto que existen las ligaduras [16.1.5-6]. En consecuencia, introduciremos los multiplicadores de Lagrange $-\alpha$ y $-\beta$ asociados a esas ligaduras. Por tanto, el análogo de [16.1.b] en la cuestión complementaria 16.1 es

$$z = \ln W - \alpha \sum_h N_h - \beta \sum_h E_h N_h \simeq N \ln N - N - \sum_h (N_h \ln N_h - N_h) + \sum_h N_h \ln g_h - \alpha \sum_h N_h - \beta \sum_h E_h N_h \quad [16.2.5]$$

donde todas las N_1, \dots, N_h, \dots se tratan ya como variables independientes. Aunque N_1, \dots, N_h, \dots son números enteros no negativos, se llega al resultado correcto para la configuración que hace máxima a W tratando a aquéllos como si fuesen variables reales continuas. Con objeto de seguir notaciones habituales, no usaremos diferenciales de $W, N_1, \dots, N_h, \dots$, sino pequeñas variaciones para ellos, y las denotaremos por $\delta W, \delta N_1, \dots, \delta N_h, \dots$: éstos son números enteros mucho más pequeños que $W, N_1, \dots, N_h, \dots$. Así pues, dado que $N, g_1, \dots, E_1, \dots, E_h, \dots, \alpha$ y β son constantes, se obtiene el análogo de [16.1.c]:

$$\delta z \simeq \sum_h \{-\ln N_h + \ln g_h - \alpha - \beta E_h\} \delta N_h \quad [16.2.6]$$

ya que

$$\delta(N_h \ln N_h) - \delta N_h = (\delta N_h) \ln N_h + N_h(\delta N_h/N_h) - \delta N_h = \ln N_h \delta N_h \quad [16.2.7]$$

El máximo de z se obtiene si $\delta z = 0$. Dado que todos los δN_h son independientes, z (y, por tanto, $\log W$) será máxima si $N_h = N_{h, \text{máx}}$ cumple

$$-\ln N_{h, \text{máx}} + \ln g_h - \alpha - \beta E_h = 0 \quad [16.2.8]$$

es decir

$$N_{h, \text{máx}} = \frac{g_h}{\exp(\alpha + \beta E_h)} \quad [16.2.9]$$

La comprobación de que, efectivamente, [16.2.9] da lugar a un máximo constituye el ejercicio 16.1. El multiplicador α puede eliminarse fácilmente. En efecto, sustituyendo [16.2.9] en [16.1.5], se obtiene

$$\exp \alpha = \frac{Z}{N} \quad [16.2.10]$$

donde se ha introducido la llamada función de partición

$$Z = \sum_h g_h \exp(-\beta E_h) \quad [16.2.11]$$

En consecuencia, al eliminar $\exp \alpha$ utilizando [16.2.10], [16.2.9] pasa a ser

$$\frac{N_{h, \text{máx}}}{N} = \frac{g_h \exp(-\beta E_h)}{Z} \quad [16.2.12]$$

Nótese que $N_{h, \text{máx}}/N$ puede interpretarse como la probabilidad de encontrar constituyentes o partículas con energía E_h , puesto que

$$\sum_h \frac{N_{h, \text{máx}}}{N} = 1 \quad [16.2.13]$$

En consecuencia

$$\sum_h \frac{N_{h, \text{máx}}}{N} E_h = \frac{E_T}{N} \quad [16.2.14]$$

puede interpretarse como la energía media del sistema (de acuerdo con la idea de que E_T es del orden de N).

Para la configuración $N_{1, \text{máx}}, \dots, N_{h, \text{máx}}, \dots$ utilizando [16.1.7] y, sucesivamente, [16.2.4] y [16.2.12], se tiene:

$$S_T \approx k_B \{ N \ln N - \sum_h N_{h, \text{máx}} (\ln N - \ln Z - \beta E_h) \} = k_B \{ N \ln Z + \beta E_T \} \quad [16.2.15]$$

En el último paso en [16.2.15], se ha utilizado [16.2.14]. Nótese que [16.2.12] y [16.2.14] implican que β es función de E_T . En consecuencia, Z [16.2.11] también depende de E_T . Dado que el sistema considerado ocupa un volumen macroscópico V , una evaluación más detallada mostraría que diversas cantidades físicas como S_T dependen de V , además de E_T . El multiplicador β está relacionado con T a través de [16.1.8]: su justificación, en el caso actual de la estadística de Boltzmann, se da en la cuestión 16.3. La ecuación [16.2.15] (tras haber eliminado β por medio de [16.1.8] y usar [16.2.14] para obtener T en función de E_T) da la entropía en función de N , V , E_T y, así, caracteriza completamente las propiedades termodinámicas del sistema. Compárese con la discusión general en la sección 16.1.

16.3. ESTADÍSTICA CUÁNTICA DE FERMI-DIRAC

Haremos la hipótesis fundamental de que el sistema macroscópico, en equilibrio termodinámico, está constituido por un gran número N de partículas microscópicas idénticas e indistinguibles de carácter fermiónico. Esto caracteriza la estadística cuántica de Fermi-Dirac, que desarrollaremos en esta sección. Imaginemos una posible configuración en la que hay N_1 partículas microscópicas con energía E_1 , ..., N_h partículas con energía E_h , ... Las N_1 partículas han de distribuirse entre los g_1 estados, ... las N_h en los g_h estados, ... Puesto que hay N_h fermiones con la misma energía E_h , es estrictamente necesario que

$$N_h \leq g_h, \quad h = 1 \dots \quad [16.3.1]$$

Eso permite que, aunque los N_h fermiones tienen la misma energía E_h , cada pareja de ellos puedan diferir en, al menos, un número cuántico, de modo que no haya dos o más que tengan iguales todos sus números cuánticos. En otros términos, se verifica el principio de exclusión. El número total de configuraciones diferentes, W , en todas las cuales hay N_1 fermiones con energía E_1 , ..., N_h fermiones con energía E_h , ... es

$$W = \frac{g_1! \dots g_h! \dots}{N_1!(g_1 - N_1)! \dots N_h!(g_h - N_h)! \dots} \quad [16.3.2]$$

Un ejemplo simple aclarará [16.3.2]. Sean $N = 3$ partículas microscópicas idénticas, indistinguibles y de tipo fermiónico, y dos niveles de energía E_1 y E_2 para ellas, con factores de degeneración $g_1 = g_2 = 4$. Imaginemos configuraciones con $N_1 = 2$, $N_2 = 1$: todas ellas, habiendo tenido en cuenta el principio de exclusión, se representan en la figura 16.2. A cada nivel de energía se le ha atribuido una caja con cuatro compartimentos.

El número de configuraciones con $N_1 = 2$, $N_2 = 1$, $g_1 = g_2 = 4$, según la fórmula [16.3.2], es

$$W = \frac{4! 4!}{2! 2! 1! 3!} = 24 \quad [16.3.3]$$

que coincide con el total de las presentadas en la figura 16.2. Nótese que si se hubiese tratado de partículas *distinguibles*, la fórmula [16.2.1] con $N = 3$, $N_1 = 2$, $N_2 = 1$, $g_1 = g_2 = 4$ habría dado $W = 192$.

La justificación general de [16.3.2] se indica en la cuestión complementaria 16.4. En el caso actual de constituyentes indistinguibles fermiónicos, los números de ocupación N_1, \dots, N_h, \dots de la configuración considerada han de verificar las ligaduras [16.1.5] y [16.1.6], siendo E_T la energía total del sistema macroscópico ahora también. Por hipótesis, en los casos de interés en Mecánica Estadística, se cumplen todas las condiciones siguientes ($h = 1\dots$):

$$g_h \gg 1 \quad [16.3.4]$$

$$N_h \gg 1 \quad [16.3.5]$$

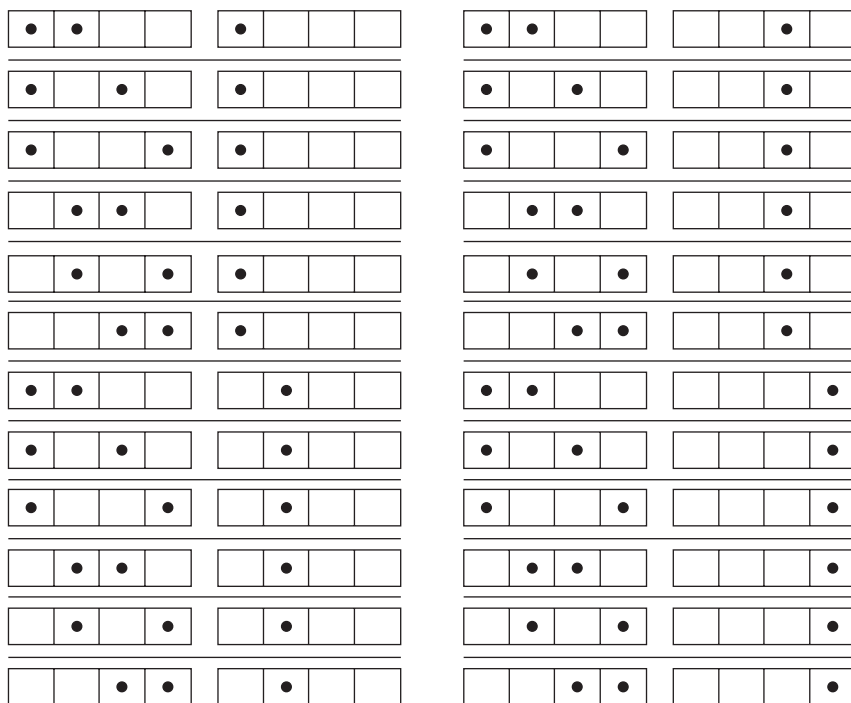


Figura 16.2. Ejemplo de aplicación de [16.3.2]. Se representan todas las configuraciones que corresponden a $N = 3$, $N_1 = 2$, $N_2 = 1$, $g_1 = g_2 = 4$.

$$\ln [(g_h - N_h)!] \sim (g_h - N_h) \ln (g_h - N_h) - (g_h - N_h) \quad [16.3.6]$$

El ejemplo discutido en la figura 16.2 no satisface [16.3.4-5], pero ello es irrelevante puesto que aquél sólo pretendía justificar [16.3.2] en una situación sencilla.

La aproximación [16.3.6], basada en la de Stirling [1.7.7], merece un comentario especial. En ella, se supone que $g_h - N_h$ es lo suficientemente grande para que aquélla sea válida, pero no tanto como para que $g_h - N_h \sim g_h$, en principio. En consecuencia, $(g_h/N_h) - 1$ no se aproxima, en principio, por g_h/N_h . Tomando logaritmos en [16.3.2], teniendo en cuenta [16.3.4-6] y utilizando, en consecuencia, la aproximación de Stirling [1.7.7] también para $g_h!$ y $N_h!$, llegamos a:

$$\begin{aligned} \ln W &\approx \sum_h \{g_h \ln g_h - g_h - N_h \ln N_h + N_h - (g_h - N_h) \ln (g_h - N_h) + (g_h - N_h)\} = \\ &= \sum_h \left[g_h \ln \left(\frac{g_h}{g_h - N_h} \right) + N_h \ln \left(\frac{g_h - N_h}{N_h} \right) \right] \end{aligned} \quad [16.3.7]$$

Deseamos hallar los números de ocupación N_1, \dots, N_h, \dots que, verificando [16.1.5-6], hacen que W y $\ln W$ sean máximas. El problema es semejante (aunque no idéntico) al analizado en la sección 16.2. Así, [16.1.4] y [16.1.5] constituyen ligaduras que se tratan por medio de multiplicadores de Lagrange $-\alpha$ y $-\beta$. Por tanto, tras comparar con la cuestión complementaria 16.1 y con [16.2.5], estudiaremos la nueva función:

$$z = \sum_h \left[g_h \ln \left(\frac{g_h}{g_h - N_h} \right) + N_h \ln \left(\frac{g_h - N_h}{N_h} \right) \right] - \alpha \sum_h N_h - \beta \sum_h E_h N_h \quad [16.3.8]$$

Dado que todas las g_h, E_h, α y β son constantes, [16.3.8], junto con

$$\delta[(g_h - N_h) \ln (g_h - N_h)] + \delta(g_h - N_h) = -\ln (g_h - N_h) \delta N_h \quad [16.3.9]$$

implican

$$\delta z = \sum_h \{-\ln N_h + \ln (g_h - N_h) - \alpha - \beta E_h\} \delta N_h \quad [16.3.10]$$

Los números de ocupación $N_{h, \text{máx}}$ para los que z es máxima fuerzan a que $\delta z = 0$. Dichos números de ocupación también hacen que $\ln W$ y W sean máximos. Puesto que la introducción de α y β permite tratar a todos los números de ocupación como variables independientes, todos los δN_h lo son. Por tanto

$$\ln N_{h, \text{máx}} + \ln (g_h - N_{h, \text{máx}}) - \alpha - \beta E_h = 0 \quad [16.3.11]$$

es decir,

$$N_{h, \text{máx}} = \frac{g_h}{\exp (\alpha + \beta E_h) + 1} \quad [16.3.12]$$

Nótese que $N_{h,\text{máx}}/g_h < 1$, lo cual es consistente con [16.3.1]. La comprobación de que se trata de un máximo se presenta en el ejercicio 16.2. Aceptaremos también que la entropía total S_T del presente sistema macroscópico, descrito por la estadística cuántica de Fermi-Dirac, viene dada por [16.1.7]. Ahora, $W_{\text{máx}}$ está dada por [16.3.7] cuando, a su vez, N_h iguala al lado derecho de [16.3.12]. Así pues:

$$S_T = k_B \sum_h \left[g_h \ln \left(\frac{g_h}{g_h - N_{h,\text{máx}}} \right) + N_{h,\text{máx}} \ln \left(\frac{g_h - N_{h,\text{máx}}}{N_{h,\text{máx}}} \right) \right] \quad [16.3.13]$$

Utilizando [16.3.12], así como

$$N = \sum_h N_{h,\text{máx}} \quad , \quad E_T = \sum_h E_h N_{h,\text{máx}} \quad [16.3.14]$$

[16.3.13] pasa a ser

$$S_T = k_B \sum_h g_h \ln [1 + \exp(-(\alpha + \beta E_h))] + \alpha k_B N + \beta k_B E_T \quad [16.3.15]$$

Ambas [16.3.14] implican que α y β dependen de E_T . Análogamente a la estadística clásica de Boltzmann, S_T depende, en general, de V y de E_T . En el presente caso, el multiplicador β también está relacionado con la temperatura absoluta T mediante [16.1.8]. La justificación puede verse en el ejercicio 16.3. El multiplicador α queda dado en términos de N , T implícitamente a través de la primera ecuación [16.3.14] y [16.1.8], pero su eliminación explícita ya no es automática, contrariamente al caso de la estadística clásica. En todo caso, esas dos ecuaciones, junto con [16.3.15] y la segunda ecuación [16.3.4], dan S_T como función de N , V y E_T . Se obtiene así, una ecuación de estado que determina las propiedades termodinámicas del sistema. Véase el capítulo 17.

16.4. ESTADÍSTICA CUÁNTICA DE BOSE-EINSTEIN

Ahora trataremos un sistema macroscópico en equilibrio termodinámico formado por un gran número de constituyentes microscópicos idénticos e indistinguibles de naturaleza bosónica. Esto último caracteriza la estadística cuántica de Bose-Einstein. Consideremos una posible configuración, en la que N_h constituyentes bosónicos han de distribuirse en los g_h estados diferentes correspondientes a la misma energía E_h . El número W de configuraciones distintas, todas las cuales contienen N_h bosones con energía E_h , $h = 1, \dots$, es el producto:

$$W = \frac{(N_1 + g_1 - 1)!}{N_1!(g_1 - 1)!} \cdots \frac{(N_h + g_h - 1)!}{N_h!(g_h - 1)!} \cdots \quad [16.4.1]$$

Siguiendo la pauta de las secciones anteriores, presentaremos un ejemplo sencillo para comprender [16.4.1]. Sean $N = 3$ partículas microscópicas idénticas e indistinguibles de

carácter bosónico, y dos niveles de energía E_1, E_2 , con factores de degeneración $g_1 = g_2 = 4$. Trataremos las configuraciones con $N_1 = 2, N_2 = 1$. A cada nivel de energía le asociamos una caja con cuatro compartimentos. Veinte posibles configuraciones, formadas por dos grupos, cada uno de los cuales con una partícula en un estado determinado de energía E_2 , se dan en la figura 16.3. Hay otras veinte posibles configuraciones, además, formadas por dos grupos de diez: en cada grupo hay una partícula en un mismo estado de energía E_2 (sucesivamente, en los dos espacios que aparecen vacíos para esa energía en la figura 16.3). En total, el número de posibles configuraciones para bosones con $N_1 = 2, N_2 = 1$ es 40.

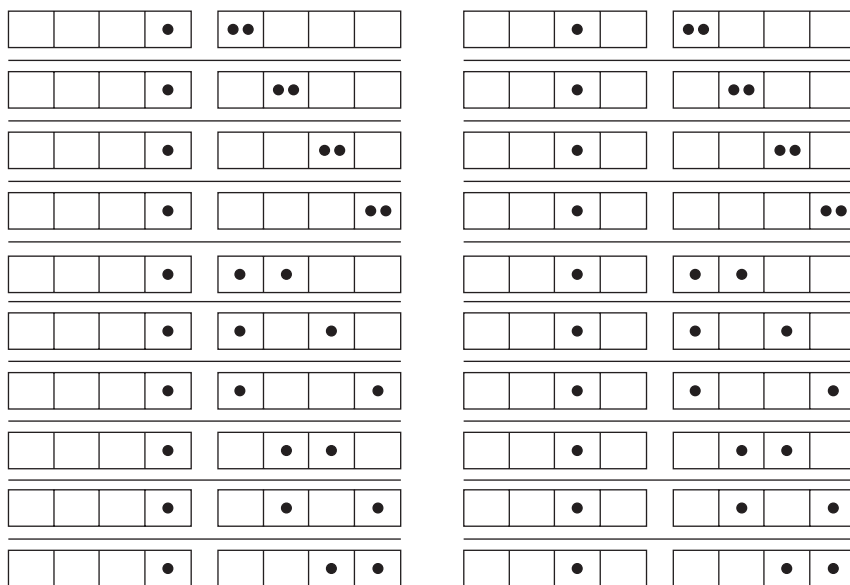


Figura 16.3. Ejemplo de aplicación de 16.4.1. Se representan veinte de las cuarenta posibles configuraciones correspondientes a $N = 3, N_1 = 2, N_2 = 1, g_1 = g_2 = 4$.

La fórmula [16.4.1] para $g_1 = g_2 = 4, N_1 = 2, N_2 = 1$ da

$$W = \frac{5! 4!}{2! 3! 1! 3!} = 40 \tag{16.4.2}$$

Una justificación general de [16.4.1] se ofrece en la cuestión complementaria 16.5. En los casos de interés físico, se tiene

$$g_1 \gg 1, \dots, g_h \gg 1, \dots \tag{16.4.3}$$

$$N_1 \gg 1, \dots, N_h \gg 1, \dots \tag{16.4.4}$$

Tomando logaritmos en [16.4.1], utilizando [16.4.3-4] y recordando la aproximación de Stirling [1.7.7], se obtiene

$$\ln W \simeq \sum_h \{(N_h + g_h) \ln (N_h + g_h) - (N_h + g_h) - N_h \ln N_h + N_h - g_h \ln g_h + g_h\} \quad [16.4.5]$$

En el caso presente, todas las posibles configuraciones N_1, \dots, N_h, \dots deben dar la misma energía total E_T para el sistema macroscópico, es decir, continuamos aceptando [16.1.6]. A ella, le asociaremos el multiplicador de Lagrange $-\beta$. Por lo que se refiere al análogo de [16.1.5] en el caso presente, hay que hacer una observación importante. Si el sistema macroscópico en cuestión está formado por un gran número, N , de partículas materiales (por ejemplo, átomos de ${}^4\text{He}$), entonces también debe de aceptarse la validez de [16.1.5] como ligadura, atribuyéndole el multiplicador de Lagrange $-\alpha$. Sin embargo, hay situaciones físicas muy importantes, como la del gas de fotones en equilibrio termodinámico en una cavidad (es decir, el cuerpo negro) y otras, en las que no hay razón para considerar el número total de bosones como un dato conocido o como una constante física determinada del sistema. En tal caso, dicho número no puede fijarse a priori (sino, en todo caso, *calcularse* a posteriori), y la ligadura [16.1.5] carece de sentido. Todos los casos pueden tratarse de forma unificada introduciendo el correspondiente multiplicador $-\alpha$. Si $\alpha \neq 0$, [16.1.5] es una ligadura, que hay que tener en cuenta necesariamente. Si $\alpha = 0$, por el contrario, estaremos en el caso en que dicha ligadura *no* puede imponerse (es decir, $\sum_h N_h$ no puede fijarse ni mantenerse constante en cualquier posible configuración N_1, \dots, N_h, \dots).

Así pues, consideraremos en el caso bosónico la nueva función

$$z = \sum_h \{(N_h + g_h) \ln (N_h + g_h) - (N_h + g_h) - N_h \ln N_h + N_h - g_h \ln g_h + g_h\} - \alpha \sum_h N_h - \beta \sum_h E_h N_h \quad [16.4.6]$$

Operaremos como en los casos precedentes. Por ser g_h, E_h, α y β constantes:

$$\delta z = \sum_h \{\ln (N_h + g_h) - \ln N_h - \alpha - \beta E_h\} \delta N_h \quad [16.4.7]$$

donde se ha hecho uso de

$$\delta[(N_h + g_h) \ln (N_h + g_h)] - \delta(N_h + g_h) = \ln (N_h + g_h) \delta N_h \quad [16.4.8]$$

Los números de ocupación $N_{h, \text{máx}}$ que hacen máxima a z implican $\delta z = 0$. En consecuencia, también hacen máximos a $\ln W$ y a W . De nuevo, la introducción de α y β hace que todos los δN_h puedan tratarse como independientes. Así pues

$$\ln (N_{h, \text{máx}} + g_h) - \ln N_{h, \text{máx}} - \alpha - \beta E_h = 0 \quad [16.4.9]$$

y, por tanto,

$$N_{h, \text{máx}} = \frac{g_h}{\exp(\alpha + \beta E_h) - 1} \quad [16.4.10]$$

En el ejercicio 16.2 se muestra que, efectivamente, se trata de un máximo. Partiendo de [16.1.7] y [16.4.5] para la configuración $N_{1, \text{máx}}, \dots, N_{h, \text{máx}}, \dots$ que hace máxima a W , y usando [16.4.10], se obtiene:

$$S_T = -k_B \sum_h g_h \ln[1 - \exp(-(\alpha + \beta E_h))] + \alpha k_B N + \beta k_B E_T \quad [16.4.11]$$

A partir de aquí, y mediante un cálculo enteramente análogo al de la cuestión complementaria 16.3, es inmediato probar que

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E_T} \right)_V = \beta k_B \quad [16.4.12]$$

tras cancelar términos en $(\partial\alpha/\partial E_T)_V$ y $(\partial\beta/\partial E_T)_V$. De nuevo, la comparación con la segunda ecuación [16.1.2] implica [16.1.8].

Si [16.1.5] constituye efectivamente una ligadura para el sistema de bosones (es decir, $\alpha \neq 0$), entonces la ecuación de estado para aquél se obtiene de forma similar a la del sistema de fermiones, según se discutió al final de la sección 16.3. Ejemplos de ello y de las situaciones correspondientes a $\alpha = 0$ se tratarán en el capítulo siguiente.

16.5. ALGUNAS PROPIEDADES GENERALES

Una cuestión muy importante. ¿Cuán probables son las distribuciones $N_{h, \text{máx}}$ que han generado $W_{\text{máx}}$ en cada caso? Pues bien, por ser N muy grande (es decir, cuando $N \rightarrow \infty$), puede justificarse que la práctica totalidad de los sistemas que cumplen [16.1.5] y [16.1.6] tienen las distribuciones [16.2.9], [16.3.12] y [16.4.10], para constituyentes distinguibles, fermiones y bosones, respectivamente.

Reescribamos las tres estadísticas de una forma más conveniente y analicémoslas conjuntamente:

$$\text{Boltzmann: } \frac{g_h}{N_h} = \exp(\alpha + \beta E_h) \quad [16.5.1]$$

$$\text{Fermi-Dirac: } \frac{g_h}{N_h} - 1 = \exp(\alpha + \beta E_h) \quad [16.5.2]$$

$$\text{Bose-Einstein: } \frac{g_h}{N_h} + 1 = \exp(\alpha + \beta E_h) \quad [16.5.3]$$

Si g_h/N_h es lo suficientemente grande como para que $g_h/N_h \mp 1 \approx g_h/N_h$, las dos estadísticas cuánticas de Fermi-Dirac y Bose-Einstein se reducen claramente a la de Boltzmann:

$$\frac{g_h}{N_h} - 1 \approx \frac{g_h}{N_h} + 1 \approx \frac{g_h}{N_h} \approx \exp(\alpha + \beta E_h) \quad [16.5.4]$$

Físicamente, esto ocurre en el régimen de bajas densidades (N/V pequeño) y altas temperaturas. Suponemos, para fijar las ideas, el caso de constituyentes materiales, en el que N está fijado ($\alpha \neq 0$). La separación media entre constituyentes de masa m en el sistema es del orden de $(V/N)^{1/3}$, que crece si la densidad N/V decrece. Estimando la energía cinética media de un constituyente mediante el principio de equipartición, es decir, como $(3/2)k_B T$, entonces la longitud de onda de de Broglie media es aproximadamente $[h^2/(3mk_B T)]^{1/2}$, que decrece si la temperatura crece. Así pues, para bajas densidades y altas temperaturas, $[h^2/(3mk_B T)]^{1/2} \ll (V/N)^{1/3}$. Nótese que en dicho régimen: i) las presiones deben ser también pequeñas, ii) los paquetes de ondas asociados a los diversos constituyentes deben estar muy separados entre sí y, así, iii) las interferencias entre ellos deben ser despreciables. En tales condiciones, las partículas microscópicas genuinamente indistinguibles (fermiones y bosones) se comportan prácticamente como distinguibles y, en promedio, están tanto más separadas entre sí cuanto menor es N/V y mayor es T (compárese con el análisis expuesto en la sección 15.1). Véase la figura 16.4. Entonces, se comprende que las dos estadísticas cuánticas coincidan aproximadamente con la clásica, según se expresa en [16.5.4].

16.6. ESTADÍSTICAS CUÁNTICAS: REINTERPRETACIÓN E INCLUSIÓN DE INTERACCIONES ENTRE CONSTITUYENTES¹

Consideremos, de nuevo, nuestro sistema macroscópico (al cual denotaremos por s) en equilibrio termodinámico a temperatura absoluta T , con volumen V y energía total E_T , formado por un gran número N de constituyentes microscópicos idénticos, indistinguibles (fermiones o bosones) y libres, desde otro punto de vista, equivalente al anterior.

En numerosos casos, el sistema s no está totalmente aislado, sino en presencia de otro sistema macroscópico B («un baño térmico») con N_B partículas o constituyentes, energía total $E_{B,T}$ y volumen V_B , y también en equilibrio termodinámico por sí mismo. En general, se verifica:

1. $N_B \gg N, E_{B,T} \gg E_T, V_B \gg V.$

¹ El lector interesado en presentaciones más detalladas puede consultar: K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley and Sons, Nueva York, 1963; D. A. McQuarrie, *Statistical Thermodynamics*, Harper and Row, Nueva York, 1973; L. D. Landau y E. M. Lifchitz, *Statistical Physics*, vol. 5, 1.ª parte, 3.ª ed., Pergamon Press Oxford, 1980, y S. K. Ma, *Statistical Mechanics*, World Scientific, Singapur, 1985.

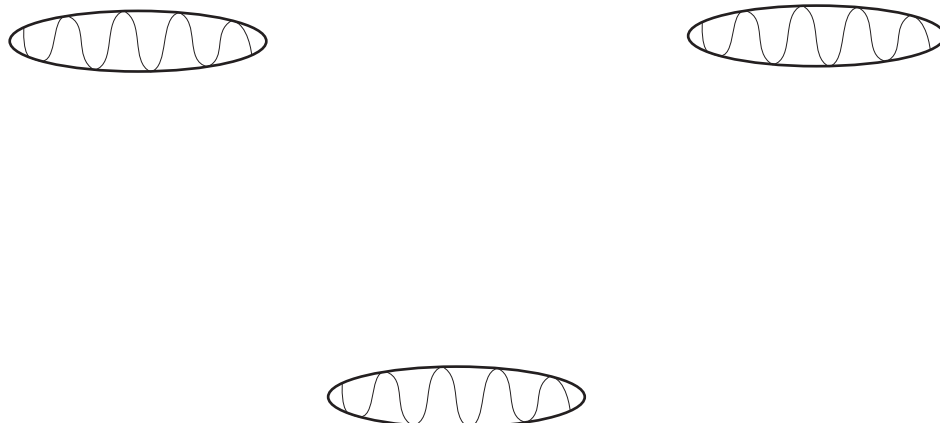


Figura 16.4. Para bajas densidades (y presiones) y altas temperaturas, la separación media entre paquetes de ondas asociados a constituyentes es mucho mayor que su longitud de onda de de Broglie media. En consecuencia, los constituyentes pueden tratarse como distinguibles y las tres estadísticas coinciden aproximadamente.

2. La energía de interacción E_{int} entre B y s es despreciable frente a E_T (y frente a $E_{B,T}$). Aceptaremos que la magnitud de E_{int} será del orden del área exterior de s , que, a su vez, es del orden de $V^{2/3}$ y, por tanto, es despreciable, cuando V es muy grande, frente a E_T que es proporcional a V .
3. Supondremos que no sólo s sino también B son cuerpos eléctricamente neutros, y despreciaremos la interacción gravitatoria en B y entre s y en B (además de en s).
4. s está en equilibrio termodinámico con B a temperatura T .
5. En cualquier caso, siendo B mucho mayor que s , éste nunca influye en el estado de aquél, pero B sí puede hacerlo en el de s . Así, si B cambia su temperatura, que pasaría a ser T' , s adquirirá un nuevo estado de equilibrio termodinámico a temperatura T' también, pero lo contrario no ocurre, es decir, cambios en s no afectan a B .

Ahora podemos pensar que, incluso en el equilibrio termodinámico, puede haber lentísimos intercambios de partículas y de energía entre s y B , de modo que E_T y N deberían ser reinterpretados como los valores *medios* de la energía total y del número de partículas de s . Diversos valores para estas dos últimas magnitudes pueden, debido a tales intercambios, ser, en principio, posibles, pero en cada estado de equilibrio termodinámico ciertos valores son muchísimo más probables que otros: así, E_T y N serán los valores medios de forma natural en el equilibrio termodinámico. Si s tuviera N' partículas en total, tendría un hamiltoniano total mecano-cuántico $H_{N'}$ (que es independiente del tiempo), y toda una serie de autovalores para la energía total $E_\gamma(N')$, donde γ es un conjunto de (muchos) números cuánticos. Pero ya hemos dicho que N' no tiene que estar fijado, siendo cualquier valor posible para él, aunque unos valores serán muchísimo más probables que otros. Nótese que $H_{N'}$ es la suma de los operadores de energía cinética libre para las diferentes partículas (véase [7.12.7]), pues

la interacción entre éstas se supone muy pequeña o despreciable. La descripción mediante las distribuciones [16.3.12] y [16.4.10] con $N_h = N_{h, \text{máx}}$, y con las restricciones [16.1.5-6], sigue siendo válida y correcta, con la única modificación conceptual de que N y E_T son valores medios en el sentido que acabamos de explicar. Buscaremos, a partir de esa descripción, una equivalente, cuya utilidad se apreciará más tarde. ¿Es posible reexpresar N y E_T , entendidos como valores medios en el equilibrio, en la forma $\sum_{\text{valores posibles}} (\text{valor posible}) \times (\text{probabilidad de dicho valor posible})$? Nótese que habría, entonces, un paralelismo con la noción de valor medio que la Estadística nos enseña (ya explotado previamente, por ejemplo, al expresar $\langle r \rangle$, $\langle p \rangle$, según indican [7.2.1], [7.6.4]). Pues bien, la pregunta anterior tiene una respuesta afirmativa. Presentaremos los resultados, y los discutiremos, dejando su justificación matemática para la cuestión complementaria 16.6. Se tiene

$$N = \sum_{N'=0}^{\infty} \sum_{\gamma} N' P(N', \gamma) \quad [16.6.1]$$

$$E_T = \sum_{N'=0}^{\infty} \sum_{\gamma} E_{\gamma}(N') P(N', \gamma) \quad [16.6.2]$$

$$P(N', \gamma) = \frac{\exp[-(\alpha N' + (k_B T)^{-1} E_{\gamma}(N'))]}{Q} \quad [16.6.3]$$

$$Q = \sum_{N'=0}^{\infty} \sum_{\gamma} \exp[-(\alpha N' + (k_B T)^{-1} E_{\gamma}(N'))] \quad [16.6.4]$$

$P(N', \gamma)$ puede interpretarse como la probabilidad de que el sistema s (en equilibrio termodinámico por sí mismo y con el baño térmico B , ambos a temperatura absoluta T) tenga N' partículas en total y esté en el estado con números cuánticos γ y energía $E_{\gamma}(N')$. Una explicación complementaria del concepto de probabilidad aquí involucrado se dará más tarde en esta sección. Ciertamente, ambas ecuaciones [16.6.1] y [16.6.2] tienen la estructura deseada. Nótese que, al ser las $P(N', \gamma)$ no negativas, el requisito de consistencia que permite interpretarlas como probabilidades se cumple claramente:

$$\sum_{N'=0}^{\infty} \sum_{\gamma} P(N', \gamma) = 1 \quad [16.6.5]$$

$P(N', \gamma)$ y Q se conocen como la distribución de Gibbs y la gran función de partición, respectivamente. Recalcaremos que: i) $E_{\gamma}(N')$ *no* es la energía posible para un constituyente, es decir, *no* coincide con las E_1, \dots, E_h, \dots que aparecen en [16.3.12] y [16.4.10], en general, ii) la suma en N' en [16.6.1-2] no plantea problema conceptual sobre la base de las observaciones anteriores: todos los N' son posibles (pero unos valores son muchísimo más probables que otros), iii) salvo en situaciones muy especiales, los diversos N' que constituyen *en la práctica* a $\sum_{N'}$ en [16.6.1-2] y [16.6.4] están muy próximos al valor medio N , es decir, las fluctuaciones en el número de partículas del sistema son muy pequeñas y tienden a cero en el límite $N \rightarrow \infty$.

Por sencillez, la temperatura absoluta T aparece directamente en [16.6.3-4], en vez del parámetro β , para lo cual se ha hecho uso de [16.1.8]. El interés de [16.6.1-4] es enorme, y la razón es la siguiente. Las ecuaciones [16.3.12] y [16.4.10] *no* se prestan directamente a la inclusión de interacciones entre los constituyentes, pues E_{η} es la energía *individual* de un *constituyente*. Sin embargo, las ecuaciones [16.6.1-2] (que son, respectivamente, equivalentes a las [16.1.5-6] en ausencia de dichas interacciones), así como las [16.6.3-4], *continúan siendo válidas si las interacciones entre constituyentes se incluyen*, y, por tanto, *son utilizables en general*. En efecto, en ellas aparecen los autovalores $E_{\gamma}(N')$ de los hamiltonianos totales $H_{N'}$ del sistema s cuando se supone que éste contiene N' partículas: dichos hamiltonianos pueden incluir las energías potenciales de interacción entre los N' constituyentes (por ejemplo, son los dados en la ecuación [7.12.10]). En resumen, las ecuaciones [16.6.1-4] caracterizan, en general, la Mecánica Estadística Cuántica del sistema s en equilibrio termodinámico. Es importante darse cuenta de que ahora tomamos T como un parámetro físico dado (impuesto por el baño térmico B y por el equilibrio termodinámico que él le impone a s). Por otra parte, α puede eliminarse, en principio, entre ambas ecuaciones [16.6.1] y [16.6.2]. El resultado es una relación entre E_T , N , T y V (que también aparece en [16.6.1-2], según un análisis más explícito mostraría): ésta es otra forma equivalente de la ecuación de estado. El resto de las magnitudes termodinámicas puede entonces obtenerse a partir de las relaciones termodinámicas simplemente. Así, la Termodinámica nos enseña que si se conoce E_T en función de V y T (para N dado) la entropía viene dada por

$$S_T = \int_0^T \frac{dT}{T} \left(\frac{\partial E_T}{\partial T} \right)_V \quad [16.6.6]$$

En esta reformulación ya no tiene interés usar [16.1.7].

Con objeto de conectar con nomenclaturas habitualmente usadas, diremos que $\exp(-\alpha)$ y $-\alpha h_B T \equiv \mu$ se denominan la fugacidad y el potencial químico, respectivamente. Otras fórmulas útiles, equivalentes a [16.6.1] y [16.6.2], respectivamente, son ($\beta = 1/k_B T$)

$$N = \exp(-\alpha) \frac{\partial \ln Q}{\partial [\exp(-\alpha)]} \quad [16.6.7]$$

$$E_T = -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Q) \quad [16.6.8]$$

La justificación de [16.6.7-8] es inmediata a partir de [16.6.1-2].

A posteriori, podemos ofrecer aún otra reinterpretación de [16.6.1-4], que, como el lector apreciará, guardará ciertas semejanzas con la interpretación probabilística de la función de onda en términos de copias idénticas de un sistema (sección 6.9). Imaginemos un gran número n' de copias similares de nuestro sistema macroscópico s , todas y cada una de ellas en equilibrio termodinámico, ocupando el mismo volumen V con la misma temperatura T , presión P y potencial químico $\mu = -\alpha h_B T$. Ahora, se puede seguir pensando que cada una de las copias está en equilibrio termodinámico, intercambiando

energía y partículas, con su propio baño térmico B . Las diversas copias están formadas por el mismo tipo de constituyentes microscópicos idénticos e indistinguibles (libres o en interacción entre sí) y el número total de ellas, N' , así como su energía $E\gamma(N')$, que están determinadas en cada copia, son distintos de unas a otras. Sea $n'(N', \gamma)$ el número total de copias tales que cada una de ellas contiene N' constituyentes y está en un estado con números cuánticos γ y energía $E_\gamma(N')$. El cociente $n'(N', \gamma)/n'$ es la probabilidad de que, en el conjunto de todas las copias las haya con N' constituyentes y en el estado γ . Aceptaremos que cuando n' tiende a infinito, dicha probabilidad es, precisamente, la dada mediante [16.6.3-4]. Así pues, las ecuaciones [16.6.1] y [16.6.2] dan, respectivamente, los valores medios del número de partículas y de la energía total sobre el conjunto de todas las copias. Este último se denomina gran canónico. El resto del análisis es similar al que hemos presentado previamente, en relación con la primera interpretación, al comienzo de esta sección. Algunos detalles adicionales de interés son los siguientes:

a)
$$\frac{PV}{k_B T} = \ln Q \quad [16.6.9]$$

b) La energía libre de Helmholtz, A , viene dada por

$$A = E_T - TS \quad [16.6.10]$$

Se tiene ($\mu = -\alpha k_B T$)

$$A = \mu N - k_B T \ln Q \quad [16.6.11]$$

c) El potencial termodinámico F se obtiene mediante

$$F = A - \mu N \quad [16.6.12]$$

y, por tanto,

$$F = -k_B T \ln Q \quad [16.6.13]$$

Las justificaciones de [16.6.9] y de [16.6.11] (y de su consecuencia [16.6.13]) se omitirán por ser innecesarias.

CUESTIONES COMPLEMENTARIAS

16.1. Método de los multiplicadores de Lagrange.

Sea $y = f(x_1, \dots, x_n, \dots)$ una función de las variables x_1, \dots, x_n, \dots . Por hipótesis, estas últimas no son independientes, sino que han de verificar R restricciones o ligaduras:

$$\begin{aligned} g_1(x_1, \dots, x_n, \dots) &= A_1 \\ &\vdots \\ g_R(x_1, \dots, x_n, \dots) &= A_R \end{aligned} \quad [16.1.a]$$

donde A_1, \dots, A_R son constantes. Se trata de hallar los máximos o los mínimos de la función y , con las R ligaduras [16.1.a]. Un procedimiento, útil por sus aplicaciones a Mecánica Estadística en particular, es el de los multiplicadores de Lagrange, que se describirá someramente. En dicho método, se considera, en vez de y , la nueva función

$$z = f(x_1, \dots, x_n, \dots) - \sum_{r=1}^R \lambda_r g_r(x_1, \dots, x_n, \dots) \quad [16.1.b]$$

en la cual todas las x_1, \dots, x_n, \dots se tratan como variables independientes. $\lambda_1, \dots, \lambda_R$ son nuevos parámetros (los multiplicadores de Lagrange) que son independientes de x_1, \dots, x_n, \dots . El problema consiste, ahora, en: i) buscar los máximos y los mínimos de z , como función de todas las variables independientes x_1, \dots, x_n, \dots , tratando a $\lambda_1, \dots, \lambda_R$ como parámetros constantes, ii) formular las condiciones que determinan $\lambda_1, \dots, \lambda_R$. Los máximos o mínimos de z proporcionan, respectivamente, los de y . Para una discusión más detallada, véase². Consideremos la diferencial de z

$$dz = \sum_j \left\{ \frac{\partial f}{\partial x_j} - \sum_{r=1}^R \lambda_r \frac{\partial g_r}{\partial x_j} \right\} dx_j \quad [16.1.c]$$

y como dx_1, \dots, dx_n, \dots son independientes, los máximos y mínimos de z se obtienen a partir de

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} - \sum_{r=1}^R \lambda_r \frac{\partial g_r}{\partial x_j} = 0 \quad , \quad j = 1, \dots, n, \dots \quad [16.1.d]$$

Sean $x_1^{(0)}(\lambda_1, \dots, \lambda_R), \dots, x_n^{(0)}(\lambda_1, \dots, \lambda_R), \dots$ los valores de x_1, \dots, x_n, \dots que resuelven [16.1.d] y hacen a z máxima o mínima. Entonces, los valores de $\lambda_1, \dots, \lambda_R$ se determinan imponiendo que

$$\begin{aligned} g_1(x_1^{(0)}(\lambda_1, \dots, \lambda_R), \dots, x_n^{(0)}(\lambda_1, \dots, \lambda_R), \dots) &= A_1 \\ &\vdots \\ g_R(x_1^{(0)}(\lambda_1, \dots, \lambda_R), \dots, x_n^{(0)}(\lambda_1, \dots, \lambda_R), \dots) &= A_R \end{aligned} \quad [16.1.e]$$

Una vez hallados $\lambda_1, \dots, \lambda_R$ a partir de [16.1.e], $x_1^{(0)}(\lambda_1, \dots, \lambda_R), \dots, x_n^{(0)}(\lambda_1, \dots, \lambda_R), \dots$ quedan enteramente determinados y, con ellos, los máximos y los mínimos de y .

² J. Rey Pastor, P. Pi Calleja y C. A. Trejo, *Análisis Matemático*, volumen II, sección 70.8, Editorial Kapeluz, Buenos Aires, 1957.

16.2. Justificación de la fórmula [16.2.1].

Se trata de repartir N partículas de forma que haya N_h de ellas en la caja h -ésima, en la cual, a su vez, hay g_h compartimentos disponibles. El número de formas de distribuir las N partículas en las cajas coincide con el de permutaciones con repetición (pues no hay que incluir las configuraciones en las que se permutan partículas dentro de la misma caja), esto es: $(N!/N!, \dots, N_h!, \dots)$. Pero hay que tener presente que las N_1 partículas en la caja 1 pueden estar en g_1 compartimentos, es decir, hay $g_1^{N_1}$ posibilidades, y análogamente en las demás cajas. La inclusión de estos factores lleva a [16.2.1].

16.3. Justificación de [16.1.8] a partir de [16.2.15] y de la comparación con la segunda ecuación [16.1.2].

Evaluaremos $(\partial S_T / \partial E_T)_V$, a volumen constante (siendo N también constante). Se tiene

$$\left(\frac{\partial S_T}{\partial E_T}\right)_V = k_B \left\{ N \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial E_T}\right)_V + \left(\frac{\partial \beta}{\partial E_T}\right)_V E_T + \beta \right\} \quad [16.3.a]$$

Puesto que, a este nivel, no sabemos si β depende de V , la inclusión de $(\partial \beta / \partial E_T)_V E_T$, obviamente, cubre todas las posibilidades. Ahora bien:

$$\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial E_T}\right)_V = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \left(\frac{\partial \beta}{\partial E_T}\right)_V, \quad \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{E_T}{N} Z \quad [16.3.b]$$

La sustitución de [16.3.b] en [16.3.a] da, tras cancelar los términos en $(\partial \beta / \partial E_T)_V$:

$$\left(\frac{\partial S_T}{\partial E_T}\right)_V = k_B \beta \quad [16.3.c]$$

La comparación de [16.3.c] con la relación termodinámica general dada en la segunda ecuación [16.1.2] implica [16.1.8].

16.4. Justificación de [16.3.2].

En virtud del principio de exclusión, el problema de contar es equivalente al de hallar, para la caja h -ésima, el número de combinaciones de los g_h compartimentos que en ella hay, tomados de N_h en N_h . Dicho número es

$$\binom{g_h}{N_h} = \frac{g_h!}{N_h!(g_h - N_h)!}$$

Para obtener W , sólo es preciso multiplicar todos los números $\binom{g_h}{N_h}$.

Esto da [16.3.2].

16.5. Justificación de [16.4.1].

El problema de contar puede reformularse como sigue. En la caja h -ésima hay g_h compartimentos y $g_h - 1$ paredes entre ellos. Cada estado (compartimento) de la caja puede estar ocupado por cualquier número de constituyentes. Por tanto, el número de posibilidades en la caja h -ésima es el de permutaciones de $N_h + g_h - 1$ objetos, teniendo presente que, al permutar entre sí las paredes, o bien, al hacer lo mismo con los constituyentes (que son indistinguibles), *no* se obtienen posibilidades nuevas. El número de tales posibilidades es $(N_h + g_h - 1)!/N_h!(g_h - 1)!$ ³, y el producto de estos factores para todas las cajas, que son independientes, es [16.4.1].

16.6. Supóngase que no hay interacción entre las partículas. Probaremos que las ecuaciones [16.6.1] y [16.6.2] [cuando N y E_T se interpretan como valores medios] son, respectivamente, equivalentes a [16.1.5] y [16.1.6] cuando $N_h = N_{h, \text{máx}}$ (y, a su vez, $N_{h, \text{máx}}$ está dado por 16.3.12) o [16.4.10]).

Nuestro punto de partida será el par de ecuaciones [16.6.1] y [16.6.2], junto con [16.6.3-4]. Nótese que, por no haber interacción entre los constituyentes

$$N' = \sum_h N'_h \quad , \quad E_\gamma(N') = \sum_h E_h N'_h \quad [16.6.a]$$

Para fermiones $N'_h = 0, 1$, en tanto que para bosones $N'_h = 0, 1, 2, \dots$ Usando [16.1.8] y [16.6.a], la ecuación [16.6.4] pasa a ser, sucesivamente (tanto para fermiones como para bosones),

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{N'=0}^{\infty} \sum_{\gamma} \exp[-(\alpha N' + \beta E_\gamma(N'))] = \\ &= \sum_{N'=0}^{\infty} \sum_{N'_1, \dots, N'_h, \dots, \sum_h N'_h = N'} \exp[-(\alpha \sum_h N'_h + \beta \sum_h N'_h E_h)] = \\ &= \sum_{N'=0}^{\infty} \sum_{N'_1, \dots, N'_h, \dots, \sum_h N'_h = N'} \Pi_h [\exp(-(\alpha + \beta E_h))]^{N'_h} \end{aligned} \quad [16.6.b]$$

Es fácil ver que [16.6.b] puede, a su vez, reescribirse así (para fermiones y bosones):

$$\begin{aligned} Q &= \left(\sum_{N'_1} [\exp(-(\alpha + \beta E_1))]^{N'_1} \right) \dots \left(\sum_{N'_h} [\exp(-(\alpha + \beta E_h))]^{N'_h} \right) \dots = \\ &= \Pi_h \sum_{N'_h} [\exp(-(\alpha + \beta E_h))]^{N'_h} \end{aligned} \quad [16.6.c]$$

El símbolo Π indica producto. Nótese que el factor de degeneración g_h , que necesitaremos, ya va implícito en Π_h : a cada g_h pueden corresponder tantos estados monopar-

³ Véase [1.7.5] y el argumento para justificar dicha ecuación, expuesto en la sección 1.7.

ticulares con la misma energía como indica g_h . Para fermiones, y puesto que $N'_h = 0, 1$, se tiene

$$\sum_{N'_h} [\exp(-(\alpha + \beta E_h))]^{N'_h} = 1 + \exp(-(\alpha + \beta E_h)) \quad [16.6.d]$$

Para bosones, hay que sumar una serie geométrica:

$$\sum_{N'_h=0}^{\infty} [\exp(-(\alpha + \beta E_h))]^{N'_h} = [1 - \exp(-(\alpha + \beta E_h))]^{-1} \quad [16.6.e]$$

Tomando logaritmos neperianos en [16.6.c], haciendo explícito el factor de degeneración y utilizando [16.6.d-e], podemos escribir

$$\ln Q = -\sum_h g_h \ln [1 - \exp(-(\alpha + \beta E_h))] \quad , \quad \text{bosones} \quad [16.6.f]$$

$$\ln Q = \sum_h g_h \ln [1 + \exp(-(\alpha + \beta E_h))] \quad , \quad \text{fermiones} \quad [16.6.g]$$

La ecuación [16.6.g] (usando [16.6.g]), para fermiones, implica

$$\begin{aligned} N &= \exp(-\alpha) \frac{\partial}{\partial(\exp(-\alpha))} \sum_h g_h \ln [1 + \exp(-\alpha) \exp(-\beta E_h)] = \\ &= \sum_h \frac{g_h}{\exp(\alpha + \beta E_h) + 1} \end{aligned} \quad [16.6.h]$$

que coincide con [16.1.5] cuando $N_h = N_{h, \text{máx}}$ está dado por [16.3.12]. La justificación de [16.1.5] para bosones (usando [16.4.10]) es totalmente similar. La ecuación [16.6.8], utilizando [16.6.g] para fermiones, da

$$E_T = -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_h g_h \ln [1 + \exp(-\alpha) \exp(-\beta E_h)] = \sum_h \frac{g_h E_h}{\exp(\alpha + \beta E_h) + 1}$$

que coincide con [16.1.6] con $N_h = N_{h, \text{máx}}$ (dada en [16.3.12]), y análogamente para bosones.

EJERCICIOS

16.1. Comprobar que [16.2.9] generan un máximo.

16.2. Comprobar que [16.3.12] y [16.4.10] dan lugar a máximos para fermiones y bosones, respectivamente.

16.3. Justificar que [16.1.8] también es válida para la estadística cuántica de Fermi-Dirac.

16.4. Se consideran tres niveles de energía E_1 , E_2 y E_3 con factores de degeneración $g_1 = 4$, $g_2 = 3$ y $g_3 = 2$, respectivamente. Hay $N = 5$ partículas microscópicas idénticas, que se distribuyen con los siguientes números de ocupación: $N = 1$ (en E_1), $N_2 = 2$ (en E_2), $N_3 = 2$ (en E_3). Enumerar todas las posibles configuraciones y calcular las correspondientes probabilidades termodinámicas si las partículas son: *a*) fermiones, *b*) bosones.

16.5. Se considera ${}^4\text{He}$ a bajas temperaturas ($T \approx 10 \text{ }^\circ\text{K}$) para una densidad $N/V \approx 10^{22}$ átomos/cm³. Evaluar la longitud de onda de De Broglie media asociada a un átomo y compararla con la separación media entre átomos. ¿Qué cabría esperar acerca de la importancia de los efectos cuánticos?

16.6. Se considera un sistema de N moléculas (fijas en el espacio o cuyo movimiento se omite) en equilibrio termodinámico. Cada una se representa por un momento magnético $\boldsymbol{\mu}$, de magnitud determinada, μ , que puede tener cualquier orientación. El sistema se encuentra en un campo magnético exterior fijado, homogéneo y constante, \mathbf{B} . La energía de cada molécula en el campo es $-\boldsymbol{\mu}\mathbf{B} \cos \theta$ ($B = |\mathbf{B}|$), siendo θ el ángulo formado por \mathbf{B} y $\boldsymbol{\mu}$. Trátese el sistema como formado por entidades distinguibles, es decir, mediante la estadística clásica de Maxwell-Boltzmann, con factor de degeneración proporcional al ángulo sólido $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ en el que puede encontrarse $\boldsymbol{\mu}$. Hallar, en el equilibrio termodinámico: *a*) el número de moléculas $dN(\Omega)$ con momento magnético en el ángulo sólido $d\Omega$, y *b*) el valor medio (M) de $\mu \cos \theta$, que, físicamente, representa la imanación del sistema según el campo aplicado \mathbf{B} .

Nota: esto caracteriza la llamada teoría de Langevin del paramagnetismo.

16.7. El antineutrino electrónico $\bar{\nu}_e$ es, como se verá con más detalle en los capítulos 39-42, una partícula eléctricamente neutra cuyo espín es $1/2$ y cuya masa en reposo supondremos nula (actualmente se acepta que es no nula, pero muy pequeña). Si hay un sistema de tales partículas en equilibrio termodinámico, ¿qué estadística cuántica debe aplicarse?

17

Aplicaciones de las estadísticas cuánticas

Luis García Gonzalo
Ramón F. Álvarez-Estrada

17.1. GAS IDEAL CLÁSICO MONOATÓMICO

Como aplicación de la estadística de Boltzmann (sección 16.2), trataremos el gas formado por N átomos distinguibles y libres, cada uno de los cuales puede asimilarse a una partícula puntual clásica. Un átomo genérico del gas tiene velocidad \mathbf{v} , masa m y energía $E = m\mathbf{v}^2/2$. En general, es claro que \mathbf{v} y E varían de forma prácticamente continua y sin límite en sus respectivas magnitudes. Podemos imaginar, en el espacio en el que varía \mathbf{v} , tres ejes de coordenadas según sus componentes v_x, v_y, v_z . Consideremos dos esferas en el espacio de las velocidades \mathbf{v} , con centro el origen $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ y correspondientes a E y $E + dE$, donde dE es infinitesimal. Es claro que esas dos esferas tienen radios v y $v + dv$, con $E = mv^2/2$ y $dE = mv dv$. El volumen comprendido entre ambas esferas es $4\pi v^2 dv$. El primer problema consistirá en la evaluación del factor de degeneración, g_h , en el caso actual en el que E_h se sustituye por E , que varía de forma continua. Así, de manera natural, g_h se sustituirá por un factor g que será el número de estados con energía entre E y $E + dE$. g será proporcional al volumen comprendido entre las dos esferas mencionadas, y, por tanto

$$g = \sigma 4\pi v^2 dv \quad [17.1.1]$$

donde σ es una constante de proporcionalidad independiente de v . En vez de N_h , máx, estudiaremos el número de partículas dN , que, en el equilibrio termodinámico, tienen energías entre E y $E + dE$. Así pues, el análogo de [16.2.12] es

$$dN = N\sigma \frac{4\pi v^2 dv \exp[-mv^2/(2k_B T)]}{Z} \quad [17.1.2]$$

donde se ha hecho uso directamente de [16.1.8]. Ahora, la función de partición clásica correspondiente a [16.2.13] es

$$Z = \sigma \int_0^\infty 4\pi v^2 dv \exp[-mv^2/(2k_B T)] = \sigma \left(\frac{2\pi k_B T}{m} \right)^{3/2} \quad [17.1.3]$$

La evaluación de [17.1.3] se da en el ejercicio 17.1. Nótese que la distribución [17.1.2] satisface el requisito

$$\int_0^{\infty} dN = N \quad [17.1.4]$$

que es análogo a [16.1.5]. Sustituyendo Z por su valor, dado a la derecha de [17.1.3], σ se cancela y queda

$$dN = N(m/2\pi k_B T)^{3/2} 4\pi v^2 dv \exp[-mv^2/(2k_B T)] \quad [17.1.5]$$

que es la conocida ley de distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann.

Los neutrones térmicos producidos en los reactores nucleares (véase, por ejemplo, el apéndice F) constituyen a la temperatura ambiente ($T \sim 300$ K) un excelente ejemplo de aplicación de la estadística clásica de Maxwell-Boltzmann, por verificarse las condiciones discutidas en la sección 16.5. Otros ejemplos, también para $T \sim 300$ K, los proporcionan los gases nobles (He, Ne, Ar, Kr y Xe) y otros gases monoatómicos. Para una discusión más amplia véase¹.

17.2. GAS DE FOTONES EN EQUILIBRIO TERMODINÁMICO DENTRO DE UNA CAVIDAD

Consideremos radiación electromagnética, es decir, un gas de fotones, en el interior de una cavidad de volumen macroscópico V , en equilibrio termodinámico a temperatura absoluta T . Dicho gas debe tratarse como un sistema de bosones cuyo número total no está fijado o determinado externamente, así que $\alpha = 0$. Aplicaremos directamente [16.4.10], cuando la energía E_h de un fotón individual varía de forma prácticamente continua, estando entonces representada por E . También haremos uso directo de [16.1.8]. Por tanto, en el equilibrio termodinámico, el número de fotones con energía individual comprendida en el intervalo E a $E + dE$ es

$$dN = g \frac{1}{\exp(E/k_B T) - 1} \quad [17.2.1]$$

g representa, ahora, el número total de estados posibles distintos para un fotón con energía individual comprendida en dicho intervalo. Para el cálculo de g , no usaremos la

¹ J. Aguilar Peris, *Termodinámica y Mecánica Estadística*, Saber, Valencia, 1962. D. McQuarrie, *Statistical Thermodynamics*, Harper and Row, Nueva York, 1973.

descripción mecano-cuántica del fotón del capítulo 15 (aunque puede hacerse). Por brevedad, utilizaremos el análisis de la sección 1.5, que revisaremos rápidamente para acomodarlo al concepto de fotón.

Imaginemos que el fotón está en una caja rectangular de aristas L_x, L_y, L_z como la representada en la figura 1.6. Puede aceptarse que dicho fotón, cuando tiene el vector de onda (k_x, k_y, k_z) lleva asociado el campo eléctrico (E_x, E_y, E_z) dado en [1.5.9.a-c]. Por tanto, según se mostró en la sección 1.5, su frecuencia ν y su longitud de onda vienen dadas por [1.5.11], en términos de los enteros n_x, n_y, n_z . Cada terna (n_x, n_y, n_z) determina, así, un estado distinto para el fotón en la cavidad. Imaginemos un sistema de coordenadas tridimensional en cuyos ejes representamos los valores de n_x, n_y, n_z : cada terna de valores enteros no negativos para éstos se representa por un punto, tal como muestra la figura 1.7. El número de estados posibles distintos para un fotón con energía individual entre $E = h\nu$ y $E + dE$, con $dE = h d\nu$, es el dado en [1.5.14] multiplicando por el volumen V de la cavidad. En términos de E , se tiene:

$$g = \frac{8\pi V}{c^3 h^3} E^2 dE \quad [17.2.2]$$

Según se anticipó en la sección 1.5, [17.2.2] incluye un factor 2, correspondiente a las dos posibles direcciones de polarización ortogonales e independientes (para n_x, n_y, n_z dados). Que esas direcciones sean 2 y no 3 viene de la restricción [1.5.8]. Todo ello es enteramente consistente con que las helicidades físicamente permitidas para el fotón son 2 y no 3, debido a la restricción [15.7.12] (véase también el ejercicio 15.7). Por tanto:

$$dN = \frac{8\pi V}{c^3} \frac{E^2}{h^3} \frac{dE}{\exp(E/k_B T) - 1} \quad [17.2.3]$$

La energía *total* asociada a los dN fotones, cada uno de los cuales tiene su energía comprendida entre E y $E + dE$, es

$$E dN = \frac{8\pi V}{c^3} \frac{E^2}{h^3} \frac{dE}{\exp(E/k_B T) - 1} \quad [17.2.4]$$

Sea $\rho(\nu, T) d\nu$ la energía total, por unidad de volumen, asociada a los fotones con frecuencia individual entre ν y $\nu + d\nu$. Dado que $E dN = V\rho(\nu, T) d\nu$, se obtiene la fórmula de Planck:

$$\rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 \frac{h\nu}{\exp(h\nu/k_B T) - 1} d\nu \quad [17.2.5]$$

La energía total del gas de fotones puede obtenerse a partir de [16.1.6] o, equivalentemente, por medio de [17.2.5]. El resultado es (comparar con el ejercicio 1.5 y aplicar la ayuda del ejercicio 17.7):

$$E_T = V \int_0^\infty dv \rho(v, T) = V \frac{\pi^2 (k_B T)^4}{15 (\hbar c)^3} \quad [17.2.6]$$

que puede considerarse como una ecuación de estado.

Como se discutió en las secciones 1.6 y 1.7, la fórmula de Planck es enormemente precisa al compararla con resultados experimentales. A posteriori, esto confirma, en particular, que el número de proyecciones posibles para el espín del fotón es 2 y no 3. Así, la multiplicación de [17.2.5] por el factor 3/2 originaría una nueva fórmula, que estaría en flagrante desacuerdo con el experimento. El número total de fotones en la cavidad, para todas las frecuencias, es

$$N = \frac{8\pi V}{c^3} \int_0^\infty \frac{v^2 dv}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1} \quad [17.2.7]$$

Como ya se ha comentado, N no es una ligadura del tipo [16.1.5] para un gas de fotones determinado (con un volumen V dado). Por el contrario, N varía al variar T , como [17.2.7] indica. Puede justificarse que (véase²):

$$N = 0.244 \left(\frac{T}{\hbar c}\right)^3 V \quad [17.2.8]$$

Merece la pena comentar que la deducción de la fórmula de Planck, que acabamos de exponer, difiere apreciablemente de la presentada en la sección 1.7, aunque ambas están, ciertamente, muy relacionadas. Así, en la sección 1.7:

- i) No se utilizan corpúsculos de radiación (fotones) en el interior de la cavidad, sino osciladores asociados a las paredes de la misma.
- ii) No se maximizó la probabilidad termodinámica.
- iii) No se introdujo la ligadura [16.1.6] ni, por tanto, el multiplicador β .

El hecho de que se haya llegado en la sección 1.7 al mismo resultado que en la presente puede hacer pensar que es debido a que:

² L. D. Landau y E. Lifchitz, *Statistical Physics*, 3.^a edición, Parte I, Pergamon Press, Oxford, 1980.

- a) Por ser el número de osciladores (o de fotones) muy grande, la práctica totalidad de las configuraciones físicamente importantes se reduce a la que genera la probabilidad termodinámica máxima.
- b) Se ha impuesto la validez de [1.7.11].

17.3. GAS DE FONONES: CALOR ESPECÍFICO DE UN SÓLIDO CRISTALINO

En un sólido cristalino, los iones (o moléculas) están ordenados regularmente formando una red, efectuando únicamente movimientos oscilatorios alrededor de la posición de equilibrio. Estas oscilaciones influyen en los átomos vecinos, estableciéndose vibraciones colectivas, ondas estacionarias semejantes a las ondas electromagnéticas en una cavidad. La velocidad con que se propagan es la velocidad del sonido en el sólido.

Los fonones son cuantos del campo de ondas sonoras en el sólido. Matemáticamente, aparecen de la misma forma que los fotones en la cuantización del campo electromagnético. Así como un fotón en una cavidad corresponde a un vector de onda \mathbf{k} dado, un fonón corresponde a un modo de vibración normal de la red cristalina. Clásicamente, cada modo normal es una onda de distorsión de los planos de la red: una onda sonora. El hamiltoniano para el sólido puede aproximarse a una suma de términos, cada uno representando un oscilador armónico, correspondientes a los modos normales de vibración. En la teoría cuántica estos modos normales dan lugar a cuantos llamados fonones.

De todo lo anterior se infiere que el estado cuántico de una red cristalina cerca del estado fundamental puede especificarse mediante el dato de todos los fonones presentes. Por tanto, a temperaturas bajas, un sólido puede considerarse como un gas de fonones que no interactúan entre sí.

Al ser cada fonón un cuanto de un oscilador armónico, tiene una frecuencia característica ν_i y una energía $h\nu_i$. El estado de la red en que el fonón está presente corresponde a una onda sonora de la forma

$$\boldsymbol{\varepsilon} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$

donde $k = |\mathbf{k}|$ verifica

$$k = \frac{\omega}{c_s} = \frac{2\pi\nu}{c_s}$$

siendo c_s la velocidad del sonido y donde hemos supuesto, por simplicidad, que c_s es independiente del vector de polarización $\boldsymbol{\varepsilon}$. Al contrario que en el campo electromagnético, el vector $\boldsymbol{\varepsilon}$ no es necesariamente perpendicular a \mathbf{k} . Hay, por tanto, tres direcciones independientes de propagación, correspondientes a un modo longitudinal de compresión y dos modos transversales.

Los fonones correspondientes a un cierto vector de onda \mathbf{k} son idénticos y no hay límite en el número de fonones en un estado, ya que un estado excitado de un oscilador puede contener un número cualquiera de cuantos de energía. Por tanto, obedecen la estadística de Bose-Einstein. Además, no hay conservación del número total de fonones en el sistema, ya que puede aumentar o disminuir según aumente o disminuya la energía de vibración. Por tanto, tenemos una situación similar a la encontrada en el apartado anterior para el gas de fotones. En consecuencia, se tiene $\alpha = 0$ también para el sistema de fonones en equilibrio termodinámico.

Si un sólido tiene N átomos, tendrá $3N$ modos normales (número de grados de libertad). Por tanto, habrá $3N$ tipos diferentes de fonones con frecuencias características $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_{3N}$. Los valores de estas frecuencias dependerán de la naturaleza de la red. Un modelo sencillo es debido a Debye, que supone, a efectos de hallar las frecuencias, que el sólido es aproximadamente un medio continuo elástico de volumen V . Las frecuencias características son, entonces, las $3N$ frecuencias normales más bajas de tal medio elástico.

Para encontrar el número de modos normales con frecuencias entre ν y $\nu + d\nu$, supondremos que el sólido tiene forma de paralelepípedo con aristas L_x, L_y, L_z y que las ondas sonoras verifican condiciones de contorno periódicas en las caras. En consecuencia, las componentes de vector de onda \mathbf{k} son de la forma $k_x = (2\pi/L_x)n_x, k_y = (2\pi/L_y)n_y, k_z = (2\pi/L_z)n_z$, siendo n_x, n_y, n_z números enteros. Mediante un razonamiento análogo al de la sección 1.5, se obtiene para el número de modos normales $g = f(\nu) d\nu$ con frecuencias entre ν y $\nu + d\nu$ la expresión [1.5.15] multiplicada por el volumen y por un factor $3/2$ que proviene del hecho de que el número de direcciones de propagación de la onda es 3, en lugar de 2, como ocurría con el campo electromagnético. Por tanto,

$$g = f(\nu) d\nu = V \frac{12\pi\nu^2}{c_s^3} d\nu \quad [17.3.1]$$

La frecuencia máxima ν_m se obtiene de la condición

$$\int_0^{\nu_m} f(\nu) d\nu = 3N$$

resultando ser:

$$\nu_m = c_s \left(\frac{3}{4\pi} \frac{N}{V} \right)^{1/3} \quad [17.3.2]$$

La longitud de onda correspondiente a ν_m es

$$\lambda_m = \frac{c_s}{\nu_m} = \left(\frac{4\pi}{3} \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

que es del orden de la distancia entre partículas. El modelo de Debye parece, por tanto, razonable, ya que una onda de desplazamientos de iones carece de sentido para longitudes de onda menores que la distancia entre ellos.

Al obedecer el gas de fonones la estadística de Bose-Einstein y no haber conservación del número total de fonones, el número de fonones dN con energía individual comprendida en el intervalo E y $E + dE$ viene dado por la expresión [17.2.1], estando g determinado por [17.3.1]. Por tanto,

$$dN = \frac{12\pi V}{c_s^3} \frac{v^2 dv}{e^{hv/k_B T} - 1} \quad [17.3.3]$$

La energía vibracional del sólido en el intervalo de frecuencia dv es

$$E dN = hv dN = \frac{12\pi Vh}{c_s^3} \frac{v^3 dv}{e^{hv/k_B T} - 1} \quad [17.3.4]$$

y la energía vibracional total:

$$E_T = \int_0^{v_m} hv dN = \frac{12\pi Vh^2}{c_s^3} \int_0^{v_m} \frac{v^3 dv}{e^{hv/k_B T} - 1} \quad [17.3.5]$$

El calor específico a volumen constante es, por tanto,

$$C_V = \left(\frac{\partial E_T}{\partial T} \right)_V = \frac{12\pi Vh^2}{c_s^3 k_B T^2} \int_0^{v_m} \frac{v^4 e^{hv/k_B T}}{e^{hv/k_B T} - 1} dv \quad [17.3.6]$$

Si se define la temperatura de Debye como

$$k_B T_D \equiv hv_m = \hbar c_s \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} \quad [17.3.7]$$

y hacemos el cambio de variable de integración en [17.3.6] a $x = hv/k_B T$, se obtiene:

$$\frac{C_V}{Nk_B} = 9 \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \int_0^{T_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad [17.3.8]$$

El comportamiento de C_V para temperaturas altas y bajas es (ejercicio 17.7):

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \begin{cases} 3 \left[1 - \frac{1}{20} \left(\frac{T_D}{T} \right)^2 + \dots \right] & (T \gg T_D) \\ \frac{12\pi^4}{5} \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 + O(e^{-T_D/T}) & (T \ll T_D) \end{cases} \quad [17.3.9]$$

En la figura 17.1 se representa C_V en función de T . Los valores obtenidos coinciden con los resultados experimentales.

A temperaturas muy bajas, C_V tiende a cero como T^3 , verificando la tercera ley de la Termodinámica. Cuando la temperatura es mucho mayor que la temperatura de Debye, la red se comporta clásicamente, al ser $C_V \approx 3N/k_B$. Esta expresión se conoce como ley de Dulong-Petit, y es una consecuencia del principio de equipartición de la energía, según el cual la energía por grado de libertad vibracional será $k_B T$, por lo que al tener la red $3N$ grados de libertad, $E_T = 3Nk_B T$. Para la mayoría de los sólidos, la temperatura de Debye es del orden de 200 K. Por tanto, la ley de Dulong-Petit se verifica a temperatura ambiente.

En esta sección se ha considerado sólo la contribución al calor específico de un sólido debida a vibraciones de la red. En el apartado 17.4 se considerará la contribución debida a los electrones libres.

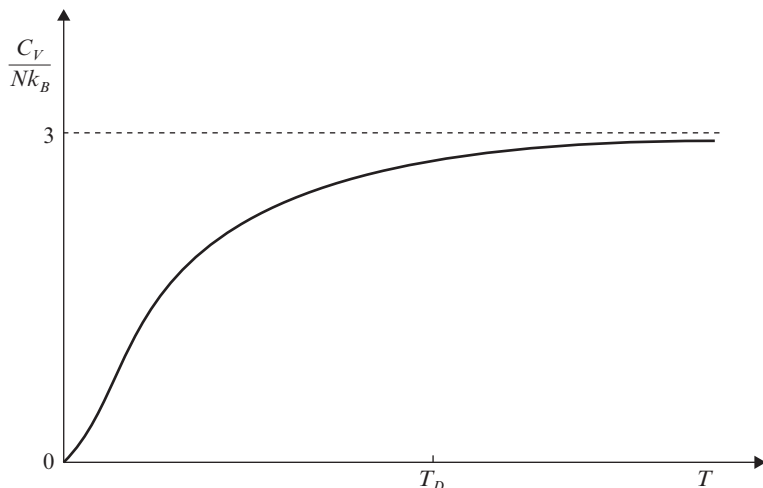


Figura 17.1. Calor específico de una red cristalina según la teoría de Debye.

17.4. GAS IDEAL DE FERMI

La ecuación de estado para un sistema macroscópico en equilibrio termodinámico puede escribirse en términos de la gran función de partición Q mediante la expresión

[16.6.9]. Un gas ideal de fermiones se define como un sistema de partículas idénticas, sin interacción mutua, que obedecen la estadística de Fermi-Dirac. Tal como se demostró en la cuestión complementaria 16.6, la gran función de partición para un gas ideal de Fermi viene dada por la expresión [16.6.g], mientras la fugacidad, $\exp(-\alpha)$, se determina de la relación [16.1.5], donde el número de ocupación promedio $N_{\bar{h}} = N_{\bar{h}, \text{máx}}$ está dado por [16.3.12].

Supongamos que el gas se encuentra encerrado en una caja cúbica de volumen V . En el límite termodinámico, $V \rightarrow \infty$, el espectro de energías es continuo y el número de estados g con energía comprendida entre E y $E + dE$ es, de acuerdo con [10.2.12],

$$g = \frac{4\pi V}{h^3} (2m^3)^{1/2} E^{1/2} dE \quad [17.4.1]$$

con lo que las sumas en [16.6.g] y [16.1.5] pasan a ser integrales en E :

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{1}{V} \ln Q = \frac{4\pi}{h^3} (2m^3)^{1/2} \int_0^\infty E^{1/2} \ln[1 + e^{-(\alpha + \beta E)}] dE \quad [17.4.2]$$

$$\frac{N}{V} = \frac{4\pi}{h^3} (2m^3)^{1/2} \int_0^\infty \frac{E^{1/2} dE}{e^{\alpha + \beta E} + 1} \quad [17.4.3]$$

donde $\beta = 1/k_B T$. La energía total del gas, de acuerdo con [16.1.6], tendrá la forma:

$$\frac{E_T}{V} = \frac{4\pi}{h^3} (2m^3)^{1/2} \int_0^\infty \frac{E^{3/2} dE}{e^{\alpha + \beta E} + 1} \quad [17.4.4]$$

A efectos del cálculo de las expresiones [17.4.2-4], se ha supuesto, por sencillez, que las partículas no tienen espín. Para un sistema real de fermiones con espín semientero s , la expresión para el número de estados g [17.4.1] deberá multiplicarse por $2s + 1$, y lo mismo ocurrirá con las expresiones [17.4.2-4].

Para hallar la ecuación de estado y expresar E_T en función de N , V y T , necesitamos despejar α en la ecuación [17.4.3]. Este problema es muy complicado y sólo puede resolverse analíticamente en ciertos límites, como veremos más adelante. Puede, sin embargo, obtenerse fácilmente una relación entre la energía y la presión mediante una integración por partes en [17.4.4]:

$$\begin{aligned} E_T &= \frac{4\pi V}{h^3} (2m^3)^{1/2} \int_0^\infty \frac{E^{3/2} e^{-(\alpha + \beta E)}}{1 + e^{-(\alpha + \beta E)}} dE = \\ &= \frac{4\pi V}{h^3} (2m^3)^{1/2} \frac{3}{2} \frac{1}{\beta} \int_0^\infty E^{1/2} \ln[1 + e^{-(\alpha + \beta E)}] dE \end{aligned}$$

Comparando la última expresión con [17.4.2], se encuentra que

$$E_T = \frac{3}{2} PV \quad [17.4.5]$$

Esta relación se verifica igualmente para un gas de Boltzmann.

Para obtener la ecuación de estado, es conveniente realizar en las expresiones [17.4.2-3] el cambio de variable de integración a $x^2 = \beta E$, con lo que pueden escribirse en la forma:

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{1}{\lambda^3} f_{5/2}(z) \quad [17.4.6]$$

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda^3} f_{3/2}(z) \quad [17.4.7]$$

donde

$$\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2/mk_B T} \quad [17.4.8]$$

es del orden de la longitud de onda de de Broglie media de un fermión del gas, $z \equiv e^{-\alpha}$ es la fugacidad y

$$f_{5/2}(z) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty x^2 \ln(1 + ze^{-x^2}) dx \quad [17.4.9]$$

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{z^{-1}e^{x^2} + 1} = z \frac{\partial}{\partial z} f_{5/2}(z) \quad [17.4.10]$$

De la expresión [17.4.10] es inmediato que $f_{3/2}(z)$ es una función monótona creciente de z . El comportamiento de $f_{3/2}(z)$ se estudia en la cuestión complementaria 17.1 y su gráfica se representa en la figura 17.2. Para cualquier valor positivo de $\lambda^3 N/V$, el valor correspondiente de z queda determinado por la ecuación [17.4.7] y puede obtenerse del gráfico. Se observa, por tanto, que z crece monótonamente cuando $\lambda^3 N/V$ aumenta. En particular, fijado N/V , la fugacidad aumenta cuando la temperatura disminuye. En la cuestión complementaria 17.1 se hallan los comportamientos asintóticos de $f_{3/2}(z)$. Para z pequeño ($z \rightarrow 0$), se obtiene el desarrollo en serie de potencias:

$$f_{3/2}(z) = z - \frac{z^2}{2^{3/2}} + \frac{z^3}{3^{3/2}} - \frac{z^4}{4^{3/2}} + \dots \quad [17.4.11]$$

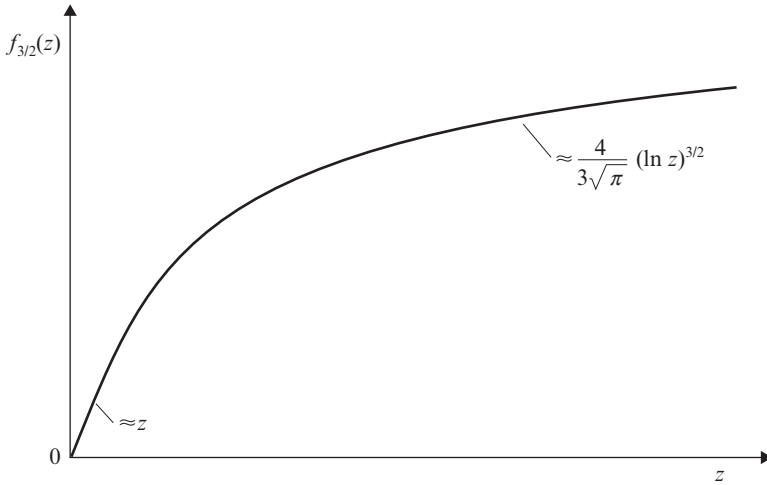


Figura 17.2. La función $f_{3/2}(z)$.

mientras que para z grande ($z \rightarrow \infty$), la forma asintótica es:

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left[(\ln z)^{3/2} + \frac{\pi^2}{8} (\ln z)^{-1/2} + \dots \right] + O(z^{-1}) \quad [17.4.12]$$

A continuación pasamos a estudiar las consecuencias físicas en ambos límites.

Temperaturas altas y densidades bajas ($\lambda^3 N/V \ll 1$)

Cuando $\lambda^3 N/V \ll 1$, la separación promedio entre partículas $(V/N)^{1/3}$ es mucho mayor que la longitud de onda λ , por lo que es de esperar que los efectos cuánticos sean despreciables. De [17.4.7] y [17.4.11], obtenemos

$$\lambda^3 \frac{N}{V} = z - \frac{z^2}{2^{3/2}} + \dots$$

que puede resolverse para z , resultando

$$z = \lambda^3 \frac{N}{V} + \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\lambda^3 \frac{N}{V} \right)^2 + \dots \quad [17.4.13]$$

El número promedio de ocupación N_h cuando $\lambda^3 \rightarrow 0$ ($T \rightarrow \infty$) será, de acuerdo con [16.3.12],

$$N_h \approx g_h z e^{-E_h/k_B T} \quad [17.4.14]$$

Sustituyendo g_h por la expresión [17.4.1], z por $\lambda^3 N/V$ (ecuación [17.4.13] al orden más bajo) y reemplazando E por $mv^2/2$, se obtiene la ley de distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann [17.1.5]. Por tanto, como era de esperar, el gas de Fermi se reduce al de Boltzmann cuando $T \rightarrow \infty$. De la comparación de [17.1.1] y [17.4.1], se obtiene que $\sigma = Vm^3/h^3$, y sustituyendo en [17.1.3], la función de partición clásica Z pasa a ser:

$$Z = \frac{V}{\lambda^3} \quad [17.4.15]$$

De la relación [17.4.10] entre $f_{3/2}(z)$ y $f_{5/2}(z)$ y el desarrollo [17.4.11], es inmediato que

$$f_{5/2}(z) = z - \frac{z^2}{2^{5/2}} + \frac{z^3}{3^{5/2}} - \frac{z^4}{4^{5/2}} + \dots \quad [17.4.16]$$

con lo que, sustituyendo z por el desarrollo [17.4.13], la ecuación de estado [17.4.6] pasa a ser

$$PV = Nk_B T \left(1 + \frac{1}{2^{5/2}} \frac{\lambda^3 N}{V} + \dots \right) \quad [17.4.17]$$

y, de la relación [17.4.5], la energía interna es:

$$E_T = \frac{3}{2} Nk_B \left(1 + \frac{1}{2^{5/2}} \frac{\lambda^3 N}{V} + \dots \right) \quad [17.4.18]$$

Tenemos, por tanto, para el gas de fermiones, una presión (o energía) mayor que en el caso clásico (véase ejercicio 17.2) para la misma temperatura, debido al principio de exclusión de Pauli. De [17.4.18], es inmediato obtener el calor específico a volumen constante:

$$C_V = \frac{3}{2} Nk_B \left(1 - \frac{3}{2^{7/2}} \frac{\lambda^3 N}{V} - \dots \right) \quad [17.4.19]$$

que tiende a una constante cuando $T \rightarrow \infty$ (límite clásico).

Temperaturas bajas y densidades altas ($\lambda^3 N/V \gg 1$)

En este caso, la longitud de onda de de Broglie media es mucho mayor que la separación entre partículas. Es, por tanto, de esperar que los efectos cuánticos, en particular los efectos derivados del principio de exclusión de Pauli, sean muy importantes.

Para valores de la temperatura cercanos al cero absoluto se obtiene, de [17.4.7-8] y [17.4.12], que

$$\frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{3/2} \approx \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\ln z)^{3/2}$$

y de aquí:

$$z \approx e^{\beta\epsilon_F} \tag{17.4.20}$$

donde

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} \tag{17.4.21}$$

A la energía ϵ_F se la conoce como energía de Fermi. Para ver su significado, calcularemos la expresión del número de ocupación promedio [16.3.12] cerca del cero absoluto:

$$\frac{N_h}{g_h} \approx \frac{1}{e^{(E_h - \epsilon_F)/k_B T} + 1} \tag{17.4.22}$$

Si $E_h < \epsilon_F$, la exponencial en el denominador se anula cuando $T \rightarrow 0$ y, por tanto, $N_h = g_h$. En caso contrario, $N_h = 0$. La interpretación es inmediata: debido al principio de exclusión de Pauli, no podemos tener dos partículas en el mismo estado. Por tanto, en el estado fundamental del sistema (cero absoluto de temperatura), las partículas ocupan los niveles de energía más bajos y los llenan hasta un cierto ϵ_F . Consecuentemente, ϵ_F es el nivel de una energía por debajo del cual hay exactamente N estados. Aplicando esta condición se puede hallar la energía de Fermi ϵ_F de una forma alternativa (ejercicio 17.9).

Usando la definición de ϵ_F [17.4.21] y el desarrollo asintótico [17.4.12], la ecuación para la fugacidad [17.4.7] pasa a escribirse, para temperaturas bajas y densidades altas, en la forma:

$$\left(\frac{\epsilon_F}{k_B T} \right)^{3/2} = (\ln z)^{3/2} + \frac{\pi^2}{8} (\ln z)^{-1/2} + \dots + O(z^{-1}) \tag{17.4.23}$$

de donde se obtiene para el potencial químico $\mu \equiv -\alpha k_B T \equiv k_B T \ln z$ el siguiente desarrollo en el parámetro $k_B T / \varepsilon_F$ (ejercicio 17.10):

$$\mu = \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right] \quad [17.4.24]$$

De este desarrollo es inmediato que si definimos la temperatura de Fermi T_F como

$$k_B T_F = \varepsilon_F \quad [17.4.25]$$

la aproximación de baja temperatura y alta densidad equivale a $T \ll T_F$ (nótese que T_F depende de la densidad).

El número de ocupación promedio es (expresión 16.3.12):

$$\frac{N_h}{g_h} = \frac{1}{e^{(E_h - \mu)/k_B T} + 1} \quad [17.4.26]$$

donde el potencial químico μ viene dado por el desarrollo [17.4.24]. En la figura 17.3 se representa el número de ocupación promedio en función de la energía para el límite del cero absoluto y para dos temperaturas finitas.

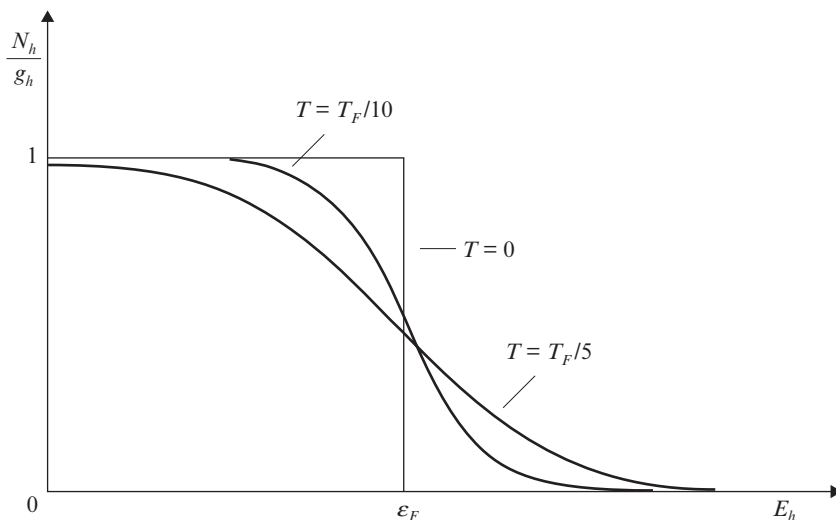


Figura 17.3. Número de ocupación promedio de un gas ideal de Fermi.

Para hallar la energía del gas, se integra por partes la expresión [17.4.4], obteniéndose

$$\begin{aligned}
 E_T &= \frac{8\pi V}{5h^3} (2m^3)^{1/2} \int_0^\infty E^{5/2} \left[-\frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{1}{e^{\alpha+\beta E} + 1} \right) \right] dE = \\
 &= \frac{8\pi\beta V}{5h^3} (2m^3)^{1/2} \int_0^\infty \frac{E^{5/2} e^{\alpha+\beta E}}{(e^{\alpha+\beta E} + 1)^2} dE
 \end{aligned}
 \tag{17.4.27}$$

De la observación de la figura 17.3 se deduce que la derivada

$$\frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{N_h}{g_h} \right) = \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{1}{e^{\alpha+\beta E} + 1} \right)$$

es una función muy picada en una pequeña región alrededor de $E = \varepsilon_F$, anulándose en el resto del dominio. En el cero absoluto de temperatura, es una función δ de Dirac. Por tanto, la integral en [17.4.27] puede calcularse mediante un desarrollo del factor $E^{5/2}$ alrededor de ε_F . El método es similar al que se utilizó para hallar la forma asintótica [17.4.12], obteniéndose el desarrollo asintótico para E_T :

$$E_T = \frac{3}{5} N\varepsilon_F \left[1 + \frac{5}{12} \pi^2 \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right]
 \tag{17.4.28}$$

El primer término corresponde al estado de energía fundamental (energía en el cero absoluto) para un gas de Fermi con una densidad dada y puede calcularse directamente como la suma de las energías de los niveles ocupados en el cero absoluto (ejercicio 17.9). Los siguientes términos son las correcciones debidas a que la temperatura es finita.

El calor específico a volumen constante para temperaturas bajas y densidades altas se obtiene, de forma inmediata, del desarrollo asintótico [17.4.28]:

$$\frac{C_V}{Nk_B} \approx \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B T}{\varepsilon_F}
 \tag{17.4.29}$$

Por tanto, se anula cuando $T \rightarrow 0$, verificando la tercera ley de la Termodinámica. En la figura 17.4 se representa el calor específico en función de la temperatura.

De las expresiones [17.4.5] y [17.4.28] se obtiene la ecuación de estado:

$$P = \frac{2}{5} \frac{N\varepsilon_F}{V} \left[1 + \frac{5}{12} \pi^2 \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right]
 \tag{17.4.30}$$

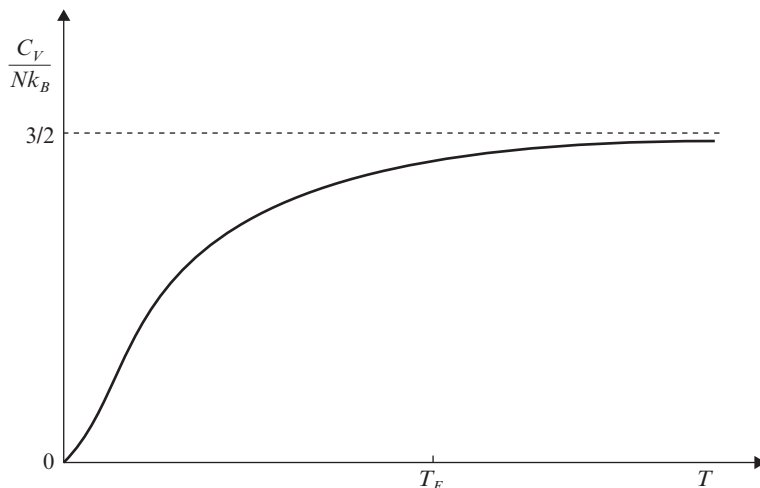


Figura 17.4. Calor específico de un gas ideal de Fermi.

La presión es, por tanto, distinta de cero incluso en el cero absoluto de temperatura. Es una consecuencia del principio de exclusión de Pauli: sólo una partícula puede tener momento cero, con lo que las otras tienen momento finito, dando lugar a una presión no nula, que se conoce como presión de punto cero.

Gas de electrones libres

En un sólido cristalino, la mayoría de los electrones atómicos están ligados al núcleo en los puntos de la red. Cuando el sólido es un conductor metálico, los electrones de las últimas capas de los átomos pueden moverse libremente a través del sólido, debido a que la mutua repulsión se cancela con la atracción de los núcleos. Son los llamados electrones de conducción. Podremos considerar, entonces, que estos electrones forman un sistema de partículas libres, excepto en las paredes del metal, donde supondremos que el potencial es infinito. Como el espín del electrón es $1/2$, este «gas de electrones» obedecerá la estadística de Fermi-Dirac, por lo que le podremos aplicar los resultados obtenidos en este apartado, con la única salvedad de que la densidad de estados [17.4.1] deberá multiplicarse por un factor 2, proveniente de que el espín del electrón es $1/2$.

La energía de Fermi vendrá dada por la expresión

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} \quad [17.4.31]$$

donde m_e es la masa del electrón y la diferencia de un factor $2^{2/3}$ con respecto a la expresión [17.4.21] es debida al espín. Aplicando la expresión [17.4.31], se obtiene que la mayo-

ría de los metales tienen temperaturas de Fermi T_F del orden de 10^4 K. Por tanto, excepto a temperaturas muy altas, los electrones de un metal se comportan como un gas de Fermi-Dirac a bajas temperaturas y altas densidades. Consecuentemente, la energía total del sistema, el calor específico a volumen constante y la ecuación de estado vendrán dados por las expresiones [17.4.28-30].

Si comparamos el valor obtenido de la expresión [17.4.29] con el resultado clásico

$$C_V = \frac{3}{2} Nk_B$$

vemos que el resultado cuántico es dos órdenes de magnitud menor a temperaturas ordinarias. Esto explica por qué los electrones libres de un metal no contribuyen significativamente a su capacidad calorífica y ésta viene determinada por las oscilaciones de la red (expresión 17.3.9). Sólo a temperaturas muy bajas la capacidad calorífica debida a los electrones puede compararse con la debida a los fonones.

17.5. GAS IDEAL DE BOSE. CONDENSACIÓN DE BOSE-EINSTEIN

El método para encontrar la ecuación de estado de un gas de bosones (sin espín) es el mismo que aplicamos al caso del gas de fermiones. La gran función de partición vendrá dada por la expresión [16.6.f] y los números de ocupación promedio, por la expresión [16.4.10]. En las sumas que aparecen en las expresiones de la gran función de partición [16.6.f] y del número de partículas [16.1.5], el término correspondiente a $E_h = 0$ diverge cuando $\alpha \rightarrow 0$. Es conveniente, por tanto, separar en dichas expresiones el término correspondiente a $E_h = 0$ y sustituir el resto de términos por integrales en E , como se hizo en el gas de Fermi. Se obtiene, entonces, la siguiente ecuación de estado:

$$\frac{P}{k_B T} = -\frac{4\pi}{h^3} (2m^3)^{1/2} \int_0^\infty E^{1/2} \ln[1 - e^{-(\alpha + \beta E)}] dE - \frac{1}{V} \ln(1 - e^{-\alpha}) \quad [17.5.1]$$

$$\frac{N}{V} = \frac{4\pi}{h^3} (2m^3)^{1/2} \int_0^\infty \frac{E^{1/2} dE}{e^{\alpha + \beta E} - 1} + \frac{1}{V} \frac{1}{e^\alpha - 1} \quad [17.5.2]$$

donde $N_0 = 1/(e^\alpha - 1)$ es el número de ocupación promedio del nivel de energía $E = 0$. En el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, con N/V finito), el segundo sumando en [17.5.2] se anula para valores de α positivos y toma un valor finito N_0/V cuando $\alpha = 0$. (Al contrario que el gas de Fermi, el parámetro α nunca puede tomar valores negativos para un gas de Bose, ya que los números de ocupación no pueden hacerse negativos.)

Al igual que en el gas de Fermi, debemos hallar α a partir de la ecuación [17.5.2] y sustituir en [17.5.1] para estudiar las propiedades de la ecuación de estado del gas. Mediante el cambio de variable de integración a $x^2 = \beta E$, las expresiones [17.5.1-2] pasan a escribirse en la forma

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{1}{V} \ln(1-z) \quad [17.5.3]$$

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} \quad [17.5.4]$$

donde λ viene dado por la expresión [17.4.8], $z \equiv e^{-\alpha}$ es la fugacidad y

$$g_{5/2}(z) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty x^2 \ln(1 - ze^{-x^2}) dx \quad [17.5.5]$$

$$g_{3/2}(z) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{z^{-1}e^{x^2} - 1} = z \frac{\partial}{\partial z} g_{5/2}(z) \quad [17.5.6]$$

Como α es positivo o nulo, la fugacidad z sólo podrá tomar valores en el intervalo $0 \leq z \leq 1$. Para el cálculo de z en función de N/V , hemos de estudiar las propiedades de la función $g_{3/2}(z)$. De la expresión [17.5.6] es inmediato que $g_{3/2}(z)$ es una función monótonamente creciente con z . De forma análoga a $f_{3/2}(z)$ (cuestión complementaria 17.1), se puede hacer un desarrollo en serie de potencias para $g_{3/2}(z)$, obteniéndose

$$g_{3/2}(z) = z + \frac{z^2}{2^{3/2}} + \frac{z^3}{3^{3/2}} + \frac{z^4}{4^{3/2}} + \dots \quad [17.5.7]$$

En $z = 1$, la derivada de $g_{3/2}(z)$ diverge, pero su valor es finito:

$$g_{3/2}(1) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{3/2}} = \zeta(3/2) = 2.6124\dots \quad [17.5.8]$$

donde $\zeta(x)$ es la función zeta de Riemann. Por tanto, para cualquier valor de z entre 0 y 1,

$$g_{3/2}(z) \leq \zeta(3/2)$$

La función $g_{3/2}(z)$ se representa en la figura 17.5.

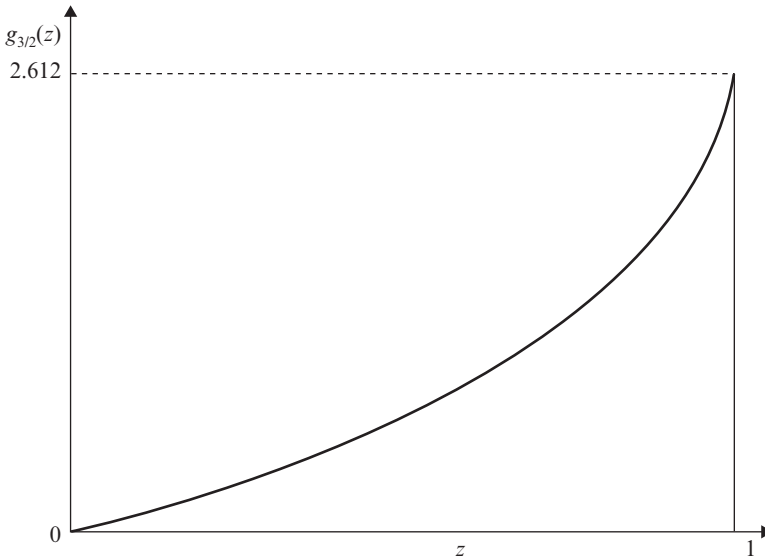


Figura 17.5. La función $g_{3/2}(z)$.

La expresión [17.5.4] puede escribirse en la forma:

$$\frac{\lambda^3 N_0}{V} = \frac{\lambda^3 N}{V} - g_{3/2}(z) \quad [17.5.9]$$

donde

$$N_0 = \frac{z}{1-z} \quad [17.5.10]$$

es el número de ocupación promedio del nivel de energía cero. Si la temperatura T y el volumen específico V/N son tales que

$$\frac{\lambda^3 N}{V} > \zeta(3/2) \quad [17.5.11]$$

$N_0/V > 0$ y, por tanto, una fracción finita N_0/N de partículas ocupa el nivel con $E = 0$. Este fenómeno se conoce como condensación de Bose-Einstein. La condición [17.5.11] define una región en el espacio termodinámico P - V - T del gas ideal de Bose, conocida

como región de condensación. Está separada del resto del espacio P - V - T por la superficie

$$\frac{\lambda^3 N}{V} > \zeta(3/2) \quad [17.5.12]$$

Para un valor dado de la densidad N/V , la ecuación [17.5.12] define una temperatura crítica T_c :

$$k_B T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left[\frac{N}{V\zeta(3/2)} \right]^{2/3} \quad [17.5.13]$$

De [17.5.12] es inmediato que, a esta temperatura, la longitud de onda térmica λ es del mismo orden de magnitud que la separación promedio entre partículas $(V/N)^{1/3}$. Análogamente, para una temperatura dada T , la ecuación [17.5.12] define una densidad crítica $(N/V)_c$:

$$\left(\frac{N}{V} \right)_c = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda^3} \quad [17.5.14]$$

La región de condensación es aquella en la que $T < T_c$ o $(N/V) > (N/V)_c$.

De la expresión [17.5.10] es inmediato que en el límite termodinámico $N_0/V \rightarrow 0$ ($N_0/N \rightarrow 0$) si $z < 1$. Si se verifica la condición [17.5.11], $N_0/V > 0$ y $z = 1$. De ambos hechos, y aplicando [17.5.9],

$$z = \begin{cases} \text{la solución de: } g_{3/2}(z) = \frac{\lambda^3 N}{V} & \text{si } \frac{\lambda^3 N}{V} < \zeta(3/2) \\ 1 & \text{si } \frac{\lambda^3 N}{V} \geq \zeta(3/2) \end{cases} \quad [17.5.15]$$

Cuando $z = 1$, la fracción de partículas en el nivel $E = 0$ se calcula a partir de [17.5.9]:

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{V}{\lambda^3 N} g_{3/2}(z)$$

Usando las definiciones [17.5.13-14], podemos escribir:

$$\frac{N_0}{N} = \begin{cases} 0 & \text{si } \frac{\lambda^3 N}{V} < \zeta(3/2) \\ 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} = 1 - \frac{(N/V)_c}{(N/V)} & \text{si } \frac{\lambda^3 N}{V} \geq \zeta(3/2) \end{cases} \quad [17.5.16]$$

En la figura 17.6 se representa N_0/N en función de la temperatura T para una densidad N/V fijada.

Se puede demostrar fácilmente (ejercicio 17.13) que N_0/N es siempre cero cuando $E_h \neq 0$. Por tanto, para $T > T_c$, no hay ningún nivel energético ocupado por una fracción finita de todas las partículas. Cuando $T < T_c$, una fracción finita de las partículas del sistema ocupa el nivel de energía cero, mientras el resto se encuentran distribuidas de una forma continua en los demás niveles. En el cero absoluto de temperatura, todas las partículas ocupan el nivel con $E = 0$.

El término $V^{-1} \ln(1-z)$ de la ecuación de estado [17.5.1] o [17.5.3] es siempre cero cuando $V \rightarrow \infty$. Si $z < 1$, el resultado es obvio. Para $z = 1$, N_0/V toma un valor finito, por lo que $(1-z) \propto V^{-1}$, como es inmediato de la expresión [17.5.10].

La energía total del gas será

$$\frac{E_T}{V} = \frac{4\pi}{h^3} (2m^3)^{1/2} \int_0^\infty \frac{E^{3/2} dE}{e^{\alpha+\beta E} - 1} \quad [17.5.17]$$

Mediante una integración por partes se vuelve a obtener, al igual que en el gas de Fermi, la relación [17.4.5]:

$$E_T = \frac{3}{2} PV$$

Debido a que en la región de condensación la fugacidad vale la unidad, las magnitudes termodinámicas son fáciles de obtener analíticamente. Éste no es el caso en el resto

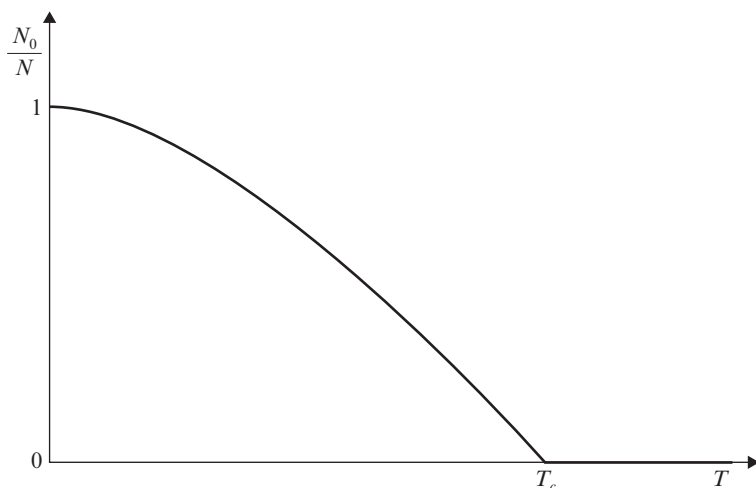


Figura 17.6. Fracción de partículas en el nivel de energía cero para un gas ideal de Bose.

del espacio termodinámico P - V - T , donde, en general, es preciso realizar cálculos numéricos. Sin embargo, para temperaturas altas y densidades bajas ($\lambda^3 N/V \ll 1$), se pueden obtener del desarrollo [17.5.7] y mediante un método similar al empleado en el gas de Fermi para la obtención de [17.4.13-19], las siguientes expresiones:

$$z = \lambda^3 \frac{N}{V} - \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\lambda^3 \frac{N}{V} \right)^2 + \dots \quad [17.5.18]$$

$$PV = Nk_B T \left(1 - \frac{1}{2^{5/2}} \frac{\lambda^3 N}{V} + \dots \right) \quad [17.5.19]$$

$$E_T = \frac{3}{2} Nk_B T \left(1 - \frac{1}{2^{5/2}} \frac{\lambda^3 N}{V} + \dots \right) \quad [17.5.20]$$

$$C_V = \frac{3}{2} Nk_B \left(1 + \frac{3}{2^{7/2}} \frac{\lambda^3 N}{V} - \dots \right) \quad [17.5.21]$$

Al contrario que en el gas de Fermi, donde la energía total era mayor que la del gas clásico, debido al principio de exclusión, aquí la energía es menor que en el caso clásico, debido a que las partículas tienden a concentrarse en los niveles de más baja energía, llegándose al fenómeno de la condensación de Bose-Einstein a temperaturas suficientemente bajas.

En la región de condensación ($\lambda^3 N/V \geq \zeta(3/2)$), la fugacidad z es igual a uno y, por tanto, la ecuación de estado [17.5.5] pasa a ser:

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{1}{\lambda^3} \zeta(5/2) \quad [17.5.22]$$

donde hemos sustituido $g_{5/2}(1)$ por su valor numérico:

$$g_{5/2}(1) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{5/2}} = \zeta(5/2) = 1.3415\dots$$

Esta última expresión se obtiene fácilmente de la relación entre $g_{3/2}(z)$ y $g_{5/2}(z)$ dada por [17.5.6] y el desarrollo [17.5.7].

De la relación [17.4.5] se obtiene que

$$E_T = \frac{3}{2} \frac{k_B T V}{\lambda^3} \zeta(5/2) \quad [17.5.23]$$

y, derivando respecto a T ,

$$\frac{C_V}{k_B N} = \frac{15}{4} \frac{V}{\lambda^3 N} \zeta(5/2) \quad [17.5.24]$$

En la figura 17.7 se representa el calor específico en función de la temperatura. Cerca del cero absoluto, C_V se comporta como $T^{3/2}$, mientras que para el gas de fotones (o fonones) se comportaba como T^3 . El motivo es que, cerca del cero absoluto, donde los niveles de energía que pueden ocupar las partículas son muy bajos, la densidad de estados para una energía dada es mucho menor en el gas de fotones (o fonones) que en el gas ideal de Bose (compárese la expresión [17.2.2] o [17.3.1] con la [17.4.1]). Consecuentemente, en el gas ideal de Bose hay más modos de excitación disponibles para una partícula y el calor específico es mayor.

Un sistema de Bose del que se conoce su existencia a bajas temperaturas es el He^4 líquido³. A una temperatura de 2.28 K sufre una transición que divide el líquido en dos fases, conocidas como He I y He II. Es lo que se conoce como transición λ , en la cual el calor específico tiende a infinito de una forma logarítmica. La fase por encima del punto λ es el He I y se comporta como un fluido normal, mientras que la fase por debajo del punto λ , He II, se comporta como un superfluido con viscosidad prácticamente nula. Esta

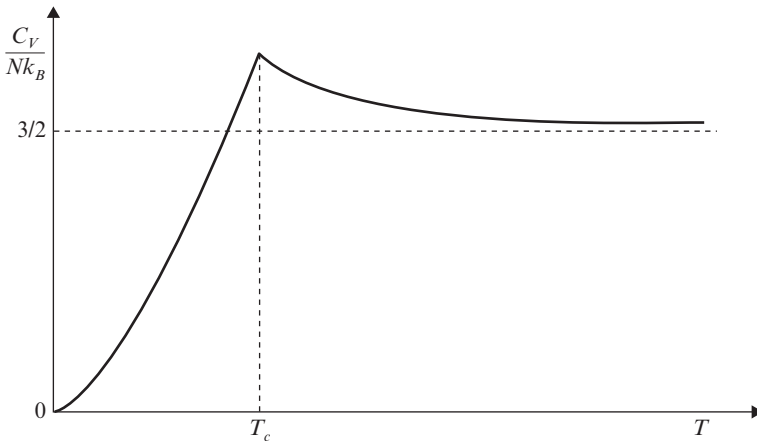


Figura 17.7. Calor específico de un gas ideal de Bose.

³ La condensación de Bose-Einstein se ha observado en vapores de metales alcalinos, ^{87}Rb y ^{23}Na , en los grupos del JILA (Joint Institute for Laboratory Astrophysics, Colorado) y MIT (Massachusetts Institute of Technology) respectivamente. Un tercer grupo, en la Universidad de Rice, logró por enfriamiento un régimen cuántico degenerado en átomos de litio. Los investigadores Eric A. Cornell y Carl E. Wieman, de JILA, y Wolfgang Ketterle, de MIT, fueron galardonados con el premio Nobel de Física del año 2001 por estos logros.

transición no ocurre en el He³ líquido, cuyos átomos obedecen la estadística de Fermi-Dirac. Por tanto, una hipótesis plausible es que se trata de una manifestación de la condensación de Bose-Einstein, modificada por interacciones interatómicas. Además, si sustituimos la masa y densidad del He⁴ en la expresión [17.5.13], encontramos una temperatura de transición $T_c = 3.14$ K, que es del orden de magnitud correcto. Para describir el fenómeno satisfactoriamente es necesario incluir en la teoría las diferentes excitaciones procedentes de la interacción entre átomos: fonones, vórtices, etc., lo cual está fuera del alcance de este libro.

CUESTIONES COMPLEMENTARIAS

17.1. Comportamiento de la función $f_{3/2}(z)$.

Si derivamos la expresión [17.4.10] respecto a z un número n de veces, se obtiene fácilmente por inducción que

$$\frac{d^n}{dz^n} f_{3/2}(z) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (-1)^{n+1} n! \int_0^\infty \frac{x^2 e^{-x^2}}{(e^{-x^2} + z)^{n+1}} dx, \quad n > 0$$

Por tanto, en el límite, cuando $z \rightarrow 0$,

$$\left. \frac{d^n}{dz^n} f_{3/2}(z) \right|_{z=0} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (-1)^{n+1} n! \int_0^\infty x^2 e^{-nx^2} dx = (-1)^{n+1} \frac{n!}{n^{3/2}}$$

con lo que hemos obtenido el desarrollo en serie de potencias para la función $f_{3/2}(z)$:

$$f_{3/2}(z) = z - \frac{z^2}{2^{3/2}} + \frac{z^3}{3^{3/2}} - \frac{z^4}{4^{3/2}} + \dots$$

Para z grande, el desarrollo es debido a Sommerfeld. Mediante un cambio de variable a $y \equiv x^2$ y una integración por partes, podemos escribir

$$f_{3/2}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{y^{1/2}}{e^{y+\alpha} + 1} dy = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{y^{3/2} e^{y+\alpha}}{(e^{y+\alpha} + 1)^2} dy$$

donde $\alpha \equiv -\ln z$ será negativa. Desarrollando $y^{3/2}$ en en serie de Taylor alrededor de $-\alpha$, obtenemos

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dy \frac{e^{y+\alpha}}{(e^{y+\alpha} + 1)^2} \left[(-\alpha)^{3/2} + \frac{3}{2}(-\alpha)^{1/2}(y + \alpha) + \frac{3}{8}(-\alpha)^{-1/2}(y + \alpha)^2 + \dots \right] =$$

$$= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dt \frac{e^t}{(e^t + 1)^2} \left[(-\alpha)^{3/2} + \frac{3}{2}(-\alpha)^{1/2}t + \frac{3}{8}(-\alpha)^{-1/2}t^2 + \dots \right]$$

Ahora bien, la integral la podemos escribir como

$$\int_{\alpha}^{\infty} = \int_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\alpha}$$

La segunda integral es de orden e^{α} . Por tanto,

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^t}{(e^t + 1)^2} \left[(-\alpha)^{3/2} + \frac{3}{2}(-\alpha)^{1/2}t + \frac{3}{8}(-\alpha)^{-1/2}t^2 + \dots \right] + O(e^{\alpha}) =$$

$$= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left[I_0(-\alpha)^{3/2} + \frac{3}{2}I_1(-\alpha)^{1/2} + \frac{3}{8}I_2(-\alpha)^{-1/2} + \dots \right] + O(e^{\alpha})$$

con

$$I_n \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{t^n e^t}{(e^t + 1)^2} dt$$

Por tanto, $I_n = 0$ para n impar. Para $n = 0$,

$$I_0 = -2 \int_0^{+\infty} \frac{d}{dt} \frac{1}{e^t + 1} dt = 1$$

y para $n > 0$ par, integrando por partes,

$$I_n = \int_0^{+\infty} \frac{t^{n-1}}{e^t + 1} dt = 2n(1 - 2^{1-n})(n-1)! \zeta(n)$$

donde $\zeta(n)$ es la función zeta de Riemann (véase apéndice C). Sustituyendo los primeros I_n por sus valores, se obtiene la expresión [17.4.12].

EJERCICIOS

17.1. Evaluar [17.1.3].

17.2. Utilizar [17.1.5] en [16.1.6] con objeto de evaluar E_T en función de la temperatura absoluta para el gas ideal monoatómico.

17.3. Se considera un gas ideal clásico monoatómico, en equilibrio termodinámico en un campo gravitatorio constante, dirigido según el eje z . El gas ocupa un volumen macroscópico desde $z = 0$ hasta $z = +\infty$, extendiéndose en las direcciones x e y (plano horizontal) de forma homogénea. La energía total de un átomo en $\mathbf{r} = (x, y, z)$ con velocidad \mathbf{v} es $E = m\mathbf{v}^2/2 + mgz$, siendo ahora $g(>0)$ la aceleración de la gravedad. Acéptese (como parece natural, dadas las características del campo gravitatorio considerado) que el factor de degeneración correspondiente a [17.1.1] sea ahora $\sigma' 4\pi v^2 dv dz$ ($v = |\mathbf{v}|$), siendo σ' una constante independiente de v y z . Hallar:

- El número de átomos, $dN(v, z)$, con velocidades entre v y $v + dv$, a alturas entre z y $z + dz$.
- El número de átomos $dN(z)$ entre z y $z + dz$, cualquiera que sea su velocidad.

17.4. Para el gas de fotones en equilibrio dentro de una cavidad, obtener una expresión para el potencial termodinámico F mediante [16.6.13] y [16.6.f]. A partir de ella, y combinando [16.6.9] y [16.6.13], hallar la presión P , y mostrar que es positiva.

17.5. A partir de los resultados del ejercicio 17.4 y de [17.2.5-6], demostrar que

$$PV = \frac{1}{3} E_T$$

para el gas de fotones.

17.6. El 23 de febrero de 1987, una estrella supernova (perteneciente a la Gran Nube de Magallanes, conocida como SN 1987A) colapsó y explotó, emitiendo un flujo de antineutrinos electrónicos $\bar{\nu}_e$ (además de fotones...). Recuérdese el ejercicio 16.7, y supóngase que:

- El conjunto de dichos antineutrinos puede tratarse, aproximadamente, como un gas en equilibrio termodinámico a temperatura absoluta T (la de emisión).
- La emisión de $\bar{\nu}_e$'s es análoga a la radiación de un cuerpo negro, salvo por una diferencia esencial. ¿Cuál es esta última? ¿Cómo varía el número de $\bar{\nu}_e$'s, emitidos por la supernova con energías individuales entre E y $E + dE$ en cualquier dirección al variar E ?

17.7. Probar las expresiones [17.3.9].

Ayuda:
$$\int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx = 4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 4\Gamma(4)\zeta(4) = \frac{4\pi^4}{15}$$

17.8. Probar que el calor específico C_V de la radiación encerrada en una cavidad en equilibrio termodinámico está dado por la expresión

$$C_V = \frac{4\pi^2 k_B V}{15} \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3$$

Explicar por qué C_V no tiene un límite superior en este caso y sí lo tiene para un sólido.

17.9. En el cero absoluto de temperatura, las partículas de un gas ideal de Fermi ocupan los estados de energía más bajos hasta un cierto nivel ε_F . Encontrar, a partir de esta condición, la energía de Fermi ε_F y la energía total del gas en el cero absoluto de temperatura.

17.10. Probar [17.4.24] a partir de [17.4.23].

17.11. Considerar la distribución del número de ocupación promedio de un gas de Fermi dada por la expresión [17.4.26]. Probar que la distribución (como función de E_h) es simétrica respecto al potencial químico μ .

17.12. Calcular la energía de Fermi de:

- Los electrones en sodio metálico, sabiendo que la densidad es 970 kg/m^3 y su peso atómico es 23 y suponiendo que cada átomo de sodio proporciona un electrón a la banda de conducción.
- Átomos de He^3 en He^3 líquido (volumen atómico = $46.2 \text{ \AA}^3/\text{átomo}$).

17.13. Probar que en un gas ideal de Bose N_h/V tiende a cero cuando $V \rightarrow \infty$ para cualquier nivel de energía $E_h \neq 0$.

Ayuda: relacionar E_h con el volumen V del cubo donde está contenido el gas mediante la expresión [10.2.11].

18

Introducción a la teoría cuántica de la dispersión

Ramón F. Álvarez-Estrada

18.1. APLICACIÓN DE LA INTERPRETACIÓN PROBABILÍSTICA: DISPERSIÓN DE UNA PARTÍCULA POR UN POTENCIAL

Consideremos un potencial $V(r)$ independiente del tiempo que tiende a cero si $|r| \rightarrow \infty$ en cualquier dirección. Se supondrá que $V(r)$ tiene magnitud apreciable solamente en una región finita del espacio, aunque su alcance puede llegar a cualquier punto. Un ejemplo típico es el llamado potencial de Yukawa:

$$V(r) = V_0 \frac{\exp(-\mu|r|)}{|r|} \quad [18.1.1]$$

donde V_0 y μ son constantes y $\mu > 0$. Sea una partícula microscópica no-relativista, que incide en el pasado remoto ($t \rightarrow -\infty$) desde una región muy lejana ($|r| \rightarrow \infty$) sobre la zona en la que está concentrado el potencial. Dicha partícula incidente llevará asociada una función de onda $\Psi_{\text{in}}(r, t)$. La interacción de la onda incidente con V genera una nueva onda, la dispersada, que denotaremos por $\Psi_{\text{dis}}(r, t)$. En cualquier r, t la función de onda completa $\Psi(r, t)$ asociada físicamente a la partícula satisface la ecuación de Schrödinger [6.4.8]. Parece intuitivamente natural que: i) si $t \rightarrow -\infty$, $\Psi(r, t)$ tenderá a coincidir con Ψ_{in} , ii) para cualquier r, t , $\Psi(r, t)$ es la suma de $\Psi_{\text{in}}(r, t)$ y de $\Psi_{\text{dis}}(r, t)$. En general, $\Psi_{\text{in}}(r, t)$ es un paquete libre de la forma [6.3.3], pero simplificaremos suponiendo que se reduce a una onda plana:

$$\Psi_{\text{in}}(r, t) = \exp i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)/\hbar \quad , \quad E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad [18.1.2]$$

Haciendo uso de [6.2.2] y [6.2.14], es inmediato comprobar que [18.1.2] es idéntica a [6.2.11]. Aunque la interpretación probabilística expuesta en la sección 6.6 *no* es estrictamente aplicable a ondas planas (pues [6.6.3] ya no se cumple), no obstante, sí será posible en el caso presente ofrecer una interpretación probabilística relacionada con aquella y basada en la idea de flujo de probabilidad, es decir, en [6.7.7]. Así, extenderemos al caso tridimensional la pauta seguida en el capítulo 9 en la situación unidimensional.

Es físicamente natural que, a gran distancia, $\Psi_{\text{dis}}(r, t)$ se asemeje a una onda esférica saliente (véase la figura 18.1). En efecto, en tal caso, la zona en que V es apreciable y

donde Ψ_{dis} ha sido generada se asemeja a un emisor de pequeñas dimensiones. Por tanto, si $|r| \rightarrow \infty$ a lo largo de una dirección dada ($r/|r|$ fijo), la función de onda completa toma, a partir de un cierto t , la forma

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \sim \Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) + f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \frac{\exp \frac{i}{\hbar} [|\mathbf{p}'||r| - Et]}{|r|} \quad [18.1.3]$$

donde

$$\mathbf{p}' = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \times \frac{\mathbf{r}}{|r|}, \quad E = \frac{p'^2}{2m} \quad [18.1.4]$$

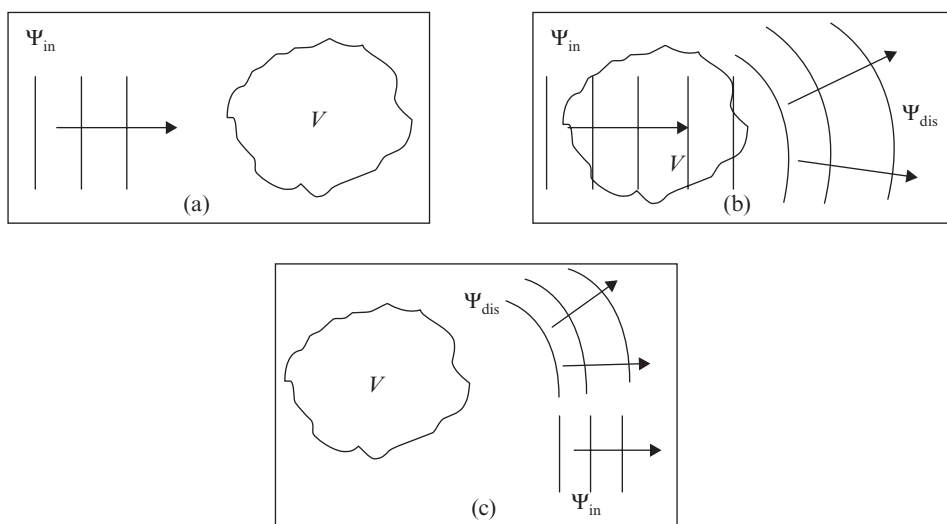


Figura 18.1. Dispersión de una partícula microscópica por un potencial V : (a) la onda incidente Ψ_{in} en el pasado remoto aún no ha interactuado con V , (b) al interactuar, se genera Ψ_{dis} , (c) en el infinito futuro, Ψ_{in} se aleja de V y Ψ_{dis} es una onda esférica saliente.

La función $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ recibe el nombre de amplitud de dispersión, y caracteriza la magnitud de $\Psi_{\text{dis}}(\mathbf{r}, t)$ en cada dirección si $|r| \rightarrow \infty$: no hay razón para que, en general, f sea la misma para cualquier \mathbf{p}' . [18.1.3] es intuitivamente correcta, y ofrecemos una justificación de ella en la sección 18.2. Evaluaremos la densidad de corriente de probabilidad \mathbf{J}_{in} asociada a la onda incidente Ψ_{in} en cualquier t . Sustituyendo Ψ por Ψ_{in} en [6.7.7] y operando, se obtiene

$$\mathbf{J}_{\text{in}} = \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \Psi_{\text{in}}^*(\mathbf{r}, t) \frac{i\mathbf{p}}{\hbar} \Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) - \Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) \left(-i \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right) \Psi_{\text{in}}^*(\mathbf{r}, t) \right\} = \frac{\mathbf{p}}{m} \quad [18.1.5]$$

Imaginemos una superficie plana de área S perpendicular a \mathbf{p} a grandes distancias ($|r| \rightarrow \infty$) en $t \rightarrow -\infty$. El flujo de \mathbf{J}_{in} a través de S en la dirección de \mathbf{p} por unidad de tiempo es (el vector normal es $\mathbf{n} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$):

$$\int_S ds \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \mathbf{J}_{\text{in}} = S \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \mathbf{J}_{\text{in}} = S \frac{|\mathbf{p}|}{m} \quad [18.1.6]$$

El flujo de probabilidad debido a \mathbf{J}_{in} por unidad de tiempo y *unidad de área* es:

$$|\mathbf{p}|/m \quad [18.1.7]$$

A continuación, evaluaremos la densidad de corriente de probabilidad \mathbf{J}_{dis} asociada a la onda saliente $\Psi_{\text{dis}}(\mathbf{r}, t)$ en [18.1.3] cuando $|r| \rightarrow \infty$. Para ello, sustituiremos en [6.7.7] $\Psi(\mathbf{r}, t)$ por el segundo término que aparece a la derecha de [18.1.3]. El resultado es

$$\mathbf{J}_{\text{dis}} \simeq \frac{|\mathbf{p}|}{m} |f(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 \frac{1}{|r|^2} \mathbf{u}_r, \quad \mathbf{u}_r = \frac{\mathbf{r}}{|r|} \quad [18.1.8]$$

La justificación de [18.1.8] se da en el ejercicio 18.1. Sea ds un elemento de área en la superficie esférica del infinito (con radio $|r| \rightarrow \infty$) en la dirección de \mathbf{u}_r . Este último es, también, el vector normal a dicha superficie ahí. Se tiene:

$$ds = |r|^2 d\Omega \quad [18.1.9]$$

donde $d\Omega$ es el elemento de ángulo sólido, es decir

$$d\Omega = \text{sen } \theta d\theta d\varphi \quad [18.1.10]$$

y θ y φ son los ángulos que caracterizan \mathbf{r} , \mathbf{u}_r , y \mathbf{p}' en coordenadas polares esféricas. A veces escribiremos $\Omega = (\theta, \varphi)$. Véase la figura 18.2. La cantidad de probabilidad que fluye asociada (o flujo de probabilidad asociado) a \mathbf{J}_{dis} [18.1.8] a través de ds hacia afuera (en la dirección de \mathbf{u}_r) por unidad de tiempo es

$$ds \mathbf{J}_{\text{dis}} \mathbf{u}_r \sim \frac{|\mathbf{p}|}{m} |f(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 d\Omega \quad [18.1.11]$$

tras haber utilizado [18.1.8-9]¹. Definiremos la sección eficaz diferencial $\sigma(\Omega)$ en la dirección de \mathbf{u}_r (o de \mathbf{p}') como el flujo de probabilidad asociado a \mathbf{J}_{dis} a través de ds por unidad de tiempo y por *unidad de ángulo sólido*, dividido entre el flujo incidente dado en [18.1.7]. Así pues

$$\sigma(\Omega) = \frac{1}{[|\mathbf{p}|/m d\Omega]} \frac{|\mathbf{p}|}{m} |f(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 d\Omega \quad [18.1.12]$$

¹ Compárese con [3.2.4.a-b] y [3.2.5] y con el análisis de dichas ecuaciones en la sección 3.2.

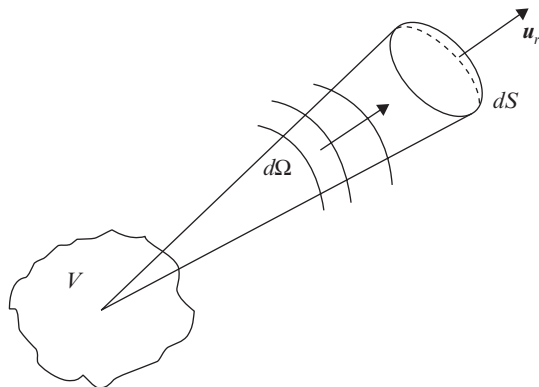


Figura 18.2. Flujo de probabilidad de \mathbf{J}_{dis} a través de dS .

Por tanto

$$\sigma(\Omega) = |f(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 \quad [18.1.13]$$

La sección eficaz total es el flujo de probabilidad a través de toda la superficie esférica del infinito, por unidad de tiempo, dividido entre el flujo incidente. Así

$$\sigma = \int d\Omega \sigma(\Omega) = \int d\Omega |f(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta |f(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 \quad [18.1.14]$$

La ecuación [18.1.3] indica que f tiene dimensión de longitud. Por tanto, $\sigma(\Omega)$ tiene dimensión de área (o, si se prefiere, de área/estereorradian, pues el ángulo sólido, que es adimensional, se mide en estereorradianes). Finalmente, σ tiene dimensión de área².

Se puede dar la siguiente interpretación sugestiva. Imaginemos un haz homogéneo contenido N_{in} partículas microscópicas idénticas por unidad de volumen, todas libres y con la misma función de onda asociada [18.1.2]. Se supone que están lo suficientemente separadas unas de otras como para que no interactúen entre sí, sean independientes, puedan tratarse como distinguibles (es decir, pueda omitirse su carácter fermiónico o bosónico) y sea razonable representar aproximadamente cada una por una onda plana. Para ello, una condición necesaria es que la longitud de onda de De Broglie λ dada en [6.2-3] sea mucho menor que $N_{\text{in}}^{-1/3}$. Sobre la base de [18.1.6-7] es razonable interpretar

$$I = \frac{|\mathbf{p}|}{m} N_{\text{in}} \quad [18.1.15]$$

² Recuérdese que los conceptos de sección eficaz diferencial y total para la dispersión de partículas en Mecánica Clásica ya fueron discutidos en la sección 4.4. El análisis de dichos conceptos para el caso mecano-cuántico, presentado en esta sección, complementa, así, el realizado en aquélla.

como el número de partículas del haz que atraviesan la unidad de superficie perpendicular a aquél (esto es, a \mathbf{p}) por unidad de tiempo, es decir, como el flujo de partículas incidentes. Supongamos que dicho haz incide sobre un blanco formado por un gran número de partículas idénticas (por ejemplo, átomos o núcleos), siendo dispersado por él. Sea N el número total de tales centros dispersores. Por hipótesis: i) cada partícula del haz interactúa con una del blanco (siendo enormemente improbable que lo haga con dos o más de éste, es decir, que haya colisiones múltiples): para ello, es preciso que λ sea mucho menor que la separación media entre las partículas del blanco, ii) el movimiento de cada partícula del blanco puede despreciarse y ésta puede sustituirse por un potencial V que actúa sobre una partícula del haz. En estas condiciones, el sistema haz + blanco puede reemplazarse por una serie de copias idénticas de otro sistema, mucho más simple, constituido, a su vez, por una partícula del haz sometida a un potencial V que la dispersa. Todas esas copias son independientes entre sí: hay, así, una analogía con la situación tratada en la sección 6.9. Una discusión más detallada de dicho conjunto de copias se verá en la sección 18.5. En el caso presente, y recordando [18.1.11-12] y [18.1.15], interpretaremos

$$IN \sigma(\Omega) d\Omega \quad [18.1.16]$$

como el número de partículas del haz que son dispersadas por unidad de tiempo en un ángulo sólido $d\Omega$ en torno a Ω . El interés de esta interpretación es que es aplicable al análisis de experimentos de dispersión en muchos casos.

Para un estudio similar, con algunas estimaciones cuantitativas, referimos al lector a otras fuentes³.

Conceptos análogos a los discutidos en esta sección aparecieron al analizar la reflexión y transmisión de partículas en una dimensión en el capítulo 9. Por otra parte, las reacciones nucleares constituyen, en particular, ejemplos importantes de los fenómenos de dispersión en Mecánica Cuántica: serán tratadas en los capítulos 34, 35 y 38. Nótese que el símbolo N tuvo, por conveniencia, otro significado en el capítulo 4, y que tendrá la misma interpretación en la sección 34.2 que en el presente capítulo. Por otra parte, el símbolo I utilizado en este capítulo representará lo mismo que en la sección 34.2.

18.2. JUSTIFICACIÓN DE [18.1.3] Y UNA REPRESENTACION PARA $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$

En primer lugar, será necesario transformar la ecuación de Schrödinger y la condición inicial en ecuaciones integrales. Ello permitirá, luego, obtener fácilmente [18.1.3], así como una importante representación explícita para $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$.

La función de onda total satisface la siguiente ecuación integral, denominada de Lippmann-Schwinger ($\mathbf{r} = (x, y, z)$, $\mathbf{r}' = (x', y', z')$)

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d^3\mathbf{r}' K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') V(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t') \quad [18.2.1]$$

³ Galindo, A. y Pascual, P. (1989): *Mecánica Cuántica*, vol. 2. Madrid: Eudema Universidad.

La integral en \mathbf{r}' está, en principio, extendida a todo el espacio. El primer término es la onda incidente. El segundo es la generada por la interacción, Ψ_{dis} . La función K se denomina función de Green o propagador, y satisface, por hipótesis, las condiciones siguientes

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\right)K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t') \quad [18.2.2]$$

$$K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = 0 \quad , \quad \text{si } t - t' < 0 \quad [18.2.3]$$

Las deltas de Dirac han aparecido en la cuestión complementaria 7.4 y en la sección 9.5. Es fácil ver que $\Psi(\mathbf{r}, t)$, dada por el lado derecho de [18.2.1], satisface [6.4.8]. En efecto:

$$\begin{aligned} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\right] \left\{ \Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) + \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \int d^3\mathbf{r}' K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') V(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t') \right\} = \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \int d^3\mathbf{r}' \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') V(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t') = V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad [18.2.4]$$

donde se han usado el hecho de que $\Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)$ satisface [6.2.15], y (tras, intercambiar derivadas con integrales) las propiedades de la delta de Dirac, dadas en la cuestión complementaria 7.4. Por otra parte, si $t \rightarrow -\infty$, la propiedad [18.2.3] implica que la integral dada en [18.2.1] no contribuye, así que $\Psi(\mathbf{r}, t)$, dada en [18.2.1], tiende a coincidir, en el pasado remoto, con la onda incidente (véase la sección 18.1).

La ecuación [18.2.1] tiene una interpretación física muy natural. Iterémosla indefinidamente:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) + \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \int d^3\mathbf{r}' K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') V(\mathbf{r}') \Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}', t') + \\ + \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \int d^3\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{+\infty} dt'' \int d^3\mathbf{r}'' K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') V(\mathbf{r}') K(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'', t' - t'') V(\mathbf{r}'') \Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}'', t'') \end{aligned} \quad [18.2.5]$$

Así, la onda total en \mathbf{r}, t es la superposición de: *a*) la incidente (Ψ_{in}), *b*) la que llega a \mathbf{r}, t , debido al propagador K , desde \mathbf{r}', t' , donde ha sido generada cuando la onda incidente sufrió la acción del potencial (nótese que \mathbf{r}', t' son arbitrarios, así que hay que integrar sobre ellos), *c*) la que se da cuando, al llegar Ψ_{in} a \mathbf{r}'', t'' , se produce una primera onda que se propaga hasta \mathbf{r}', t' mediante K , la cual, a su vez, da lugar a otra que también se propaga, por medio de K , desde \mathbf{r}', t' hasta \mathbf{r}, t (integrando para todos $\mathbf{r}', t', \mathbf{r}'', t''$), etc.

En la cuestión complementaria 18.1 se justifica la siguiente representación para K :

$$K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \exp[-i\omega(t - t')] G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \hbar\omega) \quad [18.2.6]$$

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \hbar\omega) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\exp i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar\omega - \hbar^2\mathbf{k}^2/2m + i\varepsilon} \quad [18.2.7]$$

donde ε es un número real, estrictamente positivo y muy pequeño, que irá a cero al final. Dado que Ψ_{in} es una onda plana, parece natural que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ tenga una estructura factorizada en dependencias temporal y espaciales, es decir, sea un estado estacionario de la forma [7.10.1-2] (aunque no normalizable). Esto es así, y es consistente con [18.2.1]. En efecto, al sustituir [18.2.6] y

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt' \exp it'(\omega - E/\hbar) = 2\pi\delta(\omega - E/\hbar) \quad [18.2.8]$$

es inmediato obtener ($E = \mathbf{p}^2/2m$):

$$\Phi(\mathbf{r}) = \exp i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar + \int d^3\mathbf{r}' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; E) V(\mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}') \quad [18.2.9]$$

La ecuación [18.2.9] es conocida como la ecuación de Lippmann-Schwinger independiente del tiempo. En ella, $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; E)$ puede considerarse como un propagador o función de Green independiente del tiempo. La evaluación explícita de $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; E)$, a partir de [18.2.7], se da en la cuestión complementaria 18.2, y el resultado es ($k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$)

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; E) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \quad [18.2.10]$$

Estudiaremos el comportamiento asintótico de la integral a la derecha de [18.2.9], utilizando [18.2.10] para grandes distancias en una dirección dada, es decir, si $|\mathbf{r}| \rightarrow +\infty$, manteniendo fijo $\mathbf{r}'/|\mathbf{r}| = \mathbf{u}_r$. Nótese que, si $|\mathbf{r}'|/|\mathbf{r}|$ es pequeño:

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = [\mathbf{r}^2 + \mathbf{r}'^2 - 2\mathbf{r}\mathbf{r}']^{1/2} = |\mathbf{r}| \left[1 + \frac{\mathbf{r}'^2}{\mathbf{r}^2} - \frac{2\mathbf{r}\mathbf{r}'}{\mathbf{r}^2} \right]^{1/2} \simeq |\mathbf{r}| - \mathbf{r}'\mathbf{u}_r + \dots \quad [18.2.11]$$

donde se ha hecho un desarrollo en serie de potencias de $|\mathbf{r}'|/|\mathbf{r}|$ y se han omitido términos que se anulan en el límite arriba indicado. Sustituycamos $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ dentro de la integral en [18.2.9-10] por la aproximación asintótica dada en [18.2.11]. Se comprende que en el denominador puede hacerse $|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \sim |\mathbf{r}|$, pero en la exponencial ha de retenerse también $-\mathbf{r}'\mathbf{u}_r$. Así pues, para \mathbf{u}_r fijo, [18.2.9-10] implican si $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$

$$\Phi(\mathbf{r}) \sim \exp i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar + \frac{\exp i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}|\mathbf{r}|}{|\mathbf{r}|} f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \quad [18.2.12]$$

donde \mathbf{p}' viene dado en [18.1.4] y

$$f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' \exp(-i\mathbf{p}'\mathbf{r}'/\hbar) V(\mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}') \quad [18.2.13]$$

es la amplitud de dispersión. Si incluimos las exponenciales dependientes del tiempo, vemos que [18.2.12] es precisamente [18.1.3], que ha quedado, así, justificada. La justificación ofrecida para [18.1.3] ha conducido, además, a la importante representación [18.2.13].

Al igual que [18.2.1], la ecuación [18.2.9] puede iterarse indefinidamente. Utilizando G (en vez de su expresión explícita [18.2.10]) para aliviar la notación, se obtiene directamente

$$\Phi(\mathbf{r}) = \exp i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar} + \int d^3\mathbf{r}' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; E) V(\mathbf{r}') \exp i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}'}{\hbar} + \dots \quad [18.2.14]$$

Las series [18.2.5] y [18.2.14] se conocen como series de Born.

18.3. APROXIMACIÓN DE BORN PARA $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$: APLICACIÓN A LOS POTENCIALES DE YUKAWA Y COULOMB

La sustitución de $\Phi(\mathbf{r}')$ por la serie a la derecha de [18.2.14] en [18.2.13] genera una serie explícita de aproximaciones sucesivas para la amplitud de dispersión $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$. La aproximación de orden más bajo para $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$, es decir,

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' \exp \left[i \left(\frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}{\hbar} \right) \mathbf{r}' \right] V(\mathbf{r}') \quad [18.3.1]$$

se conoce como aproximación de Born, y es de considerable importancia práctica. Puede justificarse que la aproximación

$$f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \approx f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \quad [18.3.2]$$

es tanto más precisa cuanto mayor sea la energía (es decir, si E es mucho mayor que la magnitud media del potencial, cuando éste es de corto alcance). Como una primera aplicación, trataremos el potencial [18.1.1] y evaluaremos la amplitud de dispersión en aproximación de Born, $f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p})$, así como las secciones eficaces diferencial ($\sigma(\Omega)$) y total (σ) para dicho potencial. Combinando [18.1.1] y [18.2.15], se tiene

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = -\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' \frac{\exp(-\mu|\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}'|} \exp i\mathbf{r}'(\mathbf{p} - \mathbf{p}')/\hbar \quad [18.3.3]$$

Eligiendo el eje z , en el espacio donde \mathbf{r}' se integra, según $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$, y utilizando coordenadas polares esféricas, un cálculo análogo al que conduce de [18.2.a] a [18.2.b] en la cuestión complementaria 18.2 da:

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \frac{imV_0}{\hbar|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|} \int_0^{+\infty} d|\mathbf{r}'| \left[\exp|\mathbf{r}'| \left(-\mu + i \frac{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|}{\hbar} \right) - \exp|\mathbf{r}'| \left(-\mu - i \frac{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|}{\hbar} \right) \right] \quad [18.3.4]$$

Las integrales en [18.3.4] son inmediatas. Tras realizarlas y simplificar, se obtiene:

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = -\frac{2mV_0}{[\hbar^2\mu^2 + (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2]} \quad [18.3.5]$$

Supongamos que \mathbf{p} está dirigido según el eje z positivo: $\mathbf{p} = (0, 0, |\mathbf{p}|)$. Dado que θ , φ son los ángulos en coordenadas polares que caracterizan \mathbf{r} (y, por tanto, \mathbf{p}'), se tiene, tras utilizar [18.1.4]:

$$(\mathbf{p}' - \mathbf{p})^2 = 4mE(1 - \cos \theta) = 8mE \sin^2 \theta/2 \quad [18.3.6]$$

Por tanto, la sección eficaz diferencial es, en aproximación de Born:

$$\sigma(\Omega) \simeq |f_{\text{Born}}(\mathbf{p}' - \mathbf{p})|^2 = 4m^2|V_0|^2[\hbar^2\mu^2 + 8mE \sin^2 \theta/2]^{-2} \quad [18.3.7]$$

Al sustituir [18.3.7] en [18.1.14] y realizar las integrales angulares, se obtiene la sección eficaz total en aproximación de Born

$$\sigma \simeq \frac{\pi|V_0|^2}{E^2 \left[\left(1 + \frac{\mu^2 \hbar^2}{4mE} \right)^2 - 1 \right]} \quad [18.3.8]$$

Es interesante considerar, aunque sea brevemente, el caso $\mu = 0$, pues entonces el potencial de Yukawa [18.1.1] se reduce claramente al coulombiano (con $V_0 = \pm(Ze^2/4\pi\epsilon_0)$). De hecho, éste presenta ciertas peculiaridades, a saber, aunque tiende a cero si $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$, no lo hace con suficiente rapidez. La consecuencia es que el estudio previamente realizado a partir de [18.2.1] no es estrictamente aplicable, y se requiere uno especial, que cae fuera del marco de este libro. Los detalles pueden verse en libros de nivel superior^{4,5}. Sin embargo, si se hace $\mu = 0$ directamente en [18.3.7] el resultado así obtenido es co-

⁴ Galindo, A. y Pascual, P. (1989): *Mecánica Cuántica*, vol. 2. Madrid: Eudema Universidad.

⁵ Ynduráin, F. J. (1988): *Mecánica Cuántica*. Madrid: Alianza Universidad Textos.

recto. Concretamente, [18.3.7] para $\mu = 0$ y $V_0 = 2Ze^2/4\pi\epsilon_0$ (para la partícula α) se convierte en

$$\sigma(\Omega) = \frac{Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 8E^2 \sin^4 \theta/2} \quad [18.3.9]$$

que coincide, por una parte, con la fórmula clásica de Rutherford (véase el capítulo 4) y, por otra, con el resultado del tratamiento mecano-cuántico exacto (sin haber hecho la aproximación de Born), aquí omitido (véanse notas 4 y 5). Esta doble coincidencia puede considerarse como un hecho fortuito: es válida para el potencial coulombiano, pero *no* es cierta en general para otros potenciales⁶. Obsérvese que $\sigma(\Omega)$, dado por [18.3.9] tiende a infinito si $\theta \rightarrow 0$, y de una forma tal que la correspondiente sección eficaz total resulta divergente. Esto puede comprobarse directamente haciendo $\mu = 0$ en [18.3.8], y es una consecuencia del *lento* decrecimiento del potencial coulombiano a grandes distancias. Recuérdese la discusión acerca de la fórmula de Rutherford en el capítulo 4.

18.4. DISPERSIÓN POR UN POTENCIAL CRISTALINO: UNA DISCUSION ELEMENTAL

Veamos otro efecto de considerable interés, aunque de forma cualitativa (y, ciertamente, no rigurosa). Supongamos un medio cristalino rígido macroscópicamente grande, pero finito, formado por un gran número N de átomos. Las posiciones de éstos vienen dadas por

$$n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c} \quad [18.4.1]$$

y forman una red cristalina tridimensional que se repite un gran número de veces (pero no infinitas veces), con períodos \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , pues $n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Imaginamos que el potencial $V(\mathbf{r})$, que «ve» la partícula microscópica (electrón o neutrón), está creado por el número macroscópicamente grande, N de átomos del cristal. En estas condiciones, es físicamente natural que $V(\mathbf{r})$ sea aproximadamente periódico con períodos \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c}

$$V(\mathbf{r} + n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c}) = V(\mathbf{r}) \quad [18.4.2]$$

cuando n_1, n_2, n_3 toman un gran número de valores enteros ($n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Una celda unidad es un paralelepípedo determinado por ocho átomos próximos cuya repeti-

⁶ Esa doble coincidencia podría considerarse responsable del formidable avance en el conocimiento de la estructura del átomo (secciones 4.3 y 4.4). Así, [4.3.2.1] y [4.4.6] (obtenidas clásicamente) generaron conclusiones físicas correctas acerca de estructuras microscópicas... sin conocer aún las leyes cuánticas. Sin esas coincidencias, las conclusiones habrían sido erróneas o ese avance más lento y costoso, muy probablemente.

ción genera todo el cristal. Por ejemplo, una posible celda unidad es la formada por los vectores [18.4.1] correspondientes a

$$n_1, n_2, n_3 = (0, 0, 0), (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1), (1, 1, 0), (0, 1, 1), (1, 0, 1), (1, 1, 1) \quad [18.4.3]$$

Estudiaremos algunas características generales de la dispersión de la partícula microscópica por $V(\mathbf{r})$. Para distancias con magnitud macroscópica, mucho mayores que el tamaño del cristal, [18.1.3] continúa dando una representación asintótica válida de la función de onda total de la partícula fuera del cristal. Analizaremos la correspondiente amplitud de dispersión en aproximación de Born. Partiremos de [18.3.1], y expresaremos la integral sobre \mathbf{r} como una suma sobre un número macroscópicamente grande de celdas unidad. Para ello, hacemos el cambio $\mathbf{r} = \mathbf{y} + n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}$, donde \mathbf{y} varía dentro de la celda unidad (*cu*) especificada en [18.4.3]. Así:

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_{n_1, n_2, n_3} \int_{cu} d^3y \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')(\mathbf{y} + n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c})\right] \times \\ \times V(\mathbf{y} + n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}) \quad [18.4.4]$$

Utilizando [18.4.2], [18.4.4] se reexpresa como sigue:

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \left\{ \sum_{n_1, n_2, n_3} \int_{cu} \exp\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')(n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}) \right\} S(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \quad [18.4.5]$$

$$S(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{cu} d^3y \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\mathbf{y}\right] V(\mathbf{y}) \quad [18.4.6]$$

La triple suma en [18.4.5] se extiende a un conjunto enormemente grande (pero *no* infinito) de enteros $n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Por otra parte, [18.1.3] (para $|\mathbf{r}|$ mucho mayor que las dimensiones del cristal) y la hipótesis de que [18.3.2] es aproximadamente válida implican

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \sim \Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) + \frac{\exp\frac{i}{\hbar}(|\mathbf{p}||\mathbf{r}| - Et)}{|\mathbf{r}|} f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \quad [18.4.7]$$

Introduciremos los vectores \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* de la red recíproca mediante

$$\mathbf{a}\mathbf{a}^* = \mathbf{b}\mathbf{b}^* = \mathbf{c}\mathbf{c}^* = 1 \\ \mathbf{a}\mathbf{b}^* = \mathbf{b}\mathbf{c}^* = \mathbf{c}\mathbf{a}^* = \mathbf{b}\mathbf{a}^* = \mathbf{c}\mathbf{b}^* = \mathbf{a}\mathbf{c}^* = 0 \quad [18.4.8]$$

Nótese que el símbolo * no representa aquí conjugación compleja.

Las propiedades fundamentales de [18.4.5-7], que justifican el presente estudio, son las siguientes:

1. Fijado el momento incidente \mathbf{p} , $f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ y la onda dispersada asintótica, dada en aproximación de Born en [18.4.7], son prácticamente nulas en cualquier dirección \mathbf{u}_r , salvo para aquellas que cumplen

$$\mathbf{p}' - \mathbf{p} = 2\pi\hbar(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) \quad , \quad h, k, l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad [18.4.9]$$

2. Si \mathbf{u}_r (es decir, \mathbf{p}') verifica [18.4.9], entonces

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \simeq N \cdot S(2\pi\hbar(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*)) \quad [18.4.10]$$

siendo N el número (macroscópicamente grande) de átomos en el cristal.

Ambas propiedades son consecuencia de la triple suma sobre n_1, n_2, n_3 en [18.4.5]. En efecto, si \mathbf{u}_r (y, por tanto, \mathbf{p}') es tal que [18.4.9] *no* se verifica, las exponenciales en la triple suma *no* están en fase y, debido a su enorme número, la interferencia entre todas ellas es completamente destructiva. En consecuencia, la triple suma da un resultado prácticamente nulo. Si, por el contrario, [18.4.9] se cumple para una terna h, k, l determinada, las exponenciales están en fase y la interferencia en [18.4.5] es constructiva, pues

$$\sum_{n_1, n_2, n_3} \exp i2\pi(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*)(n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}) = \sum_{n_1, n_2, n_3} \exp i2\pi(hn_1 + kn_2 + ln_3) \quad [18.4.11]$$

Dado que $\exp i2\pi(hn_1 + kn_2 + ln_3) = 1$, la triple suma en [18.4.11] es del orden del número total de términos en ella, que es N .

Para concluir, diremos que la condición [18.4.9], que determina las interferencias constructivas, no es otra que la ley de Bragg (recuérdese la sección 3.4). Para discusiones más detalladas, véanse la sección 29.4 y la nota 6⁷.

18.5. DISTRIBUCIÓN DE LA CORRIENTE DE PROBABILIDAD: EL TEOREMA ÓPTICO⁸

¿Cómo se distribuye el flujo de probabilidad en la dispersión de una partícula microscópica? A continuación realizaremos un análisis que responderá a esa cuestión y que constituirá una generalización (inevitablemente más complicada) del presentado en el capítulo 9 para fenómenos de reflexión y transmisión en una dimensión.

Para poder llevar a cabo el estudio sin ambigüedades utilizaremos paquetes de ondas similares a [6.3.3]. Específicamente, supondremos que la onda entrante no es la plana [18.1.2], sino el paquete

⁷ Greenberger, D. M. y Overhauser, A. W. (1979): *Rev. Mod. Phys.*, 51, 43. Álvarez-Estrada, R. F. (1974): *Annals of Physics*, 85, 56; (1990): 204, 124. Álvarez-Estrada, R. F. y Villalón, M. E. (1978): *Annals of Physics*, 111, 239.

⁸ Esta sección podría omitirse, quizá, en una primera lectura.

$$\Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) = \left[\int d\Omega_{\mathbf{p}'} A(\Omega_{\mathbf{p}'}) \exp \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r} \right] \exp \left[-i \frac{Et}{\hbar} \right] \quad [18.5.1]$$

donde $\Omega_{\mathbf{p}'}$ denota la pareja de ángulos $\Theta_{\mathbf{p}'}, \varphi_{\mathbf{p}'}$ que caracterizan el momento incidente \mathbf{p}' en coordenadas polares esféricas ($\mathbf{p}' = |\mathbf{p}'|(\text{sen } \Theta_{\mathbf{p}'} \cos \varphi_{\mathbf{p}'}, \text{sen } \Theta_{\mathbf{p}'} \text{sen } \varphi_{\mathbf{p}'}, \text{cos } \Theta_{\mathbf{p}'})$) y, así, $d\Omega_{\mathbf{p}'} = \text{sen } \Theta_{\mathbf{p}'} d\Theta_{\mathbf{p}'} d\varphi_{\mathbf{p}'}$. Por otra parte, $A(\Omega_{\mathbf{p}'})$ es una cierta función «peso» que indica la magnitud con que cada onda plana contribuye a la superposición [18.5.1]. Por hipótesis, la región de integración σ' en [18.5.1], en la cual $A(\Omega_{\mathbf{p}'}) \neq 0$, es un pequeño dominio en torno a un cierto momento medio \mathbf{p} y se cumple la condición siguiente: a) si \mathbf{p}' pertenece a σ' , entonces $-\mathbf{p}'$ está excluido de dicho dominio: véase la figura 18.3. Esta condición simplificará considerablemente el análisis que sigue. Nótese que todas las ondas planas que contribuyen al paquete [18.5.1] tienen la misma energía $E = \mathbf{p}^2/2m = \mathbf{p}'^2/2m$.

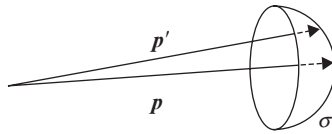


Figura 18.3. La región de integración σ' en [18.5.1].

La onda total a grandes distancias (siendo $\mathbf{r}/|\mathbf{r}|$ arbitrario, pero fijo), en cualquier t , ya no es [18.1.3], sino

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \sim \Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) + \left\{ \int d\Omega_{\mathbf{p}'} A(\Omega_{\mathbf{p}'}) f(\mathbf{p}'', \mathbf{p}') \right\} \frac{\exp \frac{i}{\hbar} (|\mathbf{p}||\mathbf{r}| - Et)}{|\mathbf{r}|} \quad [18.5.2]$$

con $\mathbf{p}^2/2m = E$, $\mathbf{p}'' = |\mathbf{p}|\mathbf{r}/|\mathbf{r}|$. Es evidente que [18.5.2] se obtiene a partir de [18.1.3] utilizando el principio de superposición.

En lo que sigue, nos interesará la forma aproximada de $\Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)$ a grandes distancias, tal como [18.5.2] sugiere. Para obtenerla, utilizaremos la siguiente aproximación asintótica para una onda plana cuando $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ (con $\mathbf{r}/|\mathbf{r}| = (\text{sen } \theta \cos \varphi, \text{sen } \theta \text{sen } \varphi, \text{cos } \theta)$ fijo):

$$\exp i \frac{\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}}{\hbar} \sim \frac{2\pi\hbar}{i|\mathbf{p}'||\mathbf{r}|} \left[\exp i \frac{|\mathbf{p}'||\mathbf{r}|}{\hbar} \delta(\Omega_{\mathbf{r}} - \Omega_{\mathbf{p}'}) - \exp \left(-i \frac{|\mathbf{p}'||\mathbf{r}|}{\hbar} \right) \delta(\Omega_{-\mathbf{r}} - \Omega_{\mathbf{p}'}) \right] \quad [18.5.3]$$

siendo

$$\begin{aligned} \delta(\Omega_{\mathbf{r}} - \Omega_{\mathbf{p}'}) &= \frac{\delta(\theta - \Theta_{\mathbf{p}'})\delta(\varphi - \varphi_{\mathbf{p}'})}{\text{sen } \Theta_{\mathbf{p}'}} , \quad \delta(\Omega_{-\mathbf{r}} - \Omega_{\mathbf{p}'}) = \\ &= \frac{\delta(\pi - \theta - \Theta_{\mathbf{p}'})\delta(\varphi + \pi - \varphi_{\mathbf{p}'})}{\text{sen } \Theta_{\mathbf{p}'}} \end{aligned} \quad [18.5.4]$$

La justificación de [18.5.3] puede verse en la cuestión complementaria 18.3. La sustitución apropiada de [18.5.3] en [18.5.1] conduce a la aproximación buscada para $\Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)$, válida para grandes distancias (con $r/|r|$ fijo)

$$\Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) \sim_{|r| \rightarrow \infty} \frac{2\pi\hbar}{i|r||\mathbf{p}|} \int d\Omega_{p'} A(\Omega_{p'}) \left[\exp \frac{i}{\hbar} |\mathbf{p}||r| \delta(\Omega_r - \Omega_{p'}) - \exp \left(-\frac{i}{\hbar} |\mathbf{p}||r| \right) \delta(\Omega_{-r} - \Omega_{p'}) \right] \quad [18.5.5]$$

Debido a la condición *a*), formulada al principio de esta sección, se tienen las importantes simplificaciones siguientes para [18.5.5]: 1. Se anula cuando ni (θ, φ) ni $(\pi - \theta, \varphi + \pi)$ pertenecen a σ' . 2. Si (θ, φ) pertenece a σ' , la primera función delta ($\delta(\Omega_r - \Omega_{p'})$) en [18.5.5] contribuye, pero la segunda no. 3. Si $(\pi - \theta, \varphi + \pi)$ está en σ' , es la segunda función delta ($\delta(\Omega_r - \Omega_{p'})$) la única que da una contribución no nula a [18.5.5].

La función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, cuyo comportamiento asintótico aparece en [18.5.2] y que coincide con $\Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)$ si $t \rightarrow -\infty$, es un estado estacionario, de modo que

$$\frac{\partial |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2}{\partial t} = 0 \quad [18.5.6]$$

Nótese que $\Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)$, dada en [18.5.1], también satisface [18.5.6].

Sea \mathbf{J}_{in} la corriente de probabilidad [6.7.8] cuando Ψ se sustituye por $\Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)$. Dicha sustitución muestra que \mathbf{J}_{in} es independiente de t , es decir, toma el mismo valor para todo t (y, así, se extiende por una región muy grande del espacio). No escribiremos la expresión detallada de \mathbf{J}_{in} , pues, afortunadamente, no será necesario.

La ecuación de continuidad [6.7.9], aplicada a \mathbf{J}_{in} implica, al integrar sobre todo el espacio tridimensional (físicamente, en $t \rightarrow -\infty$, por tratarse de la corriente incidente, y de hecho, también en cualquier t , pues \mathbf{J}_{in} no depende del tiempo según vimos):

$$\oint_S ds \mathbf{n} \mathbf{J}_{\text{in}} = 0 \quad [18.5.7]$$

S es la superficie esférica del infinito (en $|r| \rightarrow \infty$) y, así, su normal exterior es $\mathbf{n}(=\mathbf{r}/|r|)$. El significado físico de [18.5.7] es claro: el flujo de probabilidad, asociado a \mathbf{J}_{in} , que entra a través de S iguala y se compensa con el que sale. Esto está de acuerdo con la imagen obvia que podemos hacernos de una onda plana y de una superposición simple de éstas, tal como [18.5.1] (que se extiende a una región del espacio prácticamente infinita). Véase la figura 18.4.

Sea \mathbf{J} la corriente de probabilidad dada por [6.7.8], al sustituir Ψ por [18.5.2] (estando, a su vez, $\Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)$ dada en [18.5.5]). Dichas sustituciones muestran que \mathbf{J} es también independiente del tiempo matemáticamente (aunque, físicamente, la consideremos únicamente

si $t \rightarrow +\infty$ por ir asociada a la onda total, tras la interacción). \mathbf{J} viene dada, si (θ, φ) pertenece a σ' (y tras pequeñas simplificaciones) por

$$\mathbf{J}_{|r \rightarrow \infty} \sim \mathbf{J}_{\text{in}} + \mathbf{J}_{\text{dis}} + \mathbf{J}_{\text{int}} \quad [18.5.8]$$

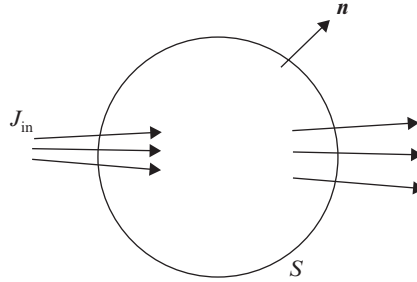


Figura 18.4. El flujo de \mathbf{J}_{in} a través de la superficie esférica del infinito, S , se anula.

$$\mathbf{J}_{\text{dis}} = \frac{|\mathbf{p}|}{m} \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3} \int d\Omega_{p'} d\Omega_{p''} A(\Omega_{p'}) A^*(\Omega_{p''}) f(\mathbf{p}''', \mathbf{p}') f^*(\mathbf{p}''', \mathbf{p}'') \quad [18.5.9]$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\text{int}} = & -\frac{2\pi\hbar}{mi} \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3} \int d\Omega_{p'} d\Omega_{p''} A(\Omega_{p'}) A^*(\Omega_{p''}) \times \\ & \times \{f(\mathbf{p}''', \mathbf{p}') \delta(\Omega_r - \Omega_{p''}) - f^*(\mathbf{p}''', \mathbf{p}'') \delta(\Omega_r - \Omega_{p'})\} \end{aligned} \quad [18.5.10]$$

siendo $E = \mathbf{p}^2/2m = \mathbf{p}''^2/2m = \mathbf{p}'''^2/2m$, $\mathbf{p}''' = |\mathbf{p}'''|(r/|r|)$. Claramente, en [18.5.8] \mathbf{J}_{in} procede de Ψ_{in} , en tanto que \mathbf{J}_{dis} viene de la onda dispersada, es decir, del segundo miembro a la derecha de [18.5.2]. \mathbf{J}_{int} es, precisamente, el término de interferencia entre la onda incidente y la dispersada, pues la corriente es cuadrática en ambas. Análogamente, la expresión de \mathbf{J} para $|r| \rightarrow \infty$, si $(\pi - \theta, \varphi + \pi)$ pertenece a σ' , es, tras unas sencillas cancelaciones (que eliminan sendos términos en $\exp[\pm(2i|\mathbf{p}||r|/\hbar)]$):

$$\mathbf{J}_{|r \rightarrow \infty} \sim \mathbf{J}_{\text{in}} + \mathbf{J}_{\text{dis}} \quad [18.5.11]$$

En este caso, la expresión de \mathbf{J}_{dis} es análoga a la dada en [18.5.9], con el correspondiente significado para \mathbf{p}''' . Nótese la ausencia en [18.5.11] de un término de interferencia, o bien que $\mathbf{J}_{\text{int}} = 0$ si $(\pi - \theta, \varphi + \pi)$ pertenece a σ' . Finalmente, cuando ni (θ, φ) ni $(\pi - \theta, \varphi + \pi)$ pertenecen a σ' , $\Psi_{\text{in}} = 0$ (si $|r| \rightarrow \infty$) y entonces

$$\mathbf{J}_{|r \rightarrow \infty} \sim \mathbf{J}_{\text{dis}} \quad [18.5.12]$$

De nuevo, la expresión para \mathbf{J}_{dis} es la que aparece en [18.5.9], con el \mathbf{p}''' adecuado. Véase la figura 18.5.

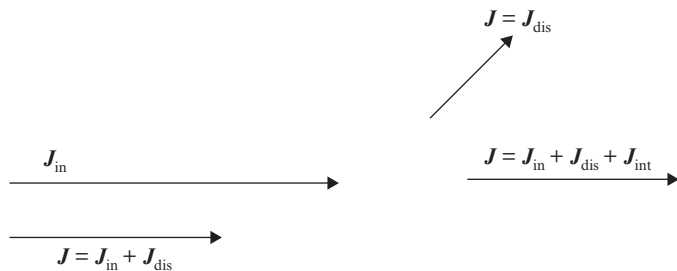


Figura 18.5. La corriente total \mathbf{J} dada en [18.5.8], [18.5.11] y [18.5.12], en comparación con la incidente \mathbf{J}_{in} .

La ecuación de continuidad [6.7.9] en $t \rightarrow +\infty$, junto con [18.5.6], implican, al integrar sobre todo el espacio tridimensional:

$$\oint_S ds \mathbf{n} \mathbf{J} = 0 \quad [18.5.13]$$

donde S es también la superficie esférica del infinito. Véase la figura 18.6.

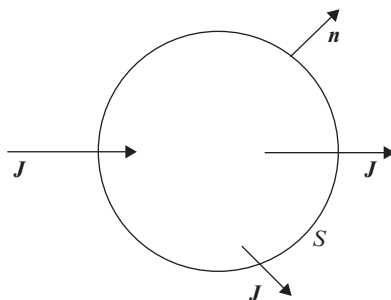


Figura 18.6. El flujo de \mathbf{J} a través de la superficie esférica del infinito S (en $t \rightarrow +\infty$, físicamente) se anula.

Al sustituir [18.5.8], [18.5.11] y [18.5.12] en [18.5.13] y usar [18.5.7] (que es válida en todo instante), se obtiene:

$$\oint_S ds \mathbf{n} \mathbf{J}_{\text{dis}} = - \oint_S ds \mathbf{n} \mathbf{J}_{\text{int}} \quad [18.5.14]$$

es decir, la contribución de \mathbf{J}_{in} se ha cancelado. Nótese que la integral a la derecha de [18.5.14] se extiende solamente a la región σ' , en tanto que la de la izquierda lo hace sobre todo el ángulo sólido. Véase la figura 18.7. Sustitúyanse \mathbf{J}_{dis} y \mathbf{J}_{int} por sus expresiones,

dadas en [18.5.9] y [18.5.10], obsérvese que $ds = |r|^2 d\Omega_r$, e intégrese en [18.5.14] con ayuda de $\delta(\Omega_r - \Omega_{p'})$, $\delta(\Omega_r - \Omega_{p''})$ (según aparecen en [18.5.10]). Tras ello, [18.5.14] pasa a ser:

$$\begin{aligned} & \int d\Omega_{p'} d\Omega_{p''} A(\Omega_{p'}) A^*(\Omega_{p''}) \left[f(\mathbf{p}'', \mathbf{p}') - f^*(\mathbf{p}', \mathbf{p}'') \right] = \\ & = \int d\Omega_{p'} d\Omega_{p''} A(\Omega_{p'}) A^*(\Omega_{p''}) \frac{i|\mathbf{p}|}{2\pi\hbar} \int d\Omega_r f(\mathbf{p}''', \mathbf{p}') f^*(\mathbf{p}''', \mathbf{p}'') \end{aligned} \quad [18.5.15]$$

Ahora ya podemos volver a considerar ondas planas eliminando las funciones «peso». Para ello, hacemos $A(\Omega_{p'}) = \delta(\Omega_{p'} - \Omega_p)$ y $A(\Omega_{p''}) = \delta(\Omega_{p''} - \Omega_p)$, donde Ω_p denota los ángulos (Θ_p, φ_p) que caracterizan el momento medio \mathbf{p} mencionado al principio. Sustituyendo en [18.5.15], se obtiene

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{p}) - f^*(\mathbf{p}, \mathbf{p}) = \frac{i|\mathbf{p}|}{2\pi\hbar} \int d\Omega_r |f(\mathbf{p}''', \mathbf{p})|^2 \quad [18.5.16]$$

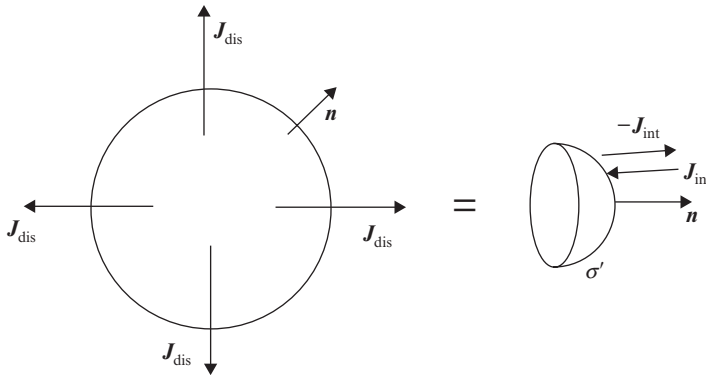


Figura 18.7. Representación gráfica de [18.5.14].

Introduciendo la sección eficaz total σ mediante [18.1.14] y simplificando, [18.5.16] se convierte en

$$\text{Im } f(\mathbf{p}, \mathbf{p}) = \frac{|\mathbf{p}|}{4\pi\hbar} \sigma \quad [18.5.17]$$

que es el llamado Teorema Óptico. Éste es, así, una identidad general que ha de ser satisfecha por la amplitud de dispersión, cualquiera que sea el potencial $V(\mathbf{r})$, como consecuencia de [18.5.6]. La interpretación física es la siguiente. Debido a la interacción entre la onda incidente y el potencial se generan: i) una onda dispersada, que lleva un flujo de probabilidad, ii) una pérdida de flujo de probabilidad de la onda incidente tras atravesar la región ocupada por el potencial, y iii) una interferencia entre Ψ_{in} y la onda dispersada,

que da lugar a \mathbf{J}_{int} . Puede también pensarse que esa interferencia va asociada a la pérdida de flujo de Ψ_{in} . Esto está contenido en [18.5.8], y puede hacerse más patente así. Si $A(\Omega_p) = \delta(\Omega_{p'} - \Omega_p)$, etc., entonces

$$\mathbf{J}_{\text{int}} = -\frac{2\pi\hbar}{mi} \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3} [f(\mathbf{p}, \mathbf{p}) - f^*(\mathbf{p}, \mathbf{p})] \delta(\Omega_r - \Omega_p) \quad [18.5.18]$$

$$\mathbf{J}_{\text{dis}} = \frac{|\mathbf{p}|}{m} \frac{\mathbf{r}}{r^3} |f(\mathbf{p}'', \mathbf{p})|^2 \quad [18.5.19]$$

Nótese que \mathbf{J}_{int} está ahora infinitamente concentrada en la dirección hacia adelante. Supongamos un pequeño elemento de área ΔS perpendicular a \mathbf{p} , en la dirección «hacia adelante» ($\mathbf{r}/|\mathbf{r}| = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$). [18.5.8] muestra que hay una pérdida de flujo de probabilidad en la onda incidente, a saber:

$$\int_{\Delta S} ds \mathbf{n} [\mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}_{\text{dis}}] = \int_{\Delta S} ds \mathbf{n} \mathbf{J}_{\text{dis}} - \frac{2\pi\hbar}{mi} [f(\mathbf{p}, \mathbf{p}) - f^*(\mathbf{p}, \mathbf{p})] \quad [18.5.20]$$

tras haber integrado sobre Ω_r con ayuda de la delta en [18.5.18]. Si $\Delta S \rightarrow 0$, se tiene

$\int_{\Delta S} ds \mathbf{n} \mathbf{J}_{\text{dis}} \rightarrow 0$, pero sigue habiendo una pérdida de flujo dada por

$$\frac{-4\pi\hbar}{m} \text{Im} f(\mathbf{p}, \mathbf{p})$$

(nótese que $\text{Im} f(\mathbf{p}, \mathbf{p}) \geq 0$, de acuerdo con [18.5.17], pues $\sigma \geq 0$). Por otra parte, el flujo que se pierde en la dirección de \mathbf{p} es el que lleva la onda dispersada en todas las direcciones del espacio, de nuevo de acuerdo con lo representado en la figura 18.7 y tal como [18.5.7] muestra.

Según se discutió en la sección 18.1, la interacción de todo el haz incidente homogéneo (que contiene, en total, N'_{in} partículas e incide durante un largo intervalo temporal, T) con el blanco (formado por N átomos) puede sustituirse aproximadamente por un sistema mucho más simple, repetido NN'_{in} veces. Dicho sistema se reduce a una única partícula del haz que interacciona y es dispersada por el potencial. Obsérvese que las diferentes dispersiones individuales no son producidas por el mismo potencial (es decir, por el mismo átomo del blanco) ni ocurren a la vez en las diversas copias, sino que hay desplazamientos espaciales y temporales entre unas y otras.

De acuerdo con la interpretación probabilística (secciones 6.6 y 6.9), Ψ y Ψ_{in} describen y dan la máxima información sobre un gran conjunto de copias idénticas (e idénticamente preparadas) del sistema partícula proyectil individual + potencial sobre ella (debido a una partícula del blanco). Además, y según se discutió en la sección 6.9, se plantea la cuestión de si en cada copia, Ψ y Ψ_{in} podrían describir y dar la máxima información sobre una partícula proyectil individual (compárese con D. I. Blokhintsev, *Mecanique Quantique*,

Masson et Cie., París, 1967). Esto último podría interpretarse como un intento de extender la interpretación probabilística: el módulo cuadrado de la función de onda podría cuantificar la tendencia de una partícula individual a estar y evolucionar en unas regiones u otras. Así, se trataría de dar un sentido a la noción de probabilidad para una partícula individual (una copia individual). Pero ese intento contrasta con el concepto habitual de probabilidad, interpretada como [número de casos favorables]/[número de casos posibles] (es decir, como frecuencia de un resultado concreto) en la repetición de un experimento con muchas copias idénticas, y utilizada en la sección 6.9. Es decir, a partir de una detección única de una partícula individual (una copia única), al no haber repetición del experimento con muchas copias idénticas no se podría generar un conjunto de datos estadísticos ni, por tanto, obtener una distribución de probabilidad (en su acepción habitual)... Este último punto de vista (favoreciendo que el caso general de la función de onda represente un conjunto de copias idénticamente preparadas) estaría apoyado, por ejemplo, por el análisis detallado en P. Mittelstaedt (*The Probabilistic Interpretation of Quantum Mechanics and the Measurement Problem*, capítulo 3, Cambridge University Press, Cambridge, 1998). Dicho punto de vista para el caso general no excluiría, sin embargo, la posibilidad de que esa ampliación de la noción de probabilidad para una copia individual pudiese ser adecuada en ciertos casos y bajo ciertas limitaciones (pero no siéndolo en general). Véase la sección F.7 y, para otros análisis, el apéndice G.

Supongamos que se coloca un detector, D , de partículas microscópicas a una distancia del blanco que es grande comparada con cualquier dimensión de éste. En general, D señala la llegada de cualquier partícula dispersada individualmente en un pequeño ángulo sólido $d\Omega$ en torno a un \mathbf{u}_r determinado el cual, a su vez, se supone diferente de la dirección de incidencia ($\mathbf{p}/|\mathbf{p}|$) del haz. Dicha partícula puede proceder de uno cualquiera de los sistemas simples (es decir, de cualquier copia) y, así, D opera como un detector prácticamente idéntico para todas las copias. Sea $n(\mathbf{u}_r)$ el número *total* de partículas dispersadas que llegan, sucesivamente, a D , procedentes de todas las copias. Es natural interpretar $n(\mathbf{u}_r)/(N'_{in}N)$ como la probabilidad de que una partícula microscópica se disperse dentro del ángulo sólido $d\Omega$ en torno a \mathbf{u}_r . Para el haz homogéneo considerado, que contiene N_{in} partículas *por unidad de volumen* y tiene un flujo $I = N_{in} \cdot |\mathbf{p}|/m$, el número de partículas detectadas en dicho ángulo sólido por unidad de tiempo es $n(\mathbf{u}_r)/T$. Es conveniente (y generalmente aceptado) considerar $n(\mathbf{u}_r)/(N_{in}T)$ en vez de $n(\mathbf{u}_r)/(N'_{in}N)$. Aceptaremos que, cuando N'_{in} y N son grandes, $n(\mathbf{u}_r)/T$ tiende a $NI\sigma(\Omega)d\Omega$ estando $\sigma(\Omega)$ dada en [18.1.13], lo cual clarifica la interpretación de $\sigma(\Omega)$ en términos del conjunto de copias. Este tratamiento es consistente con, y extiende, el presentado para el caso clásico en la sección 4.4. Véase también la sección 34.2.

El análisis precedente podría suscitar algunas dudas del carácter siguiente: *a)* ¿podría ser la sección eficaz total igual a la unidad (sin dimensiones), lo cual expresaría la certeza de que la partícula habría de salir, necesariamente, dispersada en alguna dirección?, o bien, *b)* al integrar $n(\mathbf{u}_r)$ sobre *todas* las posibles direcciones de $\bar{\mathbf{u}}_r$, *extrapolando hasta incluir la dirección de incidencia* (es decir, $\mathbf{u}_r = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$), ¿no debería tenerse

$\int d\Omega n(\mathbf{u}_r) = N'_{in}N$ o, lo que sería equivalente, $\sigma = \int d\Omega \sigma(\Omega) = N'_{in}/T$ en general? Las respuestas a ambas

cuestiones son claramente negativas. En el caso *a*), la razón es muy simple: σ tiene, necesariamente, dimensiones de área. En el caso *b*), ello es debido a la crucial e inevitable interferencia entre la onda incidente y la dispersada, según hemos visto anteriormente en esta sección. Esto último implica que la dependencia de σ en la energía es, en general, totalmente diferente de la contenida en la ecuación (¡errónea, según hemos dicho!) $\sigma = N'_{in}/T$. Obsérvese también que $\sigma \neq 0$ es posible únicamente si hay interacción.

18.6. DISPERSIÓN POR POTENCIALES CENTRALES: (I) DEFASAJES

En esta sección se presentará información adicional acerca de la dispersión de una partícula microscópica por un potencial central, $V(\mathbf{r}) = V(|\mathbf{r}|)$ (sección 11.2; capítulo 12), y de corto alcance, que tiende a cero si $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ como $A|\mathbf{r}|^{-3}$ (siendo A una constante) o más rápidamente. Los potenciales que aparecen en la sección 12.2, en [18.1.1] o en el problema 18.2 pertenecen a esa clase. Nótese que el análisis que sigue no será aplicable estrictamente, en principio, al potencial coulombiano.

Siempre es posible suponer que el momento incidente está dirigido según el eje z positivo: $\mathbf{p} = (0, 0, \hbar k)$ ($k > 0$). Recordando la sección 11.2 (véase también [11.4.10]) expresaremos la función de onda estacionaria como una serie de funciones factorizadas ($r = |\mathbf{r}|$):

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{M=-\ell}^{+\ell} R_{\ell M}(r) Y_{\ell}^M(\theta, \varphi) \quad [18.6.1]$$

$R_{\ell M}(r)$ es una función radial (con números cuánticos de momento angular orbital ℓ , M) que verifica [11.4.15] o [12.1.1] (sustituyendo μ por m) e $Y_{\ell}^M(\theta, \varphi)$ es el armónico esférico correspondiente, el cual depende de los ángulos θ , φ (que caracterizan $\mathbf{r}/r = \mathbf{u}_r$).

En general, la solución de [12.1.1] tiene el siguiente comportamiento asintótico a grandes distancias

$$R_{\ell M}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{C_{\ell M}}{r} \times \text{sen} \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_{\ell} \right) \quad [18.6.2]$$

donde $C_{\ell M}$ y δ_{ℓ} son independientes de r , pero dependen, además de los números cuánticos indicados, de la energía E (o de k : $E = \hbar^2 k^2 / 2m$). La estructura de [18.6.2] y su justificación generalizan, de manera natural, los comportamientos asintóticos de las funciones esféricas de Bessel (sección 12.2 y apéndice C). En efecto, puesto que V es de corto alcance, cuando $r \rightarrow \infty$ es posible despreciar V en la ecuación [12.1.1], la cual se aproxima, así, por la segunda ecuación [12.2.6] (con $-k_2^2$ sustituido por k^2). La solución de esta última está dada en [12.2.8], que, a su vez, y utilizando los comportamientos asintóticos de $j_{\ell}(kr)$ y de $y_{\ell}(kr)$, puede siempre expresarse en la forma de [18.6.2].

Las magnitudes δ_{ℓ} que son números reales, representan, físicamente, las modificaciones de las funciones de onda radiales a grandes distancias debidas al potencial de interacción: reciben el nombre de defasajes y son de gran importancia, como veremos. De hecho,

constituyen la generalización, en el caso actual, de las fases θ y δ ya estudiadas en la sección 9.4 (véase [9.4.2]). Estas características cualitativas de δ_ℓ se hacen más patentes si se tiene presente que

$$\operatorname{sen}\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right) = \frac{1}{2i} \left\{ \exp i\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right) - \exp\left[-i\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right)\right] \right\} \quad [18.6.3]$$

con lo cual, para θ, φ fijos:

$$\Phi(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{M=-\ell}^{+\ell} \frac{C_{\ell M}}{2i} \exp(-i\delta_\ell) \times \left\{ \frac{\exp i\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + 2\delta_\ell\right)}{r} - \frac{\exp\left[-i\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)\right]}{r} \right\} Y_\ell^M(\theta, \varphi) \quad [18.6.4]$$

Así pues, para largas distancias $\Phi(\mathbf{r})$ es, también, una superposición de ondas esféricas entrantes (proporcionales a $r^{-1} \exp[-i(kr - \ell\pi/2)]$) y salientes (proporcionales a $r^{-1} \exp i(kr - \ell\pi/2)$), para todos los posibles valores de ℓ, M . Véase la figura 18.8. De esta forma, vemos que cada onda esférica saliente lleva una fase adicional $2\delta_\ell$ como «recuerdo» de la interacción con el potencial. Un sencillo, pero ilustrativo, ejemplo de defasajes y de su obtención aparece en el ejercicio 18.5.

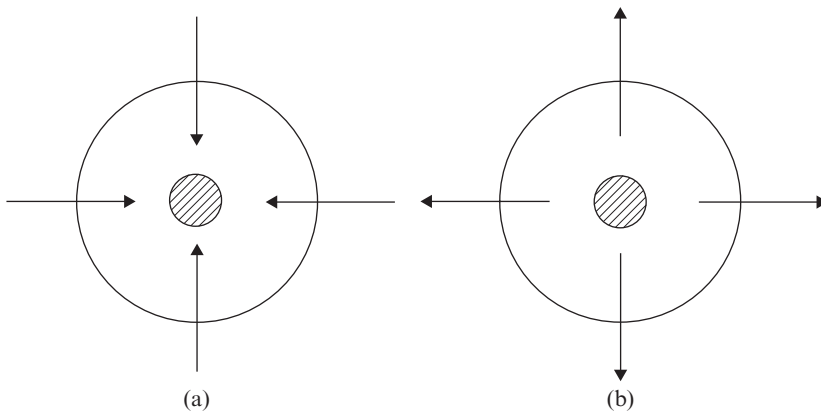


Figura 18.8. Ondas esféricas con momento angular orbital ℓ, M dado y energía definida (E): (a) onda entrante, (b) onda saliente. El círculo interior rayado representa el potencial.

No es de extrañar que exista una relación general entre la amplitud de dispersión, $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$, y el conjunto de todos los defasajes, la cual se obtendrá a continuación. Para ello,

nótese que, a grandes distancias con θ , φ fijos (es decir, \mathbf{u}_r fijo), [18.2.12] y [18.6.1-2] deben ser consistentes, es decir:

$$\exp ikz + \frac{\exp ikr}{r} \times f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{M=-\ell}^{+\ell} C_{\ell M} \operatorname{sen} \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_{\ell} \right) \frac{Y_{\ell}^M(\theta, \varphi)}{r} \quad [18.6.5]$$

A partir de [18.6.5] se obtiene la representación anunciada para $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ en términos de los δ_{ℓ} :

$$f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) f_{\ell} \times P_{\ell}(\cos \theta) \quad [18.6.6]$$

$$f_{\ell} = \frac{\exp i2\delta_{\ell} - 1}{2i} = \exp i\delta_{\ell} \cdot \operatorname{sen} \delta_{\ell} \quad [18.6.7]$$

así como expresiones explícitas para las constantes $C_{\ell M}$. Estas últimas, junto con la justificación de [18.6.6-7] se dan en la cuestión complementaria 18.4. La magnitud f_{ℓ} que depende de la energía, se denomina amplitud de ondas parciales (con momento angular orbital ℓ). Por otra parte, $P_{\ell}(\cos \theta)$ designa el polinomio de Legendre con momento angular orbital ℓ . Nótese que [18.6.6] solamente depende del ángulo θ entre \mathbf{p} y \mathbf{p}' y de la energía E , pero no de φ .

Es interesante expresar las secciones eficaces diferencial y total en términos de los defasajes. Utilizando [18.6.6] en [18.1.13], se obtiene:

$$\sigma(\Omega) = \frac{1}{k^2} \sum_{\ell, \ell'=0}^{\infty} (2\ell + 1)(2\ell' + 1) f_{\ell} \times f_{\ell'}^* P_{\ell}(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) \quad [18.6.8]$$

La sección eficaz total es

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (\operatorname{sen} \delta_{\ell})^2 \quad [18.6.9]$$

La justificación de [18.6.9] se da en el ejercicio 18.6.

La utilización de ondas parciales permite comprobar a posteriori y de manera sencilla el teorema óptico: véase el ejercicio 18.7. Nótese que dicha verificación no explica, en principio, su significado físico, lo cual requirió el elaborado análisis presentado en la sección 18.5.

Los defasajes se simplifican enormemente en el caso de una dispersión a bajas energías, como veremos. Sean $V_m (>0)$, $r_m (>0)$ parámetros que describen, aproximadamente, la intensidad y el alcance medios del potencial. Así, por ejemplo: i) para el pozo esférico (sección 12.2), $V_m = |V_0|$, $r_m = a$, y ii) para el potencial de Yukawa, $V_m = |V_0|$, $r_m = \mu^{-1}$, iii) para el potencial exponencial (problema 18.2), $V_m = |V_0|$, $r_m = d$, ... El régimen de bajas energías se caracteriza por las dos condiciones siguientes: i) $E \ll V_m$, y ii) la longitud de

onda de De Broglie de la partícula microscópica que se dispersa es mucho mayor que r_m , así que $kr_m \ll 1$. En dicho régimen, se tiene el resultado siguiente:

$$k^{2\ell+1} \cotg \delta_\ell = -\frac{1}{a_\ell} + \frac{r_\ell}{2} k^2 + \dots \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad [18.6.10]$$

donde a_ℓ y r_ℓ son constantes. Los puntos suspensivos en [18.6.10] denotan términos que son despreciables frente a los retenidos a la derecha de dicha ecuación si $k \rightarrow 0$. La justificación de [18.6.10] será omitida. De especial interés son a_0 y r_0 , que tienen dimensión de longitud y se denominan longitud de dispersión y alcance efectivo, respectivamente. Específicamente, a_0 suele ser del orden de magnitud del alcance medio, r_m . Para una interacción atractiva (en la que puede haber estados ligados) o una repulsiva (en la cual, en general, no los habrá) se tiene $a_0 < 0$ o $a_0 > 0$, respectivamente. Claramente, [18.6.10] implica que $\delta_\ell \rightarrow 0$ si $k \rightarrow 0$ para todo ℓ . Específicamente, en orden dominante [18.6.10] conduce a

$$\delta_\ell \underset{k \rightarrow 0}{\sim} -a_\ell k^{2\ell+1} \quad [18.6.11]$$

A su vez, la utilización de [8.6.11] en [18.6.6-7] muestra directamente que, en el régimen extremo de bajas energías (es decir, para $k \rightarrow 0$), la contribución de todos los defasajes con $\ell > 0$ es despreciable frente a la de $\ell = 0$ (¡con tal que $a_0 \neq 0$!). Ésta es la gran simplificación anteriormente anunciada. Así pues, en dicho régimen:

$$f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \sim -a_0 \quad [18.6.12]$$

Las secciones eficaces diferencial y total para $k \rightarrow 0$ son, por tanto:

$$\sigma(\Omega) \sim |a_0|^2, \quad \sigma \sim 4\pi a_0^2 \quad [18.6.13]$$

Nótese que la sección eficaz diferencial es, aproximadamente, la misma para cualquier dirección (es decir, es isotropa). Un ejemplo ilustrativo de estas simplificaciones aparece en el ejercicio 18.8.

La analogía de los defasajes δ_ℓ con las fases θ , δ , analizadas en la sección 9.4, sugiere considerar, en el caso tridimensional actual, paquetes de ondas en los que se integra sobre k (comparar con [9.4.1]). En el caso presente, es posible realizar, sin dificultad, un análisis con dichos paquetes muy similar al desarrollado en aquella sección, utilizando también el método de la fase estacionaria (compárese con la sección 6.5). Por brevedad, omitiremos los detalles y nos limitaremos a exponer el resultado. La magnitud

$$2\hbar \frac{d\delta_\ell}{dE} = \frac{2m}{k\hbar} \frac{d\delta_\ell}{dk} \quad [18.6.14]$$

puede interpretarse como el retardo (o adelanto) temporal del paquete asociado a la onda esférica saliente con ℓ , M dados, debido a la interacción (en comparación con una onda esférica saliente libre). Véase la figura 18.9.

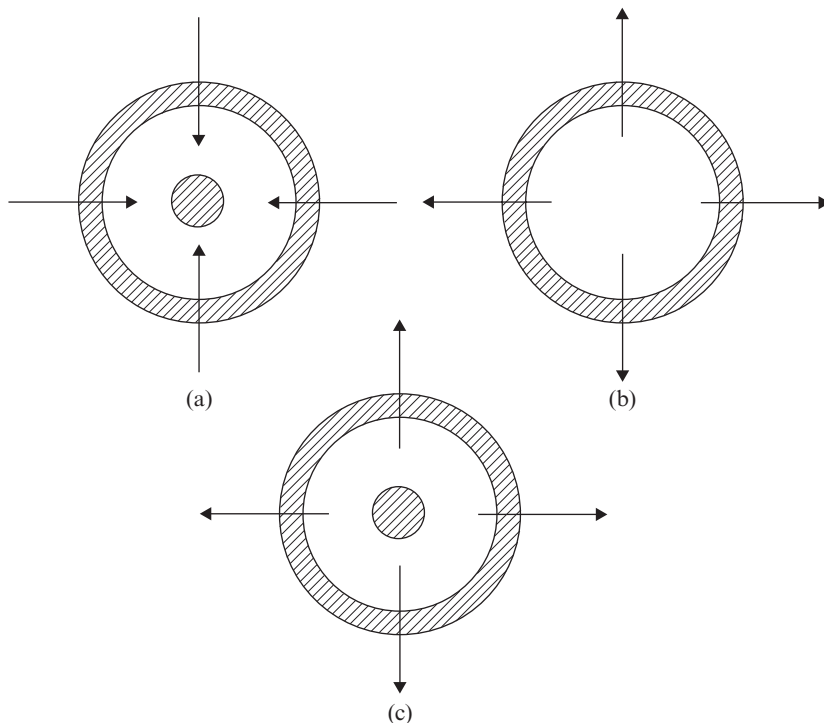


Figura 18.9. Propagación de un paquete de ondas esféricas (con ℓ , M dados). El paquete está representado por el área rayada (entre dos círculos), y el círculo interior rayado en (a) y en (c) representa el potencial. (a) Paquete entrante, (b) Paquete saliente libre ($V = 0$, estando ausente el círculo interior rayado): $\delta_\ell = 0$, y (c) El paquete saliente lleva un retraso (o adelanto) temporal $2\hbar d\delta_\ell/dE$, debido a la interacción ($V \neq 0$), respecto al paquete saliente en ausencia de interacción (caso (b)).

Es posible obtener expresiones aproximadas para las amplitudes de ondas parciales f_ℓ y, por tanto, para los defasajes, en términos del potencial, comparando [18.6.6] con la aproximación de Born. Véase el ejercicio 18.10.

Para un estudio más detallado de los defasajes y sus propiedades, el lector interesado puede consultar las referencias de A. Galindo y P. Pascual y también la de F. J. Ynduráin, previamente citadas en este capítulo.

18.7. DISPERSIÓN POR POTENCIALES CENTRALES: (II) RESONANCIAS

Se dice que existe una resonancia o estado resonante con momento angular orbital $\ell = L$, energía E_R y anchura Γ , siendo $0 < \Gamma \ll E_R$, si para cualquier energía E tal que $E_R - \Gamma/2 < E < E_R + \Gamma/2$ se tiene aproximadamente

$$\delta_L \approx \operatorname{arctg} \frac{(\Gamma/2)}{E_R - E} \quad [18.7.1]$$

Nótese que

- i) Para $E = E_R$, $\delta_L = \pi/2$ (módulo π).
- ii) δ_L crece con la energía en $E_R - \Gamma/2 < E < E_R + \Gamma/2$, puesto que

$$\frac{d\delta_L}{dE} \approx \frac{(\Gamma/2)}{(E_R - E)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad [18.7.2]$$

El lado derecho de [18.7.2] es siempre positivo.

Para $E_R - \Gamma/2 < E < E_R + \Gamma/2$, la correspondiente amplitud de ondas parciales es

$$f_L \approx \frac{(\Gamma/2)}{E - (E_R - i\Gamma/2)} \equiv f_{L,R} \quad [18.7.3]$$

y la amplitud de dispersión es

$$f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \approx \frac{1}{k} (2L+1) \times f_{L,R} \times P_L(\cos \theta) + f_{nR}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \quad [18.7.4]$$

$$f_{nR}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \frac{1}{k} \sum_{\substack{\ell=0 \\ \ell \neq L}}^{\infty} (2\ell+1) f_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \quad [18.7.5]$$

Supongamos que la resonancia con $\ell = L$ es prominente y dominante en dicho intervalo de energías, es decir, que la contribución («no resonante») $f_{nR}(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ es pequeña comparada con el primer término (el resonante) a la derecha de [18.7.4]:

$$f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \approx -\frac{1}{k} (2L+1) \frac{(\Gamma/2)}{E - (E_R - i\Gamma/2)} P_L(\cos \theta) \quad [18.7.6]$$

En tal caso, las correspondientes secciones eficaces diferencial y total en $E_R - \Gamma/2 < E < E_R + \Gamma/2$ son, aproximadamente:

$$\sigma(\Omega) \approx \frac{1}{k^2} (2L+1)^2 \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2} \times [P_L(\cos \theta)]^2 \quad [18.7.7]$$

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2} (2L+1) \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad [18.7.8]$$

Claramente, [18.7.8] se ha obtenido a partir de [18.7.7] y de [18.1.4] tras integrar sobre θ y φ .

Nótese que σ tiene un máximo (relativo, al menos) igual a $4\pi\hbar^2(2L + 1)/2mE_R$ en $E = E_R$. Las ecuaciones [18.7.3] y [18.7.6-8] serán denominadas, genéricamente, fórmulas de Breit-Wigner.

Físicamente, una resonancia representa una onda esférica con momento angular L y energía E en $E_R - \Gamma/2 < E < E_R + \Gamma/2$ (o una superposición de ellas, todas con el mismo $\ell = L$, al variar la energía en dicho intervalo) que, tras incidir, ha sido atrapada por el potencial durante un cierto tiempo τ . Esta última magnitud se conoce como vida media de la resonancia. Puede afirmarse que, en ese rango de energías, el retardo temporal [18.6.14] de la onda esférica con $\ell = L$ (que es positivo) tiene una magnitud superior al de cualquier otra onda esférica con $\ell \neq L$. Más aún, para $E = E_R$, el retardo $2\hbar(d\delta_L/dE)$ tiene un máximo (si no absoluto, al menos relativo) igual a $2\hbar(2/\Gamma) = 4\hbar/\Gamma$, tal como muestra inmediatamente la combinación de [18.6.14] y [18.7.2]. Es enteramente razonable aceptar que, durante el tiempo τ , esa onda temporalmente atrapada por o ligada al potencial constituye una nueva partícula microscópica (distinta de la incidente) en reposo, con momento angular (intrínseco) L , y energía (interna) aproximadamente igual a E_R . Nótese que dicha energía interna *no* está definida con la misma precisión (¡infinita!) que para un estado estrictamente ligado, sino que tiene una imprecisión: es natural afirmar que la imprecisión en la energía es $\pm\Gamma/2$.

Para tiempos más largos que τ , la onda esférica en cuestión deja de estar atrapada y se aleja del potencial en forma de onda saliente con $\ell = L$. Podemos decir que la resonancia era una partícula *inestable* con vida media τ y que la onda esférica saliente, que describe de nuevo a la misma partícula microscópica que incidió, representa «el producto final» de la desintegración del estado resonante. Véase la figura 18.10.

La formación de la resonancia se debe, físicamente, a que la partícula incidente sufre una interacción muy atractiva (debida al potencial) para $\ell = L$, en el intervalo $E_R - \Gamma/2 < E < E_R + \Gamma/2$. La intensidad de dicha interacción justifica que la sección eficaz total tenga el máximo (relativo, al menos) en $E = E_R$ que antes se comentó.

A partir de la discusión precedente es también completamente natural identificar el retardo máximo para $\ell = L$ y $E = E_R$ con la vida media τ , se tiene

$$\Gamma \cdot \tau \sim \hbar \quad [18.7.9]$$

La relación [18.7.9] para una resonancia proporciona un notable ejemplo de la relación de incertidumbre energía-tiempo (compárese con la sección 3.5). Así, la anchura Γ caracteriza la incertidumbre en la energía del estado resonante en tanto que τ representa el tiempo necesario para observar un cambio en dicho estado: su «desintegración» (con emisión de la onda esférica saliente).

Supongamos que hay razones para esperar la existencia de una resonancia dominante en un intervalo energético $E_1 < E < E_2$, y que se conocen las correspondientes secciones eficaces diferencial y total a partir de medidas en experimentos de dispersión, es decir, σ_{exp} y $\sigma(\Omega)_{\text{exp}}$. Un dato indicativo de la formación del estado resonante puede ser un máximo relativo de σ_{exp} en $E = (E_1 + E_2)/2$. Es posible verificar si la hipótesis de su existencia es correcta y determinar sus características físicas como sigue. La comparación entre [18.7.8], reescrita en la forma $B/\{k^2[(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2]\}$, y σ_{exp} al variar la energía en $E_1 < E < E_2$

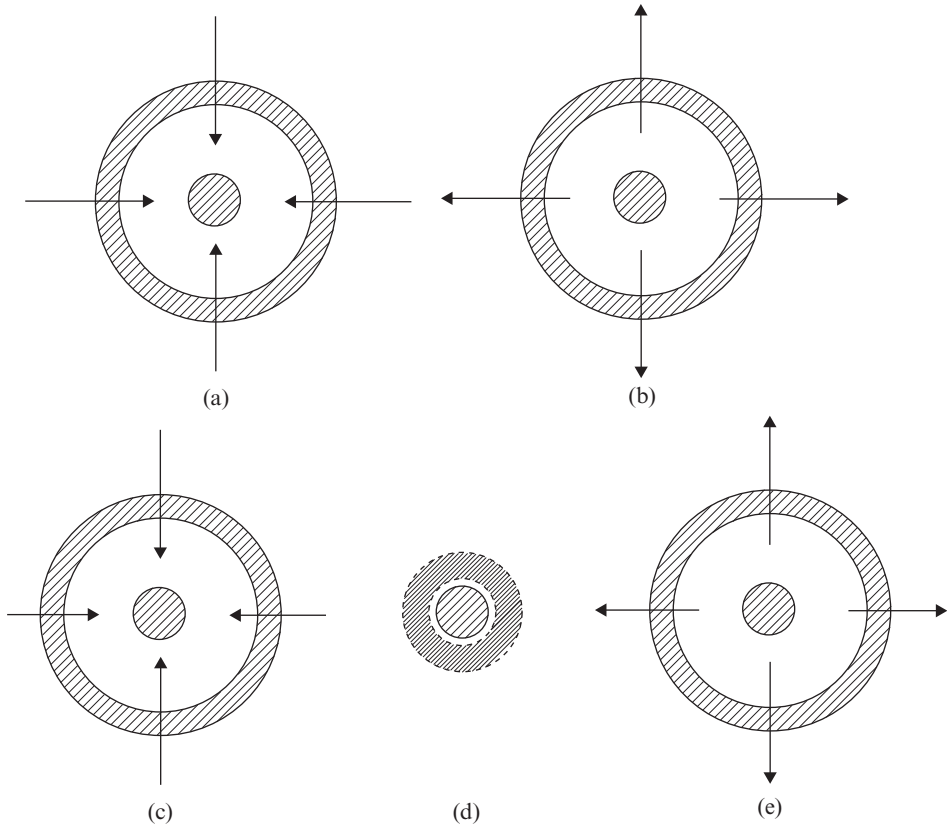


Figura 18.10. Paquete de ondas esféricas no resonante, con $\ell \neq L$, en el intervalo de energías $E_R - \Gamma/2 < E < E_R + \Gamma/2$: (a) entrante, y (b) saliente. Paquete resonante, con $\ell = L$ en el mismo intervalo energético: (c) entrante, (d) atrapado por el potencial durante el tiempo τ (formando una nueva partícula), y (e) saliente, para tiempos superiores a τ . Nótese que el retardo temporal para el paquete resonante es mayor que para el no-resonante.

permite estudiar si $E_R = (E_1 + E_2)/2$ (en el máximo relativo) y si $\Gamma = 2(E_R - E_1) = 2(E_2 - E_R)$, así como verificar si hay un entero $L (\geq 0)$ tal que $B = 4\pi(2L + 1)(\Gamma/2)^2$. Si el estudio da un resultado afirmativo, la interpretación, en términos de la formación de un estado resonante, resulta consistente si los datos para $\sigma(\Omega)_{\text{exp}}$ se describen mediante [18.7.7], con los valores antes determinados de E_R , Γ y L , al variar θ .

El concepto físico de estado resonante, discutido en esta sección, mantiene su validez (con ligeras modificaciones) en los procesos de dispersión de dos partículas microscópicas relativistas entre sí, cuando la interacción no viene descrita por un potencial. La Física de Partículas Elementales, de la que se ofrecerá una introducción más adelante, proporciona importantes ejemplos de resonancias.

CUESTIONES COMPLEMENTARIAS

18.1. Justificación de [18.2.6-7] a partir de [18.2.3].

Obtendremos una representación explícita para K . Buscaremos la solución de [18.2.2] en forma de superposición continua de ondas planas con cualquier vector de onda (\mathbf{k}) y frecuencia (ω), con «peso» $\tilde{K}(\mathbf{k}\omega)$ a determinar:

$$K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \exp i[\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \omega(t - t')] \tilde{K}(\mathbf{k}, \omega) \quad [18.1.a]$$

Al sustituir [18.1.a] en [18.2.2], operar, y usar

$$\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t') = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \exp i[\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \omega(t - t')] \quad [18.1.b]$$

(que es análoga a [7.5.c]) se obtiene

$$\tilde{K}(\mathbf{k}\omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \hbar^2\mathbf{k}^2/2m} \quad [18.1.c]$$

Aún precisamos que se satisfaga [18.2.3]. Nótese que la sustitución de [18.1.c] en [18.1.a] da lugar a una divergencia, al integrar, en $\hbar\omega = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$. Evitaremos esta singularidad modificando \tilde{K} de la forma siguiente:

$$\tilde{K}(\mathbf{k}\omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + i\varepsilon} \quad [18.1.d]$$

con el mismo $i\varepsilon$ que aparecía en [18.2.7]. Además, esta modificación permitirá que se satisfaga [18.2.3]. En efecto, al sustituir [18.1.d] en [18.1.a], la integral resultante en ω ha de hacerse por residuos en el plano complejo. Si $t - t' < 0$, el contorno de integración puede cerrarse mediante un semicírculo de radio muy grande en el semiplano ω superior. En efecto

$$\exp [-i(\text{Re } \omega + i \text{Im } \omega)(t - t')] = \exp [-i \text{Re } \omega(t - t')] \exp [\text{Im } \omega(t - t')]$$

tiende a cero si $\text{Im } \omega \rightarrow +\infty$, pues $t - t' < 0$. Así, la integral añadida sobre dicho semicírculo da una contribución nula. Al usar el teorema de los residuos, el contorno de integración representado en la figura 18.1.a no encierra ninguna singularidad. Por tanto, [18.1.a] (tras usar [18.1.d]) se anula para $t - t' < 0$, es decir, [18.2.3] se satisface.

Puede comprobarse que otras modificaciones de [18.1.c] (por ejemplo, la sustitución de $+i\varepsilon$ por $-i\varepsilon$ en [18.1.d] o la interpretación de [18.1.c] como un valor principal) no permiten que [18.2.3] se satisfaga.

La representación [18.1.a] (usando [18.1.d]) para todo $t - t'$ es equivalente a [18.2.6-7], claramente.

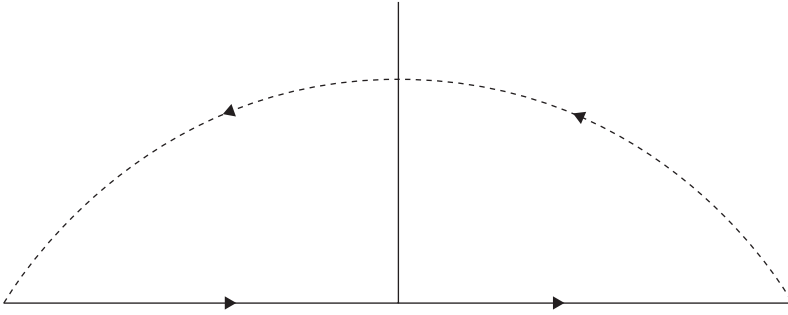


Figura 18.1.a. Circuito de integración en el plano complejo ω para [18.1.a] (cuando se usa [18.1.d]), si $t - t' < 0$. El semicírculo a trazos en el semiplano superior da una contribución que tiende a cero (cuando el radio de dicho semicírculo va a $+\infty$).

18.2. Obtención de [18.2.10] a partir de [18.2.7].

Realizaremos una evaluación explícita de la integral en [18.2.7]. En el espacio \mathbf{k} , elegimos el eje z según $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. En tal caso, $d^3\mathbf{k} = |\mathbf{k}|^2 d|\mathbf{k}| d\Omega_{\mathbf{k}}$ y $d\Omega_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}} d\theta_{\mathbf{k}} d\phi_{\mathbf{k}}$, donde $\theta_{\mathbf{k}}$ es el ángulo «polar» entre \mathbf{k} y $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ y $\phi_{\mathbf{k}}$ es el ángulo acimutal. Así pues, [18.2.7] pasa a ser

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; E) = \int_0^\infty \frac{|\mathbf{k}|^2 d|\mathbf{k}|}{E + i\varepsilon - \hbar^2 |\mathbf{k}|^2 / 2m} \frac{1}{(2\pi)^3} I \quad [18.2.a]$$

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{k}} \int_0^\pi \sin \theta_{\mathbf{k}} d\theta_{\mathbf{k}} \exp(i|\mathbf{k}||\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cos \theta_{\mathbf{k}}) = \\ &= \frac{2\pi}{i} \frac{\exp(i|\mathbf{k}||\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) - \exp(-i|\mathbf{k}||\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{k}||\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \end{aligned} \quad [18.2.b]$$

Tras sustituir I por [18.2.b] en [18.2.a], y estudiar las propiedades del integrando, es fácil obtener ($\lambda = |\mathbf{k}|$, si $\lambda > 0$):

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; E) = \frac{1}{(2\pi)^2 i |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda \lambda \exp i|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\lambda}{E + i\varepsilon - \hbar^2 \lambda^2 / 2m} \quad [18.2.c]$$

Evaluaremos [18.2.c], mediante integración por residuos, en el plano complejo λ . Dado que $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| > 0$, el contorno de integración puede cerrarse mediante un semicírculo de radio muy grande en el semiplano λ superior. La justificación es similar a la discutida en la cuestión complementaria 18.1 en relación con la figura 18.1.a y la omitiremos. El integrando en [18.2.c] tiene polos en

$$\lambda = \begin{cases} \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} + i\varepsilon & [18.2.d] \\ -\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} - i\varepsilon & [18.2.e] \end{cases}$$

Al aplicar el teorema de los residuos, solamente contribuye el polo en el semiplano superior (es decir [18.2.d]). Es inmediato ver que el resultado final es el dado en [18.2.10].

18.3 Demostración de [18.5.3].

La justificación de [18.5.3] es inmediata, a partir de lo siguiente (compárese con el apéndice C): i) el desarrollo de una onda plana en términos de $j_\ell(kr)P_\ell(\cos \Theta)$, siendo Θ el ángulo entre $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ (según el eje z) y \mathbf{r} ($k = |\mathbf{k}|$, $r = |\mathbf{r}|$); ii) el comportamiento asintótico de $j_\ell(kr)$ para grandes distancias, es decir

$$j_\ell(kr) \sim \frac{1}{2kr} \left\{ \exp i \left[kr - (l+1) \frac{\pi}{2} \right] + \exp -i \left[kr - (l+1) \frac{\pi}{2} \right] \right\}$$

iii) el desarrollo de $P_\ell(\cos \Theta)$ como suma de productos de $Y_\ell^m(\Omega_p)^*$ y de $Y_\ell^m(\Omega_r)$ (véase el apéndice C); iv) las simetrías de los armónicos esféricos $Y_\ell^m(\Omega_r)$ al cambiar los ángulos (θ, φ) que caracterizan \mathbf{r} por $(\pi - \theta, \varphi + \pi)$, que determinan $-\mathbf{r}$, y v) la relación de cierre para los armónicos esféricos.

18.4. Demostración de [18.6-7] y determinación de $C_{\ell M}$.

Utilícese el desarrollo de la onda plana $\exp ikz$ en polinomios de Legendre, junto con el teorema de la suma

$$\frac{2\ell + 1}{4\pi} P_\ell(\cos \theta) = \sum_{M=-\ell}^{+\ell} Y_\ell^M(0,0)^* Y_\ell^M(\theta, \varphi) \quad [18.4.a]$$

(puesto que \mathbf{p} , dirigido según el eje z , está caracterizado por $\Theta_p = 0$, $\varphi_p = 0$), dados en el apéndice C. A continuación, considérese $r \rightarrow \infty$ en dicho desarrollo para $\exp ikz$, y recuérdese la fórmula asintótica para $j_\ell(kr)$ dada en la cuestión complementaria 18.3, así como [18.6.4]. Al utilizar todas estas propiedades en [18.6.5] e identificar, a ambos lados de ella, ondas esféricas *entrantes* (es decir, proporcionales a $r^{-1} \exp [-i(kr - \ell\pi/2)]$), se obtiene inmediatamente

$$C_{\ell M} = \frac{4\pi i^\ell}{k} Y_\ell^M(0,0)^* \exp i\delta_\ell \quad [18.4.b]$$

Por otra parte, la identificación de ondas esféricas *salientes* (proporcionales a $r^{-1} \exp i(kr - \ell\pi/2)$) a ambos lados de [18.6.5] junto con [18.4.b] conducen fácilmente a

$$f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} f_{\ell} \left\{ \sum_{M=-\ell}^{+\ell} Y_{\ell}^M(\theta, \varphi) Y_{\ell}^M(0, 0)^* \right\} \times 4\pi \quad [18.4.c]$$

estando f_{ℓ} dada en [18.6.7]. Finalmente, la combinación de [18.4.c] y [18.4.a] implica [18.6.6].

18.5. Dispersión por cristal muy extenso en el plano (x, y) : reflexión y transmisión.

Supondremos que el cristal (sección 18.4) es una lámina cristalina infinita con períodos \bar{a} y \bar{b} en el plano (x, y) y espesor finito $|z| \leq z_0$ ($\mathbf{r} = (x, y, z) \equiv (\bar{r}, z)$), esto es: 1) $V(\bar{r}, z) = V(\bar{r} + n_1\bar{a} + n_2\bar{b}, z)$, $n_1, n_2 = \pm 1, \pm 2, \dots$, y 2) $V(\bar{r}, z) = 0$ si $|z| \geq z_0$. Esa tridimensionalidad genera diferencias con la sección 18.4 y analogías con el capítulo 9 (reflexión y transmisión). La partida microscópica incide desde $z \rightarrow -\infty$, representada por [18.1.2] con $\mathbf{p} = (\bar{p}, p_3)$. La función de onda total es un estado estacionario ([7.10.1-2]), pero [18.1.3] no es una representación asintótica válida para aquella. La función de onda total independiente del tiempo $\Phi(\bar{r}, z)$, que describe la interacción con la lámina, satisface una ecuación integral formalmente análoga a [18.2.9], con dos sustituciones:

i) $\int d^3\mathbf{r}'$ por

$$\int_{\Lambda} d^2\bar{r}' \int_{-z_0}^{+z_0} dz'$$

siendo Λ el paralelogramo determinado por \bar{a} y \bar{b} .

ii) $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; E)$ por

$$G_i(\bar{r} - \bar{r}', \bar{z} - \bar{z}'; E) = - \left[\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right] \sum_{n_1, n_2 = -\infty}^{+\infty} \exp[(i/\hbar)\bar{p}(n_1\bar{a} + n_2\bar{b})] \times \\ \times [\exp[(i(2mE/\hbar^2)^{1/2}((\bar{r} - \bar{r}' - n_1\bar{a} - n_2\bar{b})^2 + (z - z')^2)^{1/2})] \times \\ \times [(\bar{r} - \bar{r}' - n_1\bar{a} - n_2\bar{b})^2 + (z - z')^2]^{-1/2}]$$

La propiedad 1) genera en $G_i(\bar{r} - \bar{r}', z - z'; E)$ la superposición de un número infinito de ondas esféricas salientes. $G_i(\bar{r} - \bar{r}', z - z'; E)$ se aproxima por la suma de un número finito de ondas planas: a) reflejadas, si $z \rightarrow -\infty$, y b) transmitidas, si $z \rightarrow +\infty$. Véase la segunda referencia en la nota 7.

EJERCICIOS

18.1. J_{dis} se obtiene al sustituir $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en [6.7.7] por el segundo término (proporcional a $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$) a la derecha de [18.1.3], cuando $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ en una dirección determinada (θ, ϕ fijos). Justifíquese [18.1.8].

18.2. Una partícula microscópica no-relativista es dispersada por el potencial

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \exp[-|\mathbf{r}|/d]$$

Obtégase la aproximación de Born para la amplitud de dispersión, f_{Born} , y utilícese para obtener una expresión aproximada para la sección eficaz diferencial, $\sigma(\Omega)$.

18.3. Un electrón incidente es dispersado por un átomo de hidrógeno, con núcleo fijo, en su estado fundamental. La interacción que «ve» el electrón incidente se aproxima mediante el potencial ($e < 0$):

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{d^3\mathbf{r}' |\Phi_{100}(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \quad [18.3.a']$$

donde $\Phi_{100}(\mathbf{r}')$ es la función de onda, normalizada, del electrón ligado en el átomo de hidrógeno en el estado fundamental (véase el capítulo 12). Así, la segunda contribución a la derecha de [18.3.a'] puede interpretarse como el potencial electrostático creado por una distribución de carga eléctrica, con densidad $e|\Phi_{100}(\mathbf{r}')|^2$, debida al electrón ligado. Evaluar la correspondiente amplitud de dispersión en aproximación de Born (*sugerencia*: utilizar [18.3.3] y [18.3.5] al operar con [18.3.a']).

18.4. Sea un sistema de varias cargas eléctricas de distintos signos, *con carga total nula*, que puede aproximarse (para distancias grandes comparadas con las separaciones entre las diferentes cargas) por un dipolo eléctrico, de momento dipolar \mathbf{d} , fijo en el espacio. Diferentes moléculas heteropolares (NH_3 , H_2O ...) proporcionan ejemplos físicos de dichos dipolos. Una partícula microscópica con carga eléctrica q incide con momento \mathbf{p} y es dispersada por el dipolo. Si el potencial que «ve» la partícula incidente, debido al dipolo, es

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q\mathbf{d}\cdot\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3} \quad [18.4.a']$$

hállese la amplitud de dispersión $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ en aproximación de Born.

18.5. Se considera el potencial central siguiente:

$$V(\mathbf{r}) = V(r) = \begin{cases} +\infty & , \quad \text{para } 0 < r < a \\ 0 & , \quad \text{para } a < r < +\infty \end{cases}$$

(«esfera dura» de radio a). Hallar las funciones radiales $R_{\ell M}(r)$ y una fórmula general para $\exp 2i\delta_\ell$ (*sugerencia*: recuérdese la sección 12.2 y generalícese [12.2.10] adecuadamente).

18.6. Demostrar [18.6.9] a partir de [18.6.8] (*sugerencia*: recuérdense las propiedades de las integrales de las funciones de Legendre dadas en la sección 11.4).

18.7. Sabiendo que $P_0(\cos \theta) = 1$, $P_1(\cos \theta) = \cos \theta$ y utilizando la primera fórmula de recurrencia para los polinomios de Legendre (véase el apéndice C), hallar $P_\ell(\cos \theta = 1)$ para $\ell = 0, 1, 2, \dots$. A partir de ello, así como de [18.6.6-7] y [18.6.9], demostrar el teorema óptico [18.5.17].

18.8. A partir de la solución del ejercicio 18.5, hallar δ_0 y la longitud de dispersión a_0 . ¿Cómo se interpreta su signo? Compruébese que los demás defasajes δ_ℓ , con $\ell \geq 1$, verifican [18.6.11] y hállese a_ℓ .

18.9. Obtener, para el pozo esférico de la sección 12.2, una ecuación para $\exp i2\delta_\ell$.

18.10. Obtener una fórmula aproximada para la amplitud de ondas parciales f_ℓ en términos de $f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ a partir de [18.6.6] y [18.3.2] (*sugerencia*: véase la solución del ejercicio 18.6).

Soluciones a los ejercicios (capítulos 6 a 18)

6.1. Basta utilizar

$$\left(\Delta - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)(\lambda_1 p'_1 + \lambda_2 p'_2) = \lambda_1 \left(\Delta - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) p'_1 + \lambda_2 \left(\Delta - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) p'_2$$

dato que λ_1 y λ_2 no dependen de r , t , y tener en cuenta que p'_1 y p'_2 verifican [6.1.1].

6.2. Utilícense las relaciones

$$\Delta \Psi = -\frac{(2\pi)^2}{\lambda^2} \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -2\pi v a \sin 2\pi \sigma = -2\pi v [a^2 - \Psi^2]^{1/2}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -(2\pi)^2 v^2 \Psi$$

Si $b_1 = 0$, se tropieza con las dificultades señaladas en relación con [6.2.5]. Si $b_1 \neq 0$, se tiene, además, la imposibilidad generada por la presencia de $[a_2 - \Psi^2]^{1/2}$, que *no* es lineal en Ψ . La inclusión de cualquier número de derivadas superiores respecto al tiempo tropieza con dificultades similares.

6.3. Úsese

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \int d^3 \mathbf{k} A(\mathbf{k}) \exp i[\mathbf{k}\mathbf{r} - 2\pi v t] = \\ & = \int d^3 \mathbf{k} A(\mathbf{k}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \exp i[\mathbf{k}\mathbf{r} - 2\pi v t] \end{aligned}$$

(dato que $A(\mathbf{k})$ no depende de r , t), así como el hecho de que [6.2.11] satisface [6.2.15].

6.4. Opérese como en [6.3.2], reemplazando $-(\hbar^2/2m)\Delta$ por $[-(\hbar^2/2m)\Delta + V(\mathbf{r}, t)]$.

6.5. Se tiene, en una (x) y dos (x, y) dimensiones espaciales, respectivamente,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t)\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y, t) + V(x, y, t)\Psi(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t}$$

siendo $\Psi(x, t)$ y $\Psi(x, y, t)$ las correspondientes funciones de onda.

6.6. Es conveniente expresar $d^3\mathbf{r}$ y ds (el elemento diferencial en la superficie del infinito) en coordenadas polares esféricas r, θ, φ (véase la sección 11.2). Así

$$d^3\mathbf{r} = r^2 dr d\Omega \quad , \quad ds = r^2 d\Omega \quad , \quad d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$$

Para que [6.6.3] sea finita, es preciso que, para θ, φ dados, $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ sea menor o igual que $a/r^{3+\varepsilon}$ cuando $r \rightarrow \infty$, siendo a y ε constantes no negativas (pues así

$\int_{r_0}^{\infty} \frac{dr r^2}{r^{3+\varepsilon}}$ es finita, siendo r_0 grande pero finito). En tal caso, usando [6.7.7],

es fácil estimar que la magnitud de $\oint_S ds \mathbf{n} \mathbf{J}$ es menor o igual que

$\frac{\hbar}{m} 4\pi a r^2 \frac{1}{r} \frac{1}{r^{3+\varepsilon}}$, si S es la superficie del infinito. Es inmediato, entonces, verificar

[6.8.1].

6.7. En una dimensión espacial:

$$J = J(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi(x, t) \left[\frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(x, t) \right] - \Psi^*(x, t) \left[\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right] \right\}$$

$$\frac{\partial |\Psi(x, t)|^2}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} J(x, t)$$

6.8. En general, la respuesta es negativa. Supongamos que la partícula puede llevar asociadas, en dos situaciones distintas a, b , las funciones de onda $\Psi_a(\mathbf{r}, t), \Psi_b(\mathbf{r}, t)$ con densidades de probabilidad $|\Psi_a(\mathbf{r}, t)|^2$ y $|\Psi_b(\mathbf{r}, t)|^2$ (ambas verificando [6.8.6] por hipótesis). Imaginemos la nueva situación en la que la partícula puede estar en a o b , siendo

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N^{1/2}} [\Psi_a(\mathbf{r}, t) + \Psi_b(\mathbf{r}, t)] \quad , \quad N = \int d^3\mathbf{r} |\Psi_a(\mathbf{r}, t) + \Psi_b(\mathbf{r}, t)|^2$$

la nueva función de onda, de acuerdo con el principio de superposición. Nótese que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ está normalizada. La nueva densidad de probabilidad es

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \frac{1}{N} |\Psi_a(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{1}{N} |\Psi_b(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{1}{N} [\Psi_a^*(\mathbf{r}, t)\Psi_b(\mathbf{r}, t) + \Psi_b^*(\mathbf{r}, t)\Psi_a(\mathbf{r}, t)]$$

que es claramente diferente de $|\Psi_a(\mathbf{r}, t)|^2 + |\Psi_b(\mathbf{r}, t)|^2$, es decir, no hay aditividad. Es importante comprender que la razón fundamental para la ausencia de aditividad reside en el término de interferencia $\Psi_a^*\Psi_b + \Psi_b^*\Psi_a$ (que varía con \mathbf{r}, t), más que en el factor constante N^{-1} . Compárese con las discusiones de la sección 3.2 y en F.1 y T.4.1.

7.1. Se tiene

$$\begin{aligned} \frac{dH_{\text{cl}}[\mathbf{p}_{\text{cl}}(t), \mathbf{r}_{\text{cl}}(t), t]}{dt} &= \left[\frac{\partial H_{\text{cl}}}{\partial t} \right]_{\mathbf{p}_{\text{cl}} = \mathbf{p}_{\text{cl}}(t), \mathbf{r}_{\text{cl}} = \mathbf{r}_{\text{cl}}(t)} + [\nabla_{\mathbf{p}_{\text{cl}}} H_{\text{cl}}]_{\mathbf{p}_{\text{cl}} = \mathbf{p}_{\text{cl}}(t), \mathbf{r}_{\text{cl}} = \mathbf{r}_{\text{cl}}(t)} \frac{d\mathbf{p}_{\text{cl}}}{dt} + \\ &+ [\nabla_{\mathbf{r}_{\text{cl}}} H_{\text{cl}}]_{\mathbf{p}_{\text{cl}} = \mathbf{p}_{\text{cl}}(t), \mathbf{r}_{\text{cl}} = \mathbf{r}_{\text{cl}}(t)} \frac{d\mathbf{r}_{\text{cl}}}{dt} \end{aligned}$$

Utilizando [7.3-14] y cancelando términos, se llega directamente a [7.1.8].

7.2. Operando en [7.8.1-2]

$$(\Delta x)^2 = \int d^3\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 (x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2)$$

Utilizando [7.2.2] y [6.8.6] (puesto que $\langle x \rangle$ y $\langle x \rangle^2$ salen fuera de la integral, al ser constantes):

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle^2 + \langle x \rangle^2$$

que implica [7.8.4].

7.3. La justificación constituye una repetición de los desarrollos en las cuestiones complementarias 7.1, 7.2 y 7.3. Se deriva [7.3.a'] y se utilizan [6.4.9] y [6.7.5]. Dado que A puede depender explícitamente del tiempo, contribuye también en principio,

$$\int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \left[\left(\frac{\partial A}{\partial t} \right) \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \right] = \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle \quad [7.3.c']$$

El resto de la justificación es similar a (y, de hecho, sistematiza) lo ya visto en las cuestiones 7.1, 7.2 y 7.3. El término $(1/i\hbar)\langle(AH - HA)\rangle$ en [7.3.b'] generaliza la segunda integral a la derecha de [7.3.a] (tras haber utilizado [7.3.c]).

7.4. Hay que estudiar

$$\frac{d(\Delta p)^2}{dt} = \frac{d}{dt} \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \frac{d}{dt} [\langle p^2 \rangle - (\langle p \rangle)^2] \quad [7.4.a']$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(x, t) \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \Psi(x, t), \quad \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(x, t) \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] \Psi(x, t) \quad [7.4.b']$$

La función de onda $\Psi(x, t)$ se supone normalizada $\left(\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 = 1 \right)$.

Particularizando el estudio de la sección 7.4 a una dimensión, se tiene

$$\frac{d}{dt} (\langle p \rangle)^2 = 2\langle p \rangle \frac{d\langle p \rangle}{dt} = 2\langle p \rangle \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle = 2\langle p \rangle C \quad [7.4.c']$$

Por otra parte, la aplicación de [7.3.b'] implica $(\partial p^2 / \partial t = 0)$

$$\frac{d\langle p^2 \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [p^2, H] \rangle \quad [7.4.d']$$

Dado que $H = (p^2/2m) - Cx$, se tiene, utilizando [7.7.10]

$$[p^2, H] = [p^2, -Cx] = 2C\hbar p \quad [7.4.e']$$

Por tanto

$$\frac{d\langle p^2 \rangle}{dt} = 2C\langle p \rangle \quad [7.4.f']$$

La combinación de [7.4.a'], [7.4.c'] y [7.4.f'] implica directamente $d(\Delta p)^2/dt = 0$.

7.5. Introduciremos

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, t) = \int \frac{d^3 r_1 \dots d^3 r_N}{(2\pi\hbar)^{3N/2}} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \exp \left[\frac{-i}{\hbar} (\mathbf{q}_1 r_1 + \dots + \mathbf{q}_N r_N) \right] \quad [7.5.a']$$

como la función de onda de las N partículas en el espacio de momentos. Suponiendo la validez de [7.12.14],

$$|\tilde{\Psi}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, t)|^2 d^3\mathbf{q}_1, \dots, d^3\mathbf{q}_N \quad [7.5.b']$$

es la probabilidad de que, en t , la partícula 1 tenga su momento en $d^3\mathbf{q}_1$, en torno a \mathbf{q}_1 , ... y la N -ésima el suyo en $d^3\mathbf{q}_N$ en torno a \mathbf{q}_N . La suma infinita y continua de todas estas probabilidades es la certeza, es decir,

$$\int d^3\mathbf{q}_1 \dots d^3\mathbf{q}_N |\tilde{\Psi}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, t)|^2 = 1 \quad [7.5.c']$$

Se tiene

$$\langle \mathbf{p}_j \rangle = \int d^3\mathbf{q}_1 \dots d^3\mathbf{q}_N \mathbf{q}_j |\tilde{\Psi}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, t)|^2 \quad [7.5.d']$$

Las justificaciones son extensiones directas de las del caso de una partícula.

7.6. Nótese que $\mathbf{r}\mathbf{p} = xp_x + yp_y + zp_z$. Se tiene, utilizando las propiedades de los conmutadores [7.7.10-11]:

$$[xp_x, H] = \left[xp_x, \frac{p_x^2}{2m} \right] + [xp_x, V] = [x, p_x^2] \frac{p_x}{2m} + x[p_x, V] = i\hbar \frac{p_x^2}{m} + x \left(-i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \right)$$

con expresiones similares para $[yp_y, H]$ y $[zp_z, H]$. Dado que

$$[\mathbf{r}\mathbf{p}, H] = [xp_x, H] + [yp_y, H] + [zp_z, H]$$

es inmediato obtener [7.6.a'].

7.7. La particularización de [7.4.b'] es, dado que $\mathbf{r}\mathbf{p}$ no depende explícitamente de t :

$$\frac{d\langle \mathbf{r}\mathbf{p} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathbf{r}\mathbf{p}, H] \rangle \quad [7.7.b']$$

Utilizando [7.6.a'], [7.7.b'] pasa a ser

$$\frac{d\langle \mathbf{r}\mathbf{p} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right\rangle - \langle \mathbf{r} \nabla_r V \rangle \quad [7.7.c']$$

Dado que la partícula está en un estado estacionario (normalizado):

$$\langle \mathbf{r}\mathbf{p} \rangle = \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \exp \frac{iEt}{\hbar} \left[(\mathbf{r}\mathbf{p}) \Phi(\mathbf{r}) \exp \left(\frac{-iEt}{\hbar} \right) \right] = \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) [(\mathbf{r}\mathbf{p}) \Phi(\mathbf{r})]$$

que no depende de t . Por tanto, $d\langle \mathbf{r}\mathbf{p} \rangle / dt = 0$ y [7.7.c'] implica [7.7.a'].

7.8. a) Se tiene, para la componente x

$$\begin{aligned} [H, x] &= \left[\frac{p^2}{2m}, x \right] + [V(\mathbf{r}), x] = \frac{1}{2m} [p_x^2 + p_y^2 + p_z^2, x] = \frac{1}{2m} [p_x^2, x] = \\ &= \frac{1}{2m} (p_x [p_x, x] + [p_x, x] p_x) = -\frac{i\hbar}{m} p_x \end{aligned}$$

habiendo utilizado las propiedades de los conmutadores. Resultados análogos son válidos para las componentes y, z . En conjunto, todo esto establece [7.8.a'].

b) Utilizando [7.10.1] y [7.8.a'], se tiene sucesivamente

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} \rangle &= \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \exp iEt (\mathbf{p}[\Phi(\mathbf{r}) \exp(-iEt)]) = \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) [\mathbf{p}\Phi(\mathbf{r})] = \\ &= \frac{mi}{\hbar} \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) [(H\mathbf{r} - \mathbf{r}H)\Phi(\mathbf{r})] \end{aligned}$$

Efectuando integraciones por partes como en la cuestión complementaria 7.3, se obtiene fácilmente

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \frac{mi}{\hbar} \int d^3\mathbf{r} \{ [H\phi(\mathbf{r})]^* \mathbf{r} \phi(\mathbf{r}) - \mathbf{r} [H\phi(\mathbf{r})] \}$$

Haciendo uso, en este punto, de [7.10.3], y puesto que E es real, se obtiene fácilmente el resultado buscado.

7.9. Se utilizará un argumento similar a los de los ejercicios 3.7 y 3.8. La energía es

$$E = \frac{p^2}{2m} + V_0 \frac{|x|}{a}$$

y las aproximaciones cualitativas

$$p \sim \Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x} \sim \frac{\hbar}{|x|}$$

implican

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2m|x|^2} + V_0 \frac{|x|}{a}$$

Soluciones a los ejercicios (capítulos 6 a 18)

La condición de energía mínima implica $\partial E/\partial|x| = 0$. Esta última ecuación se verifica para

$$|x| = \left(\frac{\hbar^2 a}{mV_0} \right)^{1/3}$$

El correspondiente valor mínimo de la energía es

$$E_{\min} = \frac{3}{2} \left(\frac{\hbar^2 V_0^2}{ma^2} \right)^{1/3}$$

que puede tomarse como estimación de la energía del estado fundamental.

7.10. Sólo es preciso modificar, de manera directa, los argumentos presentados en las cuestiones complementarias 7.1, 7.2 y 7.3, respectivamente. Las modificaciones se reducen a efectuar las sustituciones siguientes:

a)

$$\int d^3r \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dx$$

$$\Delta \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\nabla \rightarrow \frac{\partial}{\partial x}$$

b) Integrales de superficie por diferencia de límites en $x \rightarrow \pm\infty$. Así, por ejemplo, [7.1.e] deberá reemplazarse, en el caso unidimensional, por

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \left[x\psi \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) \right] - \lim_{x \rightarrow -\infty} \left[x\psi \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) \right]$$

y análogamente en los otros casos.

8.1. La energía del estado fundamental viene dada por $E_0 = (\hbar\pi)^2/(2ma^2)$, que resulta conveniente escribir para el cálculo como $E_0 = (\hbar c\pi)^2/(2mc^2 a^2)$. Los resultados son:

- a) $E_0 = 3.7 \times 10^{-5} \text{ MeV} \ll m_e c^2 = 0.51 \text{ MeV}$. Aquí la aproximación no relativista será válida.
- b) $E_0 = 37.5 \text{ MeV} > m_e c^2 = 0.51 \text{ MeV}$. Este caso es ultrarrelativista.

8.2. La condición de cuantificación de las energías aparece al imponer que la solución calculada en el ejercicio 9.6 se anule en $x = 0$, es decir,

$$0 = \frac{1}{2\pi(m\alpha\hbar^4)^{1/6}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \cos \frac{1}{\alpha\hbar} \left(\frac{p^3}{6m} - Ep \right)$$

La ecuación anterior se puede escribir en términos de las funciones de Airy, como

$$Ai \left[- \left(\frac{2m}{\alpha^2 \hbar^2} \right)^{1/3} E \right] = 0$$

Los ceros de dichas funciones aparecen tabulados en, por ejemplo, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, editado por M. Abramowitz e I. A. Stegun.

Los cuatro primeros niveles son:

$$E_0 = 2.3381 (\hbar^2 \alpha^2 / 2m)^{1/3}$$

$$E_1 = 4.0879 (\hbar^2 \alpha^2 / 2m)^{1/3}$$

$$E_2 = 5.5206 (\hbar^2 \alpha^2 / 2m)^{1/3}$$

$$E_3 = 6.7867 (\hbar^2 \alpha^2 / 2m)^{1/3}$$

- 8.3.** La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial dado se escribe

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + \lambda\delta(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

Integrando esta ecuación en un entorno $(-\varepsilon, +\varepsilon)$ del origen, se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\phi'(+\varepsilon) - \phi'(-\varepsilon)] + \lambda\phi(0) = EO(\varepsilon)$$

Por tanto, la discontinuidad en la derivada de la función de onda debe ser

$$\phi'(+\varepsilon) - \phi'(-\varepsilon) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \phi(0)$$

Una función que satisface las condiciones requeridas es

$$\phi(x) = A \exp \left(\frac{m\lambda}{\hbar^2} |x| \right)$$

siendo A una constante de normalización que vale $A = \sqrt{-m\lambda/\hbar}$, obviamente $\lambda < 0$ para que existan estados ligados. Sustituyendo la solución encontrada en

la ecuación, lejos del origen, se obtiene que existe un único estado ligado con energía,

$$E = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}$$

8.4. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el sistema de las dos partículas es

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2}{dx_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2}{dx_2^2} + a(x_1 - x_2) + b(x_1 - x_2)^2 \right\} \phi(x_1, x_2) = E\phi(x_1, x_2)$$

Haciendo el cambio de variables

$$X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} \quad x = x_1 - x_2$$

la ecuación se transforma en

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{d^2}{dX^2} - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \frac{d^2}{dx^2} + ax + bx^2 \right\} \phi(X, x) = E\phi(X, x)$$

que se puede separar en dos ecuaciones independientes haciendo

$$\phi(X, x) = \phi_{CM}(X)\phi_r(x)$$

La función $\phi_{CM}(X)$ satisface una ecuación libre que corresponde al movimiento del centro de masas de las dos partículas; la otra función satisface la ecuación

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + ax + bx^2 \right\} \phi_r(x) = E_r \phi_r(x)$$

siendo μ la *masa reducida* del sistema $1/\mu = 1/m_1 + 1/m_2$ y $E = E_{CM} + E_r$. La ecuación anterior puede transformarse en la de un oscilador armónico sin más que escribir el potencial como un cuadrado perfecto sumando y restando la cantidad apropiada. La ecuación que resulta es

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + b(x + a/2b)^2 \right\} \phi_r(x) = (E_r + a^2/4b)\phi_r(x)$$

Las autofunciones del movimiento relativo de las dos partículas son las de un oscilador armónico y, por tanto, sus energías son

$$E_r(n) = (n + 1/2)\hbar\sqrt{2b/\mu} - a^2/4b$$

- 8.5. La condición de empalme continuo de la función de onda y de su derivada en $x = L$ nos conduce a

$$k_1 \cotg k_1 L = -k_2$$

En esta ecuación $k_1 = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$ y $k_2 = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$. Nótese que es la misma condición que encontramos en [8.3.5] para las funciones impares en el pozo cuadrado, como era previsible, pues la barrera infinita en el origen selecciona las funciones que se anulan en $x = 0$. Para los datos numéricos del problema hay dos estados ligados que se obtienen mediante los esquemas iterativos.

$$x_{n+1} = -\arcsen x_n/6.48 + \pi$$

con solución $x_1^* = 2.71$

$$x_{n+1} = -\arcsen x_n/6.48 + \pi$$

con solución $x_2^* = 3.76$, solución espúrea, pues $\cotg 3.76 > 0$.

$$x_{n+1} = -\arcsen x_n/6.48 + 2\pi$$

con solución $x_3^* = 5.32$, que se corresponden con las energías $E_0 = -8.25$ eV y $E_1 = -3.26$ eV.

- 8.6. Usando, por ejemplo, los operadores de creación y destrucción, se llega a

$$\langle n|x^4|n\rangle = \frac{1}{\alpha^4} [6n^2 + 6n + 3] \quad \langle n|p^4|n\rangle = \frac{\hbar^4 \alpha^4}{4} [6n^2 + 6n + 3]$$

de donde, teniendo en cuenta los resultados de la sección 8.4, se obtiene

$$\Delta x^2 = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha^2} \sqrt{n^2 + n + 1} \quad \Delta p^2 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{\sqrt{2}} \sqrt{n^2 + n + 1}$$

Por tanto,

$$\Delta x^2 \Delta p^2 = \frac{\hbar^2}{2} (n^2 + n + 1)$$

- 8.7. Tomando el pozo infinito de longitud L entre 0 y L , se obtiene $\langle x \rangle = L/2$ y $\langle p \rangle = 0$. Análogamente, se calcula $\langle x^2 \rangle = L^2/(n\pi)^2 \sqrt{(n\pi)^2/3 - 1/2}$ y $\langle p^2 \rangle = (\hbar n\pi/L)^2$. Resultando finalmente

$$\Delta x \Delta p = \hbar \sqrt{\frac{(n\pi)^2}{12} - \frac{1}{2}} \geq \frac{\hbar}{2}$$

8.8. A partir de la ecuación de evolución del valor medio, obtenemos

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m} \quad ; \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\omega^2 \langle x \rangle$$

de donde se siguen las ecuaciones

$$\frac{d^2\langle x \rangle}{dt^2} = -\omega^2 \langle x \rangle \quad ; \quad \frac{d^2\langle p \rangle}{dt^2} = -m\omega^2 \langle p \rangle$$

Las soluciones de estas ecuaciones diferenciales son

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_t &= \langle x \rangle_0 \cos \omega t + \frac{\langle p \rangle_0}{m\omega} \operatorname{sen} \omega t \\ \langle p \rangle_t &= \langle p \rangle_0 \cos \omega t - m\omega \langle x \rangle_0 \operatorname{sen} \omega t \end{aligned}$$

8.9. La función de onda oscilará tomando alternativamente valores positivos y negativos. El número de nodos será n y tanto la amplitud como la longitud de onda de las oscilaciones serán mínimas en la región central $x \approx 0$ y máximas en las regiones próximas a los puntos clásicos de retroceso

$$x_{\pm} \approx \pm \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar} \left(n + \frac{1}{2} \right)}$$

Nótese que al aumentar la longitud de onda disminuye la curvatura de la función de onda, con lo que la energía cinética media se hace menor, lo que ocurre cerca de los puntos de retroceso. Por otra parte, al ser menor la velocidad cerca de x_{\pm} , resulta más probable encontrar allí la partícula, con lo que la amplitud de probabilidad se hace mayor.

9.1. La función de onda suma de la onda incidente y reflejada puede escribirse como

$$\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} + \sigma(k')e^{-i(k'x + \omega' t)}$$

siendo $R = |\sigma(k')|^2$ el coeficiente de reflexión. Obviamente, debemos obtener $R = 1$ por tratarse de una barrera infinita. Como la partícula evoluciona libremente, se tiene

$$\omega = \hbar k^2/2m \quad \omega' = \hbar k'^2/2m$$

La posición de la barrera en cada instante de tiempo viene dada por $x_b = vt$ y la función de onda debe anularse en x_b en el instante t . Por tanto

$$\Psi(x_b, t) = 0 = e^{i(kx_b - \omega t)} + \sigma(k')e^{-i(k'x_b + \omega' t)}$$

de donde resulta la relación

$$0 = e^{i(kv - \omega)t} + \sigma(k')e^{-i(k'v + \omega')t}$$

Debe verificarse entonces que $kv - \omega = -k'v - \omega'$, luego

$$k' - k = -\frac{2mv}{\hbar}$$

La velocidad reflejada es la velocidad incidente menos dos veces la velocidad de la barrera.

- 9.2.** Resolviendo la ecuación de Schrödinger en cada una de las zonas e imponiendo la continuidad de la función de ondas y su derivada, se obtiene el coeficiente de transmisión

$$T = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2) \operatorname{sen}^2 k_2 a}$$

donde $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ y $k_2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$. Por tanto, cuando $k_2 a = n\pi$ con $n = 1, 2, \dots$, el seno en el denominador de T se anula y el coeficiente vale 1. Los valores para los que $T = 1$ corresponden a las energías

$$E_n = 2.05n^2 - 1 \text{ (MeV)} \quad n = 1, 2, \dots$$

- 9.3.** Supongamos en primer lugar $E \geq V_0$, la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la región $x \leq -L$ que adoptamos es

$$\phi(x) = e^{ik_1 x} + \sigma e^{-ik_1 x}$$

En la región $-L \leq x \leq 0$ la solución es

$$\phi(x) = A e^{ik_2 x} + B e^{-ik_2 x}$$

En ambas ecuaciones, $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ y $k_2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. Imponiendo la continuidad de la función de ondas y de su derivada en $x = L$, y la condición $\phi(0) = 0$, se obtiene un sistema de ecuaciones lineales que proporciona

$$\sigma = e^{-2ik_1 L} \frac{k_2 \cos k_2 L + ik_1 \operatorname{sen} k_2 L}{-k_2 \cos k_2 L + ik_1 \operatorname{sen} k_2 L}$$

Como era previsible, hemos obtenido $R = |\sigma|^2 = 1$, pues la reflexión tiene lugar en una barrera infinita.

Para calcular el tiempo de retardo, escribamos $\sigma = e^{-2ik_1L + 2i\theta}$. Un cálculo sencillo proporciona

$$\theta(k_1) = -k_1L + \operatorname{arctg}\left(\frac{k_1}{k_2} \operatorname{tg} k_2L\right)$$

de donde se obtiene el tiempo de retardo en la reflexión como

$$t_r = \frac{2m}{\hbar k_1} \left(-L + \frac{2k_1^2 k_2 L - v^2 \operatorname{sen} 2k_2 L}{2k_2 [k_1^2 - v^2 \cos k_2 L]} \right)$$

siendo $v^2 = 2mV_0/\hbar^2$. Para las energías tales que $k_2L = (2n + 1)\pi$ con $n = 1, 2, \dots$, los tiempos de retardo en la reflexión se anulan.

En el caso $0 < E \leq V_0$ se obtiene

$$\sigma = e^{-2ik_1L} \frac{k_2 \operatorname{ch} k_2L + ik_1 \operatorname{sh} k_2L}{-k_2 \operatorname{ch} k_2L + ik_1 \operatorname{sh} k_2L}$$

de donde puede calcularse el tiempo de retardo como

$$t_r = \frac{2m}{\hbar k_1} \left(-L + \frac{2k_1^2 k_2 L - v^2 \operatorname{sh} 2k_2 L}{2k_2 [k_1^2 - v^2 \operatorname{ch} k_2 L]} \right)$$

Nótese que en este caso $k_2^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$.

9.4. Para una barrera de altura $V_0 = 100$ eV la intensidad transmitida es $I_t = 0.99$ mA. Para una barrera de altura $V_0 = 1000$ eV la intensidad transmitida es $I_t = 6 \times 10^{-30}$ mA. Obsérvese cómo al aumentar en un orden de magnitud la altura de la barrera, la intensidad de corriente transmitida ha disminuido en 30 órdenes de magnitud. Estas diferencias de orden de magnitud tan grandes son características del efecto túnel.

9.5. La solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial dado es, suponiendo que el haz incidente viene desde $x = -\infty$,

$$\begin{aligned} \phi(x) &= e^{ikx} + \sigma e^{-ikx} & -\infty < x < -a \\ \phi(x) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx} & -a \leq x \leq a \\ \phi(x) &= \rho e^{ikx} & a \leq x < +\infty \end{aligned}$$

donde $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Para calcular A, B, σ, ρ imponemos la continuidad de la función de onda en $x = \pm a$. La derivada en este tipo de potenciales no puede ser continua (véase el ejercicio 8.3), sino que presenta unas discontinuidades dadas por

$$\phi'(\pm a + \varepsilon) - \phi'(\pm a - \varepsilon) = \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \phi(\pm a)$$

Un cálculo laborioso permite resolver el sistema de ecuaciones, con lo que finalmente obtenemos los coeficientes de transmisión y reflexión,

$$T = |\rho|^2 = \frac{k^4}{k^4 + 4\left(\frac{m\gamma}{\hbar^2}\right)^2 \left(k \cos 2ka + \frac{m\gamma}{\hbar^2} \sin 2ka\right)^2}$$

El coeficiente de reflexión es $R = |\sigma|^2 = 1 - T$.

9.6. Para escribir la ecuación de Schrödinger en espacio de momentos introduzcamos la función de onda en representación de momentos

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{ipx/\hbar} \tilde{\Phi}(p)$$

La ecuación de Schrödinger se escribe ahora como

$$\frac{p^2}{2m} \tilde{\Phi}(p) + \alpha i\hbar \frac{d\tilde{\Phi}(p)}{dp} = E\tilde{\Phi}(p)$$

cuya solución es

$$\tilde{\Phi}(p) = C \exp \left\{ \frac{i}{\alpha\hbar} \left(\frac{p^3}{6m} - Ep \right) \right\}$$

La constante C se determina imponiendo la condición de normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Phi_E(x) \Phi_{E'}^*(x) = \left(\frac{\alpha^2 \hbar^2}{m} \right)^{1/3} \delta(E - E')$$

con lo que se obtiene, salvo una fase,

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi} (m\alpha\hbar)^{1/6}}$$

10.1. Es inmediato:

$$[p_x, f(\mathbf{r})]\Phi(\mathbf{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} [f(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r})] - f(\mathbf{r}) \left(-i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r})}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial x} \Phi(\mathbf{r})$$

10.2. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2) - E \right] \Phi(x, y) = 0$$

cuya solución se halla por separación de variables:

$$E_{n_x, n_y} = (n_x + n_y + 1)\hbar\omega \quad , \quad \Phi_{n_x, n_y}(x, y) = \Phi_{n_x}(x)\Phi_{n_y}(y)$$

siendo $\Phi_{n_x}(x)$, $\Phi_{n_y}(y)$ soluciones del oscilador armónico unidimensional.

Si $E = 2\hbar\omega$, entonces $n_x + n_y = 1$, lo que implica que $n_x = 1$ y $n_y = 0$, o $n_x = 0$ y $n_y = 1$. Así pues,

$$\Phi(x, y) = c_1\Phi_1(x)\Phi_0(y) + c_2\Phi_0(x)\Phi_1(y)$$

El valor esperado de x^2 está dado por: $\langle x^2 \rangle = \langle \Phi | x^2 | \Phi \rangle$. Como $\Phi_1(x)$ es impar y $\Phi_0(x)$ es par,

$$\langle x^2 \rangle = |c_1|^2 \langle \Phi_1(x) | x^2 | \Phi_1(x) \rangle \langle \Phi_0(y) | \Phi_0(y) \rangle + |c_2|^2 \langle \Phi_0(x) | x^2 | \Phi_0(x) \rangle \langle \Phi_1(y) | \Phi_1(y) \rangle$$

Pero

$$\langle \Phi_0(y) | \Phi_0(y) \rangle = \langle \Phi_1(y) | \Phi_1(y) \rangle = 1$$

$$\langle \Phi_0(x) | x^2 | \Phi_0(x) \rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2} x^2 dx = \frac{1}{2} \frac{1}{\alpha^2}$$

$$\langle \Phi_1(x) | x^2 | \Phi_1(x) \rangle = \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2} x^4 dx = \frac{3}{2} \frac{1}{\alpha^2}$$

luego

$$\frac{3}{2}|c_1|^2 + \frac{1}{2}|c_2|^2 = \frac{5}{6}$$

ya que $\alpha^2 = m\omega/\hbar$. Por otra parte, $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, lo que, junto con la relación anterior, implica que

$$|c_1| = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad ; \quad |c_2| = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

El valor esperado de y^2 es

$$\begin{aligned} \langle y^2 \rangle &= |c_1|^2 \langle \Phi_0(y) | y^2 | \Phi_0(y) \rangle \langle \Phi_1(x) | \Phi_1(x) \rangle + |c_2|^2 \langle \Phi_1(y) | y^2 | \Phi_1(y) \rangle \langle \Phi_0(x) | \Phi_0(x) \rangle = \\ &= \frac{1}{3} \frac{1}{2} \frac{1}{\alpha^2} + \frac{2}{3} \frac{3}{2} \frac{1}{\alpha^2} = \frac{7}{6} \frac{\hbar}{m\omega} \end{aligned}$$

y el de V es

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \langle x^2 + y^2 \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \left(\frac{5}{6} \frac{\hbar}{m\omega} + \frac{7}{6} \frac{\hbar}{m\omega} \right) = \hbar\omega$$

- 10.3. a) La función de ondas es nula para $x \leq 0$ o $|y| \geq a/2$. Los autovalores y autofunciones del hamiltoniano son:

$$E = E_1 + E_2 \quad ; \quad \Phi(x, y) = \Phi_1(x)\Phi_2(y)$$

verificándose:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) \right] \Phi_1(x) = E_1 \Phi_1(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + V_2(y) \right] \Phi_2(y) = E_2 \Phi_2(y)$$

De las condiciones de contorno:

$$\Phi_1(0) = 0 \Rightarrow \Phi_1(x) = e^{ik_1x} - e^{-ik_1x} \quad ; \quad E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}$$

$$\Phi_2(a/2) = \Phi_2(-a/2) = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Phi_2(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos qy; & q \frac{a}{2} = \frac{\pi}{2} (2n+1), & n = 0, 1, 2, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} qy; & q \frac{a}{2} = \frac{\pi}{2} 2n, & n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 r^2 \quad , \quad r = 1, 2, 3, \dots$$

y, por tanto,

$$E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 r^2$$

La partícula se propaga según el eje x hacia $x = 0$, donde rebota, estando confinada según la dirección y por un pozo infinito.

Hay estados degenerados si

$$\frac{2m}{\hbar^2} E = k_1^2 + \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 r^2 = k_1'^2 + \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 r'^2$$

Por ejemplo, si la partícula está en un estado con k_1' , r' (siendo $r' > 1$), hay, al menos, otro estado degenerado con

$$r = 1 \quad \text{y} \quad k_1^2 = k_1'^2 + \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 (r'^2 - 1) > k_1'^2$$

b) Estado de energía mínima ($r = 1$):

$$\Phi_2(y) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi y}{a}$$

En el espacio de momentos:

$$\tilde{\Phi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a/2}^{a/2} dy \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi y}{a}\right) e^{-iky} = \frac{2}{a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 - k^2} \cos\left(\frac{ka}{2}\right)$$

La probabilidad pedida será $|\tilde{\Phi}(k_2)|^2 dk_2$.

10.4. Los niveles de energía serán de la forma

$$E_{m_z} = (n+1)\hbar\omega_x + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z \quad \text{con} \quad n = n_x + n_y$$

Para un valor dado de n , tenemos $n+1$ posibilidades para el par $\{n_x, n_y\}$: $\{n_x, n_y\} = \{0, n\}, \{1, n-1\}, \dots, \{n, 0\}$. La degeneración es, por tanto, en general, $n+1$, aunque puede haber una degeneración añadida si existe alguna relación entre ω_x y ω_z .

Si $\omega_x = \omega_y = \omega\left(1 - \frac{\gamma}{3}\right)$ y $\omega_z = \omega\left(1 + \frac{2\gamma}{3}\right)$, los niveles de energía tendrán la forma

$$E = \left[\left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) + \frac{\gamma}{3} (2n_z - n_x - n_y) \right] \hbar\omega$$

Estado fundamental: $E = \frac{3}{2} \hbar\omega$. Degeneración = 1.

1.º estado excitado: $E = \left(\frac{5}{2} - \frac{\gamma}{3} \right) \hbar\omega$. Degeneración = $\begin{cases} 3 & \text{si } \gamma = 0 \\ 2 & \text{si } \gamma > 0 \end{cases}$

2.º estado excitado: $E = \begin{cases} \frac{7}{2} \hbar\omega & \text{si } \gamma = 0 & \text{Degeneración} = 6 \\ \left(\frac{5}{2} + \frac{2\gamma}{3} \right) \hbar\omega & \text{si } 0 < \gamma < 3/4 & \text{Degeneración} = 1 \\ 3\hbar\omega & \text{si } \gamma = 3/4 & \text{Degeneración} = 4 \\ \left(\frac{7}{2} - \frac{2\gamma}{3} \right) \hbar\omega & \text{si } \gamma > 3/4 & \text{Degeneración} = 3 \end{cases}$

10.5. La ecuación de Schrödinger estacionaria en coordenadas cilíndricas para el potencial dado es:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \right] + V(\rho)\Phi = E\Phi$$

Esta ecuación es separable en la coordenada z . Escribiendo $\Phi(\rho, \varphi, z) = F(\rho, \varphi)Z(z)$, sustituyendo en la ecuación de Schrödinger y dividiendo entre Φ , obtenemos:

$$\frac{1}{F} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial F}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(\rho)] = -\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2}$$

Por tanto:

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} = -k_z^2 Z \Rightarrow Z = Ae^{ik_z z} + Be^{-ik_z z} \quad \text{con } k_z \text{ real}$$

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial F}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu} - V(\rho) \right] F = 0$$

La partícula puede moverse libremente en la dirección z , de ahí que la solución sea una onda plana. Multiplicando la ecuación para F por ρ^2 , podemos separar las variables ρ y φ : $F(\rho, \varphi) = R(\rho)\phi(\varphi)$, obteniéndose

$$\frac{\rho}{R} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) + \frac{2\mu\rho^2}{\hbar^2} \left[E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu} - V(\rho) \right] R = -\frac{1}{\phi} \frac{d^2 \phi}{d\varphi^2}$$

Por tanto,

$$\frac{d^2 \phi}{d\varphi^2} = -m^2 \phi \Rightarrow \phi = Ce^{im\varphi}$$

donde m es un número entero debido a la periodicidad en φ .

Como se ha visto en el capítulo 11, ϕ es una autofunción de la componente z del momento angular. La ecuación para R queda, entonces,

$$\rho \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) + \left\{ \frac{2\mu\rho^2}{\hbar^2} \left[E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu} - V(\rho) \right] - m^2 \right\} R = 0$$

Las soluciones deben ser regulares en el origen y anularse en el infinito, de forma que la integral $\int_0^\infty |R(\rho)|^2 \rho d\rho$ sea finita. De la resolución de la ecuación se obtiene el espectro de energías.

11.1.
$$L_+ P \Phi(r, \theta, \varphi) = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Phi(r, \pi - \theta, \pi + \varphi) =$$

$$= \hbar e^{i(\pi + \varphi)} \left[\frac{\partial}{\partial(\pi - \theta)} + i \cot(\pi - \theta) \frac{\partial}{\partial(\pi + \varphi)} \right] \Phi(r, \pi - \theta, \pi + \varphi) =$$

$$= PL_+ \Phi(r, \theta, \varphi)$$

De forma análoga, puede demostrarse para L_- y L_z , por lo que $[L, P] = 0$. Supongamos que un estado $|\ell, m\rangle$ tiene una paridad p_m . Como $[L_+, P] = 0$,

$$\left. \begin{aligned} PL_+ |\ell, m\rangle &= \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} p_{m+1} |\ell, m+1\rangle \\ L_+ P |\ell, m\rangle &= \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} p_m |\ell, m+1\rangle \end{aligned} \right\} \Rightarrow p_{m+1} = p_m$$

11.2. De las expresiones [11.5.9-10], obtenemos

$$L_x^2 = \frac{1}{4} (L_+^2 + L_-^2 + L_+ L_- + L_- L_+)$$

$$L_y^2 = \frac{1}{4} (-L_+^2 - L_-^2 + L_+ L_- + L_- L_+)$$

De la acción de L_+ y L_- sobre los armónicos esféricos, se deduce que

$$L_- L_+ |\ell, m\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} L_- |\ell, m+1\rangle = \hbar^2 [\ell(\ell+1) - m(m+1)] |\ell, m\rangle$$

$$L_+ L_- |\ell, m\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)} L_+ |\ell, m-1\rangle = \hbar^2 [\ell(\ell+1) - m(m-1)] |\ell, m\rangle$$

Como los kets $|\ell, m\rangle$ son ortogonales, es inmediato que:

$$\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \frac{1}{4} \hbar^2 [2\ell(\ell+1) - m(m+1) - m(m-1)] = \frac{1}{2} \hbar^2 [\ell(\ell+1) - m^2]$$

de forma que $\langle L^2 \rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2$, como era de esperar.

Al ser $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$, las indeterminaciones quedan:

$$\Delta L_x = \Delta L_y = \hbar \sqrt{\frac{\ell(\ell+1) - m^2}{2}}$$

11.3. Escribiendo x^2 en coordenadas esféricas y transformando convenientemente, se obtiene que

$$\begin{aligned} x^2 &= r^2 \operatorname{sen}^2 \theta \cos^2 \varphi = r^2 \left[\frac{1}{4} \operatorname{sen}^2 \theta (e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}) + \frac{1}{2} (1 - \cos^2 \theta) \right] = \\ &= r^2 \left[\frac{1}{4} \operatorname{sen}^2 \theta (e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}) + \frac{1}{3} - \frac{1}{6} (3 \cos^2 \theta - 1) \right] = \\ &= r^2 \left\{ \sqrt{\frac{2\pi}{15}} [Y_2^2(\theta, \varphi) + Y_2^{-2}(\theta, \varphi)] + \sqrt{\frac{4\pi}{9}} Y_0^0(\theta, \varphi) - \sqrt{\frac{4\pi}{45}} Y_2^0(\theta, \varphi) \right\} \end{aligned}$$

La suma de los cuadrados de los coeficientes de los distintos armónicos esféricos es

$$\frac{4\pi}{15} + \frac{4\pi}{9} + \frac{4\pi}{45} = \frac{4\pi}{5}$$

con lo que podemos escribir

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} N r^2 e^{-r^2/a^2} \left\{ \sqrt{\frac{5}{9}} Y_0^0(\theta, \varphi) - \frac{1}{3} Y_2^0(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{6}} [Y_2^2(\theta, \varphi) + Y_2^{-2}(\theta, \varphi)] \right\}$$

La expresión de las variables angulares entre corchetes está normalizada. Por tanto, los resultados posibles de la medida de L^2 son 0 y $2\hbar^2$, con probabilidad 5/9 y 4/9, respectivamente, y los de la medida de L_z son 0, $2\hbar$ y $-2\hbar$, con probabilidades respectivas 2/3, 1/6 y 1/6.

11.4. Es inmediato. Operando, por ejemplo,

$$\begin{aligned} [L_z, x] &= [xp_y - yp_x, x] = -y[p_x, x] = i\hbar y \\ [L_z, p_x] &= [xp_y - yp_x, p_x] = [x, p_x]p_y = i\hbar p_y \\ [L_z, p^2] &= [L_z, p_x^2] + [L_z, p_y^2] + [L_z, p_z^2] = \\ &= [L_z, p_x]p_x + p_x[L_z, p_x] + [L_z, p_y]p_y + p_y[L_z, p_y] = 0 \end{aligned}$$

11.5. Las autofunciones de L_x serán ciertas combinaciones lineales de vectores de la base del subespacio: $|\Phi\rangle = c_1|1, 1\rangle + c_0|1, 0\rangle + c_{-1}|1, -1\rangle$. Como $L_x = (L_+ + L_-)/2$, se deduce fácilmente que

$$L_x|\Phi\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} [c_0|1, 1\rangle + (c_1 + c_{-1})|1, 0\rangle + c_0|1, -1\rangle]$$

Llamando α al autovalor correspondiente, tendrá que verificarse que

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}} [c_0|1, 1\rangle + (c_1 + c_{-1})|1, 0\rangle + c_0|1, -1\rangle] = \alpha [c_1|1, 1\rangle + c_0|1, 0\rangle + c_{-1}|1, -1\rangle]$$

Igualando los coeficientes de los distintos kets, obtenemos el sistema de ecuaciones lineales homogéneas

$$\begin{cases} -\alpha c_1 + \frac{\hbar}{\sqrt{2}} c_0 = 0 \\ \frac{\hbar}{\sqrt{2}} c_1 - \alpha c_0 + \frac{\hbar}{\sqrt{2}} c_{-1} = 0 \\ \frac{\hbar}{\sqrt{2}} c_0 - \alpha c_{-1} = 0 \end{cases}$$

Para que tenga solución, el determinante de los coeficientes ha de ser nulo, con lo que obtenemos la ecuación de autovalores

$$-\alpha^3 + \alpha\hbar^2 = 0 \Rightarrow \alpha = 0, \pm\hbar$$

Obtenemos el mismo conjunto de autovalores que para L_z , como era de esperar, ya que la elección del eje z es totalmente arbitraria. Para obtener las autofunciones, basta con sustituir, en cada caso, α por el autovalor correspondiente y resolver las ecuaciones para los coeficientes. El resultado es

$$\alpha = \hbar : |\Phi\rangle = \frac{1}{2}|1,1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle + \frac{1}{2}|1,-1\rangle$$

$$\alpha = 0 : |\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,1\rangle - |1,-1\rangle)$$

$$\alpha = -\hbar : |\Phi\rangle = \frac{1}{2}|1,1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle + \frac{1}{2}|1,-1\rangle$$

11.6. Como $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$,

$$(\Delta L_x)^2 + (\Delta L_y)^2 + (\Delta L_z)^2 = \langle L^2 \rangle - \langle L_z \rangle^2$$

Un estado con número cuántico azimutal ℓ puede escribirse como

$$|\Phi\rangle = \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_m |\ell, m\rangle$$

Por tanto, para dicho estado,

$$\langle L^2 \rangle - \langle L_z \rangle^2 = \hbar^2 \left[\ell(\ell+1) - \left(\sum_{m=-\ell}^{\ell} m |c_m|^2 \right)^2 \right]$$

La suma de los cuadrados de las indeterminaciones será mínima si $c_m = \delta_{\ell m}$ o $c_m = \delta_{-\ell m}$, es decir, si $|\Phi\rangle = |\ell, \pm\ell\rangle$.

Eligiendo el plano xz como aquel que forman el eje dado y el z , tenemos

$$L_\alpha = L_z \cos \alpha + L_x \sin \alpha$$

y, por tanto,

$$L_\alpha^2 = L_z^2 \cos^2 \alpha + L_x^2 \sin^2 \alpha + \sin \alpha \cos \alpha (L_z L_x + L_x L_z)$$

De los resultados del ejercicio 11.2 es inmediato que

$$\langle L_\alpha \rangle = \pm \ell \hbar \cos \alpha, \quad \langle L_\alpha^2 \rangle = \ell^2 \hbar^2 \cos^2 \alpha + \frac{1}{2} \hbar^2 [\ell(\ell+1) - \ell^2] \sin^2 \alpha$$

de donde:

$$\Delta L_\alpha = \hbar \sqrt{\frac{\ell}{2}} \sin \alpha$$

- 12.1.** Del comportamiento de las funciones esféricas de Bessel cerca del origen, se deduce que

$$ik_2 \frac{h_{\ell-1}^{(1)}(ik_2 a)}{h_\ell^{(1)}(ik_2 a)} \approx -\frac{k_2^2 a}{2\ell-1} \quad \text{cuando } k_2 a \ll 1$$

por lo que, en el límite $E = 0$ ($k_2 = 0$), la condición [12.2.13] pasa a ser

$$j_{\ell-1}(k_1 a) = j_{\ell-1}\left(\sqrt{-\frac{2\mu V_0 a^2}{\hbar^2}}\right) = 0$$

Por tanto, si el parámetro $-V_0 a^2$ verifica que $\sqrt{-2\mu V_0 a^2 / \hbar^2}$ es un cero de una función esférica de Bessel de primera clase $j_{\ell-1}$, existirá un estado ligado con $E = 0$ y número cuántico azimutal ℓ . Sólo nos queda por ver si la autofunción correspondiente tiene norma finita. La solución para $r < a$ sabemos que es $j_\ell(k_1 r)$. Si $r > a$, la ecuación [12.2.6] pasa a ser, cuando $E = 0$,

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R = 0$$

con solución general

$$R(r) = Ar^\ell + Br^{-\ell-1}$$

Como la función debe anularse en el infinito, $R(r) = Br^{-\ell-1}$. La función de ondas resultante es de cuadrado integrable, excepto en el caso $\ell = 0$, para el que no existen soluciones con $E = 0$.

Consideremos ahora un cierto valor de $\ell > 0$ fijo y un pozo con una profundidad $|V_0|$ para la que no existen estados ligados con el valor de ℓ dado. Si ahora vamos aumentando $|V_0|$, llegará un momento en que $\sqrt{-2\mu V_0 a^2 / \hbar^2}$ será igual al primer cero de la función de Bessel $j_{\ell-1}$. Para ese valor de $|V_0|$ existe un estado ligado con $E = 0$ y número cuántico azimutal ℓ . Si seguimos aumentando $|V_0|$, aparecerán nuevos estados ligados cada vez que se verifique que $j_{\ell-1}(\sqrt{-2\mu V_0 a^2 / \hbar^2}) = 0$. Por tanto, el número de estados ligados con un valor de ℓ dado es el número de ceros de la función de Bessel $j_{\ell-1}(\rho)$ en el intervalo $0 < \rho \leq \sqrt{-2\mu V_0 a^2 / \hbar^2}$. Cuando $\ell = 0$, el número de estados ligados es conocido del pozo unidimensional (véase sección 12.2).

12.2. La solución de la ecuación radial será

$$R(r) = \begin{cases} A j_{\ell} \left(\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} r \right) & \text{para } r < a \\ 0 & \text{para } r \geq a \end{cases}$$

Los niveles de energía vienen, por tanto, dados por la condición de empalme

$$j_{\ell} \left(\sqrt{\frac{2\mu E a^2}{\hbar^2}} \right) = 0$$

y, consecuentemente, pueden escribirse como

$$E_{n\ell} = \frac{\hbar^2 c_{n\ell}^2}{2\mu a^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

donde $c_{n\ell}$ representa el cero n -ésimo de la función de Bessel j_{ℓ} . De la tabla es inmediato que el orden de los primeros niveles es: $1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 1h, 3s, \dots$. Los valores de las energías vienen dados por la fórmula para $E_{n\ell}$.

12.3. a) Sólo tenemos que integrar en la coordenada radial,

$$\langle r \rangle = \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \int_0^{\infty} r^3 e^{-2r/a_0} dr = \frac{3}{2} a_0$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \int_0^{\infty} r^4 e^{-2r/a_0} dr = 3a_0^2$$

de donde, $\Delta r = \frac{\sqrt{3}}{2} a_0$.

b) Al ser p un operador impar, $\langle p \rangle = 0$.

c) Pasando al espacio de momentos,

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta e^{-r/a_0} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

Como la autofunción es esféricamente simétrica, tenemos libertad para elegir la dirección del eje z . Por conveniencia, tomamos el eje z en la dirección del vector de onda \mathbf{k} , de forma que

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \int_0^\infty r^2 dr e^{-r/a_0} \int_0^\pi \sin \theta d\theta e^{-ikr \cos \theta} = \\ &= \frac{1}{\pi \sqrt{2a_0^3}} \int_0^\infty r^2 dr e^{-r/a_0} \frac{1}{ikr} (e^{ikr} - e^{-ikr}) = \frac{1}{\pi k} \sqrt{\frac{2}{a_0^3}} \int_0^\infty r e^{-r/a_0} \sin(kr) dr = \\ &= \frac{(2a_0)^{3/2}}{\pi} \frac{1}{(1+k^2 a_0^2)^2} \end{aligned}$$

donde $k = |\mathbf{k}|$. La probabilidad pedida será $|\tilde{\Phi}(\mathbf{k})|^2 d^3\mathbf{k}$.

12.4. Como z es impar y $\Phi_{100}(\mathbf{r})$ y $\Phi_{210}(\mathbf{r})$ son, respectivamente, par e impar:

$$\langle z \rangle = \frac{1}{2} e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \langle \Phi_{100} | z | \Phi_{210} \rangle + \frac{1}{2} e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} \langle \Phi_{210} | z | \Phi_{100} \rangle$$

Ahora bien,

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{100} | z | \Phi_{210} \rangle &= \\ &= \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} r \cos \theta \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \frac{1}{a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta = \\ &= \frac{1}{4\pi\sqrt{2}a_0^4} \int_0^\infty r^4 dr e^{-3r/2a_0} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta d\theta = \frac{256}{243\sqrt{2}} a_0 \end{aligned}$$

luego

$$\langle z \rangle = \frac{256}{243\sqrt{2}} a_0 \cos \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}$$

$\langle p_z \rangle$ puede calcularse usando la relación $[H, z] = -(i\hbar/m)p_z$, o bien directamente de su definición. Se obtiene que

$$\langle p_z \rangle = -\frac{256}{243\sqrt{2}} ma_0 \frac{E_1 - E_2}{\hbar} \operatorname{sen} \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}$$

Es claro que

$$\langle p_z \rangle(t) = m \frac{d}{dt} \langle z \rangle(t)$$

12.5. De las expresiones de las primeras autofunciones del átomo de hidrógeno, podemos escribir

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \Phi_{200}(\mathbf{r}) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Phi_{210}(\mathbf{r}) + \frac{i}{2\sqrt{2}} \Phi_{211}(\mathbf{r}) + \frac{i}{2\sqrt{2}} \Phi_{21-1}(\mathbf{r})$$

Como la suma de los módulos al cuadrado de los coeficientes vale 1, la función de ondas $\Phi(\mathbf{r})$ está normalizada.

Es inmediato que

$$L^2 \Phi(\mathbf{r}) = 2\hbar^2 \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \Phi_{210}(\mathbf{r}) + \frac{i}{2\sqrt{2}} \Phi_{211}(\mathbf{r}) + \frac{i}{2\sqrt{2}} \Phi_{21-1}(\mathbf{r}) \right]$$

por tanto, $\langle L^2 \rangle = (3/2)\hbar^2$.

De la misma forma,

$$L_z \Phi(\mathbf{r}) = \frac{i}{2\sqrt{2}} \hbar [\Phi_{211}(\mathbf{r}) - \Phi_{21-1}(\mathbf{r})] \text{ y } \langle L_z \rangle = 0$$

Al medir L_z obtendremos los resultados $0, \hbar, -\hbar$, con probabilidades $3/4, 1/8$ y $1/8$, respectivamente.

12.6. 1. De *a*) se sigue que $n = 2, 3$. De *b*), que $\ell = 1, 2$. De *c*), que $m = 0$. Por tanto,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = c_1 \Phi_{210}(\mathbf{r}) e^{-iE_2 t/\hbar} + [c_2 \Phi_{310}(\mathbf{r}) + c_3 \Phi_{320}(\mathbf{r})] e^{-iE_3 t/\hbar}$$

donde

$$\left. \begin{array}{l} |c_1|^2 = \frac{1}{2} \quad , \quad |c_2|^2 + |c_3|^2 = \frac{1}{2} \quad \text{por a)} \\ |c_1|^2 + |c_2|^2 = \frac{1}{2} \quad , \quad |c_3|^2 = \frac{1}{2} \quad \text{por b)} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow |c_1| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad , \quad |c_2| = 0 \quad , \quad |c_3| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Así pues,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{210}(\mathbf{r})e^{-iE_2t/\hbar} + \Phi_{320}(\mathbf{r})e^{-iE_3t/\hbar} e^{i\alpha}]$$

donde α es una fase.

2. La densidad de probabilidad es

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \frac{1}{2} \{ |\Phi_{210}(\mathbf{r})|^2 + |\Phi_{320}(\mathbf{r})|^2 + 2 \operatorname{Re} [\Phi_{210}^*(\mathbf{r})\Phi_{320}(\mathbf{r})e^{i(E_2-E_3)t/\hbar} e^{i\alpha}] \}$$

Como $\Phi_{210}(\mathbf{r})$ y $\Phi_{320}(\mathbf{r})$ son reales,

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \frac{1}{2} \left\{ \Phi_{210}^2(\mathbf{r}) + \Phi_{320}^2(\mathbf{r}) + 2\Phi_{210}(\mathbf{r})\Phi_{320}(\mathbf{r}) \cos \left[\frac{(E_2 - E_3)t}{\hbar} + \alpha \right] \right\}$$

que varía con el tiempo sinusoidalmente.

3. Hay que evaluar $\langle H \rangle$ y $\langle H^2 \rangle$. Operando,

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2}(E_2 + E_3) \quad , \quad \langle H^2 \rangle = \frac{1}{2}(E_2^2 + E_3^2)$$

Luego,

$$\Delta E = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \frac{1}{2}(E_3 - E_2)$$

$$4. \quad \langle L^2 \rangle = \frac{1}{2}(2\hbar^2 + 6\hbar^2) = 4\hbar^2.$$

12.7. i) La función $\Phi(\mathbf{r})$ se puede escribir como

$$\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \Phi_{321}(\mathbf{r}) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Phi_{32-1}(\mathbf{r})$$

por lo que $\Phi(\mathbf{r})$ es autoestado de H con autovalor $E_3 = -13.6/9$ eV, es autoestado de L^2 con autovalor $6\hbar^2$ y no lo es de L_z .

ii) La condición a) nos dice que Ψ es combinación lineal de funciones con $m = 1$. La b) que las energías de las funciones que entran en la combinación lineal verifican que $-13.6 < -n^2$ y, por tanto, $n = 1, 2$ o 3 . Pero si $n = 1$, $\ell = m = 0$, por lo que $n \neq 1$. Así pues, debe ser una combinación lineal de $\Psi_{n\ell m}$ con $n = 2, 3$ y $m = 1$, es decir,

$$\Psi = c_1\Psi_{211} + c_2\Psi_{311} + c_3\Psi_{321}$$

De la condición de normalización:

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$$

A su vez, la condición *c*) nos dice que

$$\frac{1}{4}|c_1|^2 + \frac{1}{9}(|c_2|^2 + |c_3|^2) = \frac{13}{72}$$

Por último, de *d*) se sigue que $|\langle \Phi | \Psi \rangle|^2 = 1/4$ y, por tanto, $|c_3|^2 = 1/2$. De las tres ecuaciones se obtiene que

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{211}(\mathbf{r})e^{-iE_2 t/\hbar} + \Phi_{321}(\mathbf{r})e^{-iE_3 t/\hbar} e^{i\alpha}]$$

donde α es una fase.

iii) La densidad de probabilidad viene dada por

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \frac{1}{2} \{ |\Phi_{211}(\mathbf{r})|^2 + |\Phi_{321}(\mathbf{r})|^2 + 2 \operatorname{Re} [\Phi_{211}^*(\mathbf{r})\Phi_{321}(\mathbf{r})e^{i(E_2 - E_3)t/\hbar} e^{i\alpha}] \}$$

que varía en el tiempo con período

$$T = \frac{2\pi\hbar}{E_3 - E_2} = 2.2 \times 10^{-33} \text{ s}$$

iv) El cálculo de $\langle \mathbf{r} \rangle$ y $\langle \mathbf{p} \rangle$ se realiza de forma análoga al ejercicio 12.3. Como Φ_{211} es impar, Φ_{321} es par y \mathbf{r} es impar, sólo serán distintos de cero los términos cruzados del desarrollo. Los valores esperados $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$ se anulan, debido a que $\Phi_{211}^*(\mathbf{r})\Phi_{321}(\mathbf{r})$ es independiente de φ . Utilizando que

$$\mathbf{p} = \frac{i\hbar}{\hbar} [H, \mathbf{r}]$$

resulta que $\langle p_x \rangle = \langle p_y \rangle = 0$. En cuanto a z , después de un cálculo largo, pero sin dificultad, se obtiene que

$$\langle z \rangle = \frac{2^{11}3^4}{5^7} a_0 \cos \left[\frac{(E_2 - E_3)t}{\hbar} + \alpha \right]$$

$$\langle p_z \rangle = -\frac{m}{\hbar} (E_2 - E_3) \frac{2^{11}3^4}{5^7} a_0 \operatorname{sen} \left[\frac{(E_2 - E_3)t}{\hbar} + \alpha \right]$$

12.8. Sabemos (apéndice C) que

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{\alpha+1} [L_n^\alpha(\rho)]^2 d\rho = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!} (\alpha+2n+1)$$

Aplicando esta expresión a las autofunciones del oscilador armónico isótropo [12.4.12], obtenemos

$$\int_0^\infty e^{-\alpha^2 r^2} (\alpha r)^{2\ell+3} [L_{(n-\ell)/2}^{\ell+1/2}(\alpha^2 r^2)]^2 d(\alpha^2 r^2) = \frac{\Gamma\left(\frac{n+\ell}{2} + \frac{3}{2}\right)}{[(n-\ell)/2]!} \left(n + \frac{3}{2}\right)$$

y, de aquí, operando,

$$2\alpha \int_0^\infty e^{-\alpha^2 r^2} (\alpha r)^{2\ell+4} [L_{(n-\ell)/2}^{\ell+1/2}(\alpha^2 r^2)]^2 dr = \left(n + \frac{3}{2}\right) \frac{(n+\ell+1)!!}{2^{(n+\ell)/2} [(n-\ell)/2]!} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

con lo que, para las funciones normalizadas [12.4.12], se obtiene que

$$\langle r^2 \rangle = \left(n + \frac{3}{2}\right) \frac{1}{\alpha^2} \equiv \left(n + \frac{3}{2}\right) \frac{\hbar}{\mu\omega}$$

13.1. Usando que S_x y S_y son autoadjuntos, se tiene

$$S_+^\dagger = (S_x + iS_y)^\dagger = S_x - iS_y = S_-$$

Análogamente, se prueba para S_- .

A partir del conmutador $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$ y teniendo en cuenta que el conmutador es lineal en sus dos argumentos, se prueba que

$$[S_+, S_-] = -2i[S_x, S_y] = 2\hbar S_z$$

Para el último apartado basta utilizar los conmutadores

$$[S_x, S_z] = -i\hbar S_y \quad \text{y} \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x$$

13.2. Teniendo en cuenta el conmutador calculado previamente

$$S_z S_+ \kappa_- = \{[S_z, S_+] + S_+ S_z\} \kappa_- = \frac{1}{2} \hbar S_+ \kappa_-$$

Por tanto, $S_+ \kappa_-$ es proporcional al estado κ_+ . Análogamente, se prueba que $S_- \kappa_+$ es proporcional a κ_- .

- 13.3. Para calcular la constante de proporcionalidad entre $S_+\kappa_-$ y κ_+ , evaluemos el módulo de $S_+\kappa_-$. El resultado es

$$\|S_+\kappa_-\|^2 = \langle 1/2 - 1/2 | S_+^\dagger S_+ | 1/2 - 1/2 \rangle$$

Como hemos visto antes, $S_+^\dagger = S_-$, y por otra parte se verifica que

$$S_- S_+ = S^2 - S_z^2 - \hbar S_z$$

Nótese que para obtener la última expresión es preciso usar el conmutador de S_x con S_y . Reuniendo los resultados obtenidos, llegamos a

$$\|S_+\kappa_-\|^2 = \hbar^2$$

Por tanto, la constante de proporcionalidad buscada es, salvo una fase, \hbar .

- 13.4. El operador de espín en la dirección dada $\mathbf{u} = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0)$ es

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1-i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1+i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$$

El estado pedido es el vector propio de esta matriz con autovalor +1. Un cálculo sencillo proporciona

$$S_{\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{4} \\ \frac{1+i}{4} \end{pmatrix}$$

- 13.5. El operador de espín en la nueva dirección es

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1-i}{\sqrt{3}} \\ \frac{1+i}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

La probabilidad pedida es la componente del vector $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ según el autovector de la matriz anterior asociado al autovalor +1. El resultado es

$$P = \frac{1}{3 - \sqrt{3}}$$

- 13.6. Considerando la matriz de Pauli en la dirección $\mathbf{u} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$, que resulta de girar la matriz de Pauli según la dirección $(0, 0, 1)$ (eje Z) un ángulo θ alrededor del eje Y y calculando su autovector con autovalor $+1$, obtenemos,

$$\begin{pmatrix} \cos \theta/2 \\ \sin \theta/2 \end{pmatrix}$$

Por tanto, el autoestado correspondiente a un giro de 2π radianes sería $\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Es preciso girar el espino 4π radianes para obtener el autoestado original.

- 13.7. La ecuación de Schrödinger para el hamiltoniano dado es

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = g\mu_B \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}{2} \Psi(t)$$

Considerando el campo magnético orientado según el eje Z , se llega a un sistema de ecuaciones diferenciales lineales de primer orden,

$$\frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} + \frac{ig\mu_B B}{2\hbar} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Psi(t) = 0$$

cuya solución es

$$\Psi(t) = \exp \left\{ \frac{-ig\mu_B B}{2\hbar} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} t \right\} \Psi(0)$$

Como puede verse en la solución encontrada para instantes de tiempo t tales que

$$\frac{g\mu_B B t}{2\hbar} = \pi$$

se tiene

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\pi} & 0 \\ 0 & e^{+i\pi} \end{pmatrix} \Psi(0) = -\Psi(0)$$

- 13.8. Definiendo las matrices $\boldsymbol{\sigma}$ como $\mathbf{S} = \hbar \boldsymbol{\sigma}$ y denotando la base de autoestados comunes a S^2 y S_z como $|1 + 1\rangle$, $|1, 0\rangle$, $|1 - 1\rangle$, respectivamente, la matriz, σ_z en esa base es

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Usando los operadores σ_+ y σ_- definidos en el ejercicio 13.1 y sus actuaciones sobre los estados de la base anterior, se tiene

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/\sqrt{2} & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

Puede verificarse, además, que satisfacen las reglas de conmutación

$$[\sigma_x, \sigma_y] = i\sigma_z$$

- 14.1.** Introduciendo una constante de acoplo adimensional se tiene $H_1 = \sqrt{\alpha} W$, donde $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$ es la constante de estructura fina y $W = \sqrt{\hbar c} \epsilon x$. El desarrollo de los nuevos niveles de energía será hasta segundo orden

$$E_n = E_{n,0} + \sqrt{\alpha} E_{n,1} + \alpha E_{n,2}$$

El cálculo de $E_{n,1}$ es inmediato, pues

$$E_{n,1} = \langle n|W|n\rangle = 0$$

ya que a y a^\dagger tienen valores esperados nulos. Para el cálculo de $E_{n,2}$, sólo es preciso tener en cuenta los estados $|n+1\rangle$ y $|n-1\rangle$, obteniéndose

$$E_{n,2} = -\frac{\hbar c \epsilon^2}{2k}$$

Para los datos numéricos del ejercicio $E_{n,0} = 31.15$ MeV y $E_{n,2} = -0.68$ MeV con lo que tenemos

$$E_n = 30.47 \text{ MeV}$$

Por otra parte, el hamiltoniano $H = H_0 + H_1$ puede resolverse de manera exacta, sin más que escribir el potencial suma del armónico y la perturbación como un cuadrado perfecto,

$$kx^2/2 - e\epsilon x = k(x - e\epsilon/k)^2/2 - e^2\epsilon^2/(2k)$$

- 14.2.** El primer estado excitado del rotor rígido es triplemente degenerado, siendo su energía $E(1) = \hbar^2/I$. Los estados son $|11\rangle$, $|10\rangle$, $|1-1\rangle$. Las correcciones en primer orden a la energía vienen dadas por las raíces del polinomio característico, que en este caso es

$$E_1^3(1) - E(1)\gamma^2\hbar^2 = 0$$

obteniéndose tres niveles distintos con energías

$$\frac{\hbar^2}{I} + \gamma\hbar, \frac{\hbar^2}{I}, \frac{\hbar^2}{I} - \gamma\hbar$$

Nótese que habríamos llegado al mismo resultado de ser γL_z la perturbación, pues el sistema es invariante bajo rotaciones y todas ellas son equivalentes.

- 14.3.** El segundo estado excitado del oscilador armónico isótropo bidimensional es triplemente degenerado, con energía $E_0(2) = 3\hbar\omega$, y estados $|11\rangle$, $|20\rangle$, $|02\rangle$ en la notación $|n_1 n_2\rangle$. El polinomio característico es

$$E_1^3(2) - E_1(2) \frac{\lambda^2}{\alpha^2} = 0$$

que tiene tres raíces distintas, con lo que la perturbación introducida rompe la degeneración del oscilador bidimensional. Las nuevas energías son

$$3\hbar\omega + \frac{\lambda}{\alpha}, 3\hbar\omega, 3\hbar\omega - \frac{\lambda}{\alpha}$$

- 14.4.** Supongamos el pozo centrado entre $-L$ y $+L$. Los niveles de energía son no-degenerados, por lo que la corrección en primer orden vendrá dada por el valor esperado de la perturbación entre los estados no-perturbados pares (n impar)

$$E_1(n) = \langle n | \lambda \delta(x) | n \rangle = \frac{\lambda}{L} \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

La corrección en segundo orden viene dada por

$$E_2(n) = \sum_{\substack{m \neq n \\ m \text{ impar}}} \frac{|\langle m | \lambda \delta(x) | n \rangle|^2}{E_n - E_m}$$

Realizando unas sencillas integrales se llega a

$$E_2(n) = \sum_{\substack{m \neq n \\ m \text{ impar}}} \frac{8m\lambda^2}{\hbar^2 \pi^2 (n^2 - m^2)}$$

La serie que aparece en el miembro de la derecha es, en realidad, una suma finita que da como resultado

$$E_2(n) = -\frac{2m\lambda^2}{\hbar^2 \pi^2 n^2}$$

La serie convergente anterior puede descomponerse como

$$E_2(n) = \frac{4m\lambda^2}{n\hbar^2\pi^2} \left(\sum_{\substack{m \neq n \\ m \text{ impar}}} \frac{1}{n+m} + \sum_{\substack{m \neq n \\ m \text{ impar}}} \frac{1}{n-m} \right)$$

Si ahora descomponemos la segunda serie como

$$\sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{2n-1} \frac{1}{n-m} + \sum_{m=2n+1} \frac{1}{n-m}$$

tenemos que la primera suma es idénticamente nula y la segunda se puede escribir como

$$\sum_{m'=1} \frac{1}{-n-m'}$$

donde sí aparece el sumando con $m' = n$. Salvo este sumando, los demás cancelan exactamente la primera serie en $E_2(n)$, con lo que obtenemos

$$E_2(n) = -\frac{2m\lambda^2}{\hbar^2\pi^2 n^2}$$

14.5. El valor esperado del hamiltoniano para la función prueba $|\Phi\rangle$ vendrá dado por

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}$$

Por tanto,

$$\langle \Phi_0 + \varepsilon \tilde{\Phi} | H | \Phi_0 + \varepsilon \tilde{\Phi} \rangle = \langle \Phi_0 + \varepsilon \tilde{\Phi} | \Phi_0 + \varepsilon \tilde{\Phi} \rangle \langle H \rangle$$

y, teniendo en cuenta que $|\Phi_0\rangle$ es una autofunción correspondiente a la energía E_0 y, tanto $|\Phi_0\rangle$ como $|\tilde{\Phi}\rangle$ están normalizados, obtenemos

$$[1 + \varepsilon(\langle \tilde{\Phi} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi} \rangle)] E_0 + \varepsilon^2 \langle \tilde{\Phi} | H | \tilde{\Phi} \rangle = [1 + \varepsilon(\langle \tilde{\Phi} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi} \rangle) + \varepsilon^2] \langle H \rangle$$

Por tanto, hasta orden ε^2 ,

$$\langle H \rangle \approx \frac{1 + \varepsilon(\langle \tilde{\Phi} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi} \rangle)}{1 + \varepsilon(\langle \tilde{\Phi} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi} \rangle) + \varepsilon^2} E_0 + \varepsilon^2 \langle \tilde{\Phi} | H | \tilde{\Phi} \rangle \approx E_0 + \varepsilon^2 \langle \tilde{\Phi} | (H - E_0) | \tilde{\Phi} \rangle$$

con lo que queda demostrado que la corrección es orden ε^2 .

14.6. El nivel fundamental será un estado con $\ell = 0$. Por tanto,

$$H|\Phi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} e^{-\alpha r} \right) + V_0 e^{-r/a} e^{-\alpha r} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\alpha^2 - \frac{2\alpha}{r} \right) e^{-\alpha r} + V_0 e^{-(\alpha+1/a)r}$$

con lo que

$$\begin{aligned} \langle \Phi | H | \Phi \rangle &= 4\pi \int_0^\infty \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} (\alpha^2 r^2 - 2\alpha r) e^{-2\alpha r} + V_0 r^2 e^{-(2\alpha+1/a)r} \right] = \\ &= 4\pi \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{4\alpha} + \frac{2V_0}{(2\alpha+1/a)^3} \right] \end{aligned}$$

Por otra parte,

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 4\pi \int_0^\infty r^2 e^{-2\alpha r} dr = \frac{\pi}{\alpha^3}$$

y, finalmente, obtenemos

$$\langle H \rangle = 4\alpha^3 \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{4\alpha} + \frac{2V_0}{(2\alpha+1/a)^3} \right] = \frac{\hbar^2}{\mu} \left[\frac{\alpha^2}{2} - \frac{32}{3} \frac{\alpha^3 a}{(1+2\alpha a)^3} \right]$$

Minimizándolo con respecto a α , llegamos a la condición de extremo

$$32\alpha a = (1+2\alpha a)^4$$

con solución $\alpha = 1/2a$. Sustituyendo en la expresión de $\langle H \rangle$, obtenemos como aproximación al nivel más bajo de energía, $\langle H \rangle = -\hbar^2/24\mu a^2$.

14.7. La función prueba habrá de ser ortogonal a las $n-1$ primeras autofunciones $|\Phi_i\rangle$, $i = 1, 2, \dots, n-1$ del hamiltoniano. Para ello, si tenemos un vector cualquiera $|\Phi\rangle$, bastará restarle su proyección en el subespacio de las $n-1$ primeras autofunciones, para que el ket resultante sea ortogonal a todas ellas. Formalmente, las funciones prueba han de ser de la forma:

$$|\Phi\rangle - \sum_{i=1}^{n-1} \langle \Phi_i | \Phi \rangle |\Phi_i\rangle$$

14.8. Como la autofunción del estado fundamental es par, la función prueba más simple para el primer estado excitado será una función impar (y, por tanto, ortogonal a la autofunción del estado fundamental) y con la misma dependencia funcional. La función prueba más sencilla que cumple esas condiciones es

$$\Phi_\alpha(x) = x e^{-\alpha x^2}$$

Con esta función prueba se obtiene

$$\langle H \rangle(\alpha) = \frac{3\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{3}{8} m \omega^2 \frac{1}{\alpha}$$

que presenta un mínimo para el mismo valor de α que el estado fundamental y la energía resulta $\langle H \rangle(\alpha_0) = (3/2)\hbar\omega$.

14.9. La expresión [14.5.16] equivale a reemplazar en las ecuaciones exactas [14.5.9] los coeficientes $a_k(t)$ en la suma de la parte derecha de la igualdad por su valor en el tiempo $t = 0$. Por tanto, es claro que si t es lo suficientemente pequeño para que $a_k(0)$ no difiera mucho de $a_k(t)$, la aproximación será válida. Cuando t sea muy grande, será necesario incluir correcciones de orden más alto.

14.10. Aplicando la fórmula [14.5.18], obtenemos

$$P_{j'j}(t) = \frac{|H_{1j'}|^2}{\hbar^2 \omega_{j'}^2} |1 - e^{i\omega_{j'}t}|^2 = \frac{|H_{1j'}|^2}{\hbar^2} \left[\frac{\text{sen}(\omega_{j'}t/2)}{\omega_{j'}/2} \right]^2$$

La probabilidad de transición tiene la misma forma que la correspondiente a una perturbación sinusoidal con frecuencia ω (véase sección 21.3), pero está centrada en el origen en lugar de estarlo en la frecuencia ω . El máximo es $|H_{1j'}|^2 t^2 / \hbar^2$ y la semianchura (valor del primer cero) es $2\pi/t$. Es evidente que la aproximación deja de tener validez para tiempos grandes (el máximo tiende a infinito).

15.1. La función de onda de N fermiones en el espacio de momentos, con proyecciones de espín $\sigma_1, \dots, \sigma_N$, en t es

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{q}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{q}_N\sigma_N, t) = \int \frac{d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N}{(2\pi\hbar)^{3N/2}} \Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N, t) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{q}_1\mathbf{r}_1 + \dots + \mathbf{q}_N\mathbf{r}_N)\right]$$

Su interpretación probabilística es similar a la presentada en el ejercicio 7.10, para partículas microscópicas distintas y con espín nulo. Para fermiones, [15.4.2] implica, inmediatamente:

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{q}_{i_1}\sigma_{i_1}, \dots, \mathbf{q}_{i_N}\sigma_{i_N}, t) = (-1)^{\delta} \tilde{\Psi}(\mathbf{q}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{q}_N\sigma_N, t)$$

En consecuencia, el principio de exclusión en el espacio de momentos es

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{q}_1\sigma_1, \mathbf{q}_1\sigma_1, \mathbf{q}_3\sigma_3, \dots, \mathbf{q}_N\sigma_N, t) = 0$$

Así pues, no puede haber ni siquiera dos fermiones en el sistema con los mismos momentos y proyecciones de espín.

15.2. Se tiene sucesivamente

$$\begin{aligned}\Phi_0(\phi_1, \phi_2) &= N_0 \Phi_1(\phi_1) \Phi_2(\phi_2) \\ \Phi_F(\phi_1, \phi_2) &= N_F [\exp im_1 \phi_1 \exp im_2 \phi_2 - \exp im_2 \phi_1 \exp im_1 \phi_2] \\ \Phi_B(\phi_1, \phi_2) &= N_B [\exp im_1 \phi_1 \exp im_2 \phi_2 + \exp im_2 \phi_1 \exp im_1 \phi_2]\end{aligned}$$

siendo N_0, N_F, N_B constantes de normalización. Imponiendo

$$\int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^{2\pi} d\phi_2 |\Phi_j(\phi_1, \phi_2)|^2 = 1 \quad , \quad j = 0, F, B$$

se obtiene fácilmente

$$N_0 = 1 \quad , \quad N_F = N_B = \frac{1}{2\pi 2^{1/2}}$$

Por tanto, las densidades de probabilidad son

$$\begin{aligned}|\Phi_0(\phi_1, \phi_2)|^2 &= \frac{1}{(2\pi)^2} \\ |\Phi_F(\phi_1, \phi_2)|^2 &= \frac{1}{(2\pi)^2} [1 - \cos(m_1 - m_2)(\phi_1 - \phi_2)] \\ |\Phi_B(\phi_1, \phi_2)|^2 &= \frac{1}{(2\pi)^2} [1 + \cos(m_1 - m_2)(\phi_1 - \phi_2)]\end{aligned}$$

$|\Phi_0(\phi_1, \phi_2)|^2$ es constante, en tanto que para $\phi_2 = \phi_1$

$$|\Phi_F(\phi_1, \phi_2)|^2 = 0 \quad , \quad |\Phi_B(\phi_1, \phi_2)|^2 = \frac{2}{(2\pi)^2}$$

Por tanto:

$$|\Phi_B(\phi_1, \phi_1)|^2 > |\Phi_0(\phi_1, \phi_1)|^2 > |\Phi_F(\phi_1, \phi_1)|^2 = 0$$

Así pues, en el caso fermiónico es imposible que ambas entidades tengan la misma coordenada angular. Por el contrario, en el caso bosónico, lo más probable es que las dos entidades la tengan.

15.3. Se tiene, realizando todas las integrales sucesivamente

$$\begin{aligned}\langle (\phi_1 - \phi_2)^2 \rangle_0 &= \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^{2\pi} d\phi_2 (\phi_1 - \phi_2)^2 |\Phi_0(\phi_1, \phi_2)|^2 = \frac{(2\pi)^2}{6} \\ \langle (\phi_1 - \phi_2)^2 \rangle_B &= \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^{2\pi} d\phi_2 (\phi_1 - \phi_2)^2 |\Phi_B(\phi_1, \phi_2)|^2 = \frac{(2\pi)^2}{6} + \frac{1}{4}\end{aligned}$$

Se ha utilizado la propiedad

$$\int_0^{2\pi} d\phi \exp in\phi = 0$$

si n es un entero no nulo. En consecuencia,

$$\langle (\phi_1 - \phi_2)^2 \rangle_B < \langle (\phi_1 - \phi_2)^2 \rangle_0 < \langle (\phi_1 - \phi_2)^2 \rangle_F$$

Análogamente:

$$\langle [\text{sen}(\phi_1 - \phi_2)]^2 \rangle_0 = \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^{2\pi} d\phi_2 [\text{sen}(\phi_1 - \phi_2)]^2 |\Phi_0(\phi_1, \phi_2)|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\langle [\text{sen}(\phi_1 - \phi_2)]^2 \rangle_F = \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^{2\pi} d\phi_2 [\text{sen}(\phi_1 - \phi_2)]^2 |\Phi_F(\phi_1, \phi_2)|^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{4}$$

y, por tanto:

$$\langle [\text{sen}(\phi_1 - \phi_2)]^2 \rangle_B < \langle [\text{sen}(\phi_1 - \phi_2)]^2 \rangle_0 < \langle [\text{sen}(\phi_1 - \phi_2)]^2 \rangle_F$$

Así pues, los bosones tienden a «apuntar» en direcciones convergentes, en tanto que los fermiones lo hacen en direcciones más divergentes. Esto es consistente con la idea de que los bosones tienden a aproximarse y los fermiones a separarse.

15.4. Para $N = 2$, [15.5.2], con la inclusión del factor $(2!)^{-1/2}$, implica

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \frac{1}{2^{1/2}} [\Psi_{a_1}(\mathbf{r}_1, t)\Psi_{a_2}(\mathbf{r}_2, t) - \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_2, t)\Psi_{a_2}(\mathbf{r}_1, t)] \quad [15.4.a']$$

Recordando la noción de determinante, [15.4.a'] puede reescribirse como

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \frac{1}{2^{1/2}} \begin{vmatrix} \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_1, t) & \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_2, t) \\ \Psi_{a_2}(\mathbf{r}_1, t) & \Psi_{a_2}(\mathbf{r}_2, t) \end{vmatrix} \quad [15.4.b']$$

Obsérvese que $a_1 \neq a_2$ necesariamente, para que $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \neq 0$. Comprobaremos [15.6.5] para $a_1 \neq a_2$. En efecto:

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 &= \frac{1}{2} \left\{ \int d^3\mathbf{r}_1 \Psi_{a_1}^+(\mathbf{r}_1, t)\Psi_{a_1}(\mathbf{r}_1, t) \int d^3\mathbf{r}_2 \Psi_{a_2}^+(\mathbf{r}_2, t)\Psi_{a_2}(\mathbf{r}_2, t) + \right. \\ &+ \int d^3\mathbf{r}_2 \Psi_{a_1}^+(\mathbf{r}_2, t)\Psi_{a_1}(\mathbf{r}_2, t) \int d^3\mathbf{r}_1 \Psi_{a_2}^+(\mathbf{r}_1, t)\Psi_{a_2}(\mathbf{r}_1, t) + \\ &\left. + 2 \text{Re} \left[\int d^3\mathbf{r}_1 \Psi_{a_1}^+(\mathbf{r}_1, t)\Psi_{a_2}(\mathbf{r}_1, t) \times \int d^3\mathbf{r}_2 \Psi_{a_1}^+(\mathbf{r}_2, t)\Psi_{a_2}(\mathbf{r}_2, t) \right] \right\} = 1 \end{aligned}$$

donde se ha hecho uso sucesivamente de [15.6.1] y [15.6.2].

15.5. Un cálculo directo da

$$[s_x, s_y] = i\hbar s_z \quad , \quad [s_y, s_z] = i\hbar s_x \quad , \quad [s_z, s_x] = i\hbar s_y \quad [15.5.a']$$

$$s^2 = s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 = \hbar^2 l(l+1)I_3 \quad , \quad I_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad [15.5.b']$$

Las ecuaciones [15.5.a'] muestran que (s_x, s_y, s_z) es un momento angular. La primera ecuación [15.5.b'] asegura que sólo hay un valor posible para el momento angular total, a saber, la unidad.

15.6. Utilizando [15.7.9-10] y la primera ecuación [15.7.11] se obtiene el sistema lineal y homogéneo:

$$\begin{pmatrix} -\sigma & -iq_z & iq_y \\ iq_z & -\sigma & -iq_x \\ -iq_x & iq_x & -\sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_x(q\sigma) \\ \chi_y(q\sigma) \\ \chi_z(q\sigma) \end{pmatrix} = 0 \quad [15.6.a']$$

La anulación del determinante de la matriz en [15.6.a'] conduce a $\sigma(-\sigma^2 + 1) = 0$, es decir, $\sigma = 0, \pm 1$. Omitiendo en [15.6.a'] la ecuación generada por la tercera fila de la matriz, y usando las otras dos para despejar $\chi_x(q\sigma)$ y $\chi_y(q\sigma)$ en función de $\chi_z(q\sigma)$, se obtiene:

$$\chi_x(q\sigma) = \frac{iq_y |q|\sigma - q_x q_z}{q^2 \sigma^2 - q_z^2} \chi_z(q\sigma) \quad , \quad \chi_y(q\sigma) = \frac{-iq_x |q|\sigma - q_y q_z}{q^2 \sigma^2 - q_z^2} \chi_z(q\sigma) \quad [15.6.b']$$

$\chi_z(q\sigma)$ queda determinado en módulo a partir de

$$|\chi_z(q\sigma)|^2 \left\{ 1 + \left| \frac{iq_y |q|\sigma - q_x q_z}{q^2 \sigma^2 - q_z^2} \right|^2 + \left| \frac{-iq_x |q|\sigma - q_y q_z}{q^2 \sigma^2 - q_z^2} \right|^2 \right\} = 1 \quad [15.6.c']$$

15.7. Si $\sigma = \pm 1$, se tiene, usando [15.6.b'],

$$q\chi(q\sigma) = q_x \chi_x(q\sigma) + q_y \chi_y(q\sigma) + q_z \chi_z(q\sigma) = \chi_z(q\sigma) q_z \left\{ 1 - \frac{(q_x^2 + q_y^2)}{q^2 - q_z^2} \right\} = 0$$

Por el contrario, si $\sigma = 0$, [15.6.b'] implica

$$q\chi(q0) = \frac{q^2}{q_z} \chi_z(q0)$$

que es no nula (si $q^2 \neq 0$), a no ser que $\chi_z(q\sigma) = 0$, lo cual, a su vez, conduce a $\chi(q, 0) = 0$. En consecuencia, la función de onda del fotón será combinación lineal de $\chi(q+1)$ y $\chi(q-1)$, pero no puede serlo de $\chi(q, 0)$, que queda, por tanto, excluida.

Para justificar [15.7.15], solamente es preciso utilizar [15.6.b'] y observar que

$$\begin{aligned} \chi_x^*(q+1)\chi_x(q-1) + \chi_y^*(q+1)\chi_y(q-1) + \chi_z^*(q+1)\chi_z(q-1) &= 0 \\ \chi_x^*(q\sigma)\chi_x(q, 0) + \chi_y^*(q\sigma)\chi_y(q, 0) + \chi_z^*(q\sigma)\chi_z(q, 0) &= 0 \quad , \quad \sigma = \pm 1 \end{aligned}$$

16.1. En efecto, tomando la segunda variación a partir de [16.2.6]:

$$\delta^2 z \approx - \sum_h \frac{(\delta N_h)^2}{N_{h, \text{máx}}}$$

que es negativa.

16.2. Para fermiones, tomando la variación segunda a partir de [16.3.10]

$$\delta^2 z = \sum_h (\delta N_h)^2 \left\{ \frac{1}{N_{h, \text{máx}} - g_h} - \frac{1}{N_{h, \text{máx}}} \right\} = - \sum_h (\delta N_h)^2 \frac{g_h}{N_{h, \text{máx}}^2 \exp(\alpha + \beta E_h)}$$

que es negativa. Análogamente, para bosones, tomando la segunda variación en [16.4.7] y operando, se obtiene sucesivamente:

$$\begin{aligned} \delta^2 z &\approx \sum_h (\delta N_h)^2 \left(- \frac{1}{N_{h, \text{máx}}} + \frac{1}{g_h + N_{h, \text{máx}}} \right) = - \sum_h (\delta N_h)^2 \frac{g_h}{N_{h, \text{máx}}(g_h + N_{h, \text{máx}})} = \\ &= - \sum_h (\delta N_h)^2 \frac{g_h}{N_{h, \text{máx}}^2 \exp(\alpha + \beta E_h)} \end{aligned}$$

que es negativa también.

16.3. Se tiene, dado que N es constante

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S_T}{\partial E_T} \right)_V &= -k_B \sum_h \frac{g_h}{1 + \exp(\alpha + \beta E_h)} \left[\left(\frac{\partial \alpha}{\partial E_T} \right)_V + E_h \left(\frac{\partial \beta}{\partial E_T} \right)_V \right] + \\ &+ \left(\frac{\partial \alpha}{\partial E_T} \right)_V k_B N + \left(\frac{\partial \beta}{\partial E_T} \right)_V k_B E_T + \beta k_B \end{aligned} \quad [16.3.a']$$

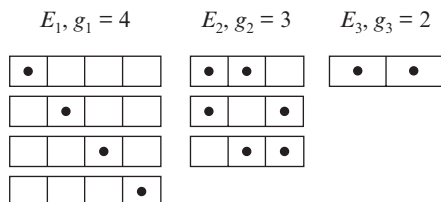
La utilización de [16.3.14] en [16.3.a'] implica directamente la cancelación de los términos en $\left(\frac{\partial \alpha}{\partial E_T} \right)_V$ y $\left(\frac{\partial \beta}{\partial E_T} \right)_V$. Por tanto

$$\left(\frac{\partial S_T}{\partial E_T}\right)_V = \beta k_B \quad [16.3.b']$$

La comparación de [16.3.b'] con la segunda ecuación [16.1.2] implica la validez de [16.1.8] para la estadística cuántica de Fermi-Dirac.

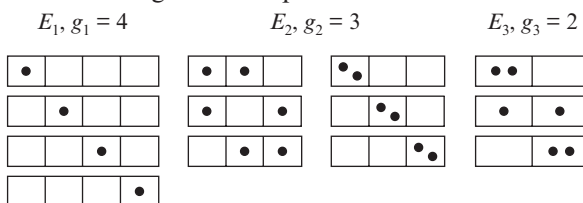
16.4. Las posibles distribuciones en cada estado de energía se representan debajo.

a) Fermiones



El número de configuraciones posibles es $4 \times 3 \times 1 = 12$.

b)



El número de configuraciones permitidas es $4 \times 6 \times 3 = 72$.

Estos resultados están de acuerdo con los implicados por [16.3.2] y [16.4.1]. En efecto, para fermiones, [16.3.2] implica $W = 12$, en tanto que [16.4.1] da, para bosones, $W = 72$.

16.5. La longitud de onda de De Broglie media para un átomo es

$$\left(\frac{\hbar^2}{3mk_B T}\right)^{1/2} \approx 10^{-8} \text{ cm}$$

en tanto que la separación media entre átomos es $(V/N)^{1/3} \approx 10^{-8} \text{ cm}$.

Por ser ambas del mismo orden de magnitud, es razonable esperar que los efectos cuánticos sean importantes. Esto queda confirmado por análisis detallados que exceden el nivel de este libro.

16.6. [16.2.12] es, en este caso (usando [16.1.8]):

$$dN(\Omega) = \frac{N}{Z} \sigma d\Omega \exp\left(\frac{\mu B \cos \theta}{k_B T}\right) \quad [16.6.a']$$

tras haber hecho $g = \sigma d\Omega$, siendo σ una constante independiente de Ω . La función de partición correspondiente a [16.2.11] es, ahora ($y = \cos \theta$):

$$\begin{aligned} Z &= \sigma \int d\Omega \exp\left(\frac{\mu B \cos \theta}{k_B T}\right) = \sigma \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \exp\left(\frac{\mu B \cos \theta}{k_B T}\right) = \\ &= \sigma 2\pi \int_{-1}^{+1} dy \exp\left(\frac{\mu B y}{k_B T}\right) = \sigma 2\pi \frac{2 \operatorname{senh} \alpha}{\alpha}, \quad \alpha = \frac{\mu B}{k_B T} \end{aligned} \quad [16.6.b']$$

Combinando [16.6.a'] y [16.6.b'], se tiene el resultado buscado para $dN(\Omega)$:

$$dN(\Omega) = N \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{\alpha}{\operatorname{senh} \alpha} \exp(\alpha \cos \theta) \quad [16.6.c']$$

Por otra parte, la imanación es:

$$\begin{aligned} M &= \int \mu \cos \theta dN(\Omega) \equiv \\ &\equiv N\mu \frac{\alpha}{\operatorname{senh} \alpha} \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \cos \theta \exp(\alpha \cos \theta) \equiv N\mu L(\alpha) \end{aligned} \quad [16.6.d']$$

siendo $L(\alpha)$ la llamada función de Langevin. Calculando la integral en [16.6.d'], mediante el cambio de variables $y = \cos \theta$, se tiene, finalmente,

$$L(\alpha) = \frac{\cos \operatorname{h} \alpha}{\operatorname{senh} \alpha} - \frac{1}{\alpha} \quad [16.6.e']$$

16.7. Dos o más \bar{v}'_e s han de tratarse como fermiones, en virtud de la conexión espín-estadística (sección 15.5). Por tanto, un sistema de \bar{v}'_e s en equilibrio termodinámico ha de describirse mediante la estadística cuántica de Fermi-Dirac. El interés físico de dicho sistema se discutirá en el ejercicio 17.6.

17.1. A partir del cálculo de I_1 (sección 9.5), se tiene:

$$\int_0^\infty dx \exp(-ax^2) = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2}$$

y, así, una integración por partes implica

$$\int_0^\infty dx x^2 \exp(-ax^2) = \frac{1}{2a} \int_0^\infty dx \exp(-ax^2) = \frac{1}{4a} \left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2}$$

y ya es inmediato obtener [17.1.3]. Alternativamente, utilícese el cálculo de I_2 , en la sección 9.5.

- 17.2. De la misma forma que [17.1.2] es el análogo de [16.2.12], la ecuación [16.1.6] debe sustituirse por

$$E_T = \int \frac{mv^2}{2} dN$$

donde dN está dado por [17.1.5]. Así pues:

$$E_T = \frac{m}{2} N \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} 4\pi \int_0^\infty dv v^4 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right)$$

Una integración por partes implica

$$\int_0^\infty dx x^4 \exp(-ax^2) = \frac{3}{2a} \int_0^\infty dx x^2 \exp(-ax^2)$$

y su combinación con los resultados del ejercicio 17.1 conducen a

$$E_T = N \frac{3}{2} k_B T$$

que es el principio de equipartición de la energía.

- 17.3. Siguiendo la pauta de la sección 17.1:

$$dN(v, z) = \frac{N\sigma'}{Z} 4\pi v^2 dv dz \exp\left[-\frac{(mv^2/2 + mgz)}{k_B T}\right] \quad [17.3.a']$$

siendo N el número de átomos. La función de partición es, ahora:

$$Z = \sigma' \int_0^\infty 4\pi v^2 dv \int_0^\infty dz \exp\left[-\frac{(mv^2/2 + mgz)}{k_B T}\right]$$

Usando [17.1.3], se tiene

$$Z = \sigma' \left(\frac{2\pi k_B T}{m} \right)^{3/2} \int_0^\infty dz \exp\left(-\frac{mgz}{k_B T}\right) = \sigma' \left(\frac{2\pi k_B T}{m} \right)^{3/2} \times \frac{k_B T}{mg} \quad [17.3.b']$$

Combinando [17.3.a'] y [17.3.b'] se puede eliminar σ'/Z , y, así, obtener el resultado buscado para $dN(v, z)$:

$$dN(v, z) = N \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} 4\pi v^2 dv \frac{mg}{k_B T} dz \exp\left[-\frac{(mv^2/2 + mgz)}{k_B T}\right] \quad [17.3.c']$$

$dN(z)$ se obtiene a partir de [17.3.c'] integrando sobre todos los posibles valores de v :

$$dN(z) = \int_0^\infty dN(v, z) = N \frac{mg}{k_B T} dz \exp\left(-\frac{mgz}{k_B T}\right)$$

tras haber utilizado [17.1.5] y [17.1.4].

17.4. La aplicación de [16.6.f] y [16.6.13], junto con $\alpha = 0$ y [17.2.2], supone:

$$F = k_B T \frac{8\pi V}{h^3 c^3} \int_0^\infty E^2 \ln[1 - \exp(-E/k_B T)] dE \quad [17.4.a']$$

La combinación de [16.6.9] y [16.6.13] implica

$$PV = -F$$

y, por tanto

$$P = -k_B T \frac{8\pi}{h^3 c^3} \int_0^\infty E^2 \ln[1 - \exp(-E/k_B T)] dE \quad [17.4.b']$$

[17.4.b'] podría sugerir que la presión del gas de fotones es negativa, pero esto no es así. En efecto, integrando por partes:

$$P = k_B T \frac{8\pi}{h^3 c^3} \int_0^\infty \frac{E^3}{3} \frac{(k_B T)^{-1} \exp(-E/k_B T)}{1 - \exp(-E/k_B T)} dE = \frac{8\pi}{3h^3 c^3} \int_0^\infty \frac{E^3 dE}{\exp(E/k_B T) - 1} \quad [17.4.c']$$

que es positiva.

17.5. [17.2.5-6] implican ($E = h\nu$)

$$E_T = V \frac{8\pi}{c^3 h^3} \int_0^\infty \frac{E^3 dE}{\exp(E/k_B T) - 1} \quad [17.5.a']$$

La comparación entre [17.5.a'] y [17.4.c'] conduce a la relación buscada:

$$E_T = 3PV$$

17.6. Las analogías supuestas entre el gas de fotones y el de antineutrinos, junto con las propiedades de éstos expuestas en el ejercicio 16.7, llevan a que: i) para un $\bar{\nu}_e$ con momento \mathbf{p} y energía E , la relación $E = c|\mathbf{p}|$ es válida, ii) el multiplicador de Lagrange α es también nulo, para el sistema de antineutrinos en equilibrio. La diferencia esencial, ya expuesta en la solución al ejercicio 16.7, es que ha de utilizarse

la estadística cuántica de Fermi-Dirac para el sistema de antineutrinos, en vez de la de Bose-Einstein. Todo ello (sin necesidad de detenernos a discutir las proyecciones del espín del $\bar{\nu}_e$) conduce a que el número de antineutrinos emitidos por la supernova en cualquier dirección, con energías individuales entre E y $E + dE$, es

$$\frac{\sigma E^2 dE}{\exp(E/k_B T) + 1} \quad [17.6.a']$$

siendo σ una constante de proporcionalidad independiente de E , T . La fórmula [17.6.a'] ha sido utilizada en el análisis del flujo de antineutrinos detectados en diversos laboratorios y procedentes de SN 1987 A. El lector interesado puede consultar, por ejemplo, D. Denegrí, B. Sadoulet y M. Spiro, *Rev. Mod. Phys.*, 62, 1 (1990), A. de Rujula, *Physics Letters B193*, 514 (1987) y J. Ellis y K. A. Olive, *Physics Letters B193*, 525 (1987).

17.7. Del desarrollo de Taylor de la exponencial, se obtiene

$$\frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} = x^2 \left(1 - \frac{x^2}{12} + \dots \right)$$

Cuando $T \gg T_D$, el límite de integración superior en la integral [17.3.8] se hace muy pequeño y la integral puede aproximarse mediante su desarrollo de Taylor,

$$\int_0^{T_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx = \frac{1}{3} \left(\frac{T_D}{T} \right)^3 - \frac{1}{60} \left(\frac{T_D}{T} \right)^5 + \dots$$

con lo que se obtiene la fórmula aproximada del calor específico a altas temperaturas.

Cuando $T \ll T_D$, podemos escribir la integral como

$$\int_0^{T_D/T} = \int_0^\infty - \int_{T_D/T}^\infty$$

La segunda de las integrales será del orden de

$$\int_{T_D/T}^\infty x^4 e^{-x} dx \sim e^{-T_D/T}$$

Por tanto, podemos aproximar la integral en el límite de bajas temperaturas a

$$\int_0^{T_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx = \int_0^\infty \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx + O(e^{-T_D/T}) = \frac{4\pi^4}{15} + O(e^{-T_D/T})$$

con lo que se obtiene la segunda parte de la expresión [17.3.9].

17.8. Es inmediato de la expresión [17.2.6]. El calor específico no tiene un límite cuando $T \rightarrow \infty$, porque el número de fotones en la cavidad no está acotado. En cambio, en un cristal, el número de excitaciones fonónicas está limitado por el número de modos normales de la red.

17.9. El número de estados con energía comprendida entre E y $E + dE$ viene dado por la expresión [17.4.1]. Como en el cero absoluto las partículas van llenando los estados hasta un cierto nivel ε_F , se verificará que

$$\frac{N}{V} = \frac{4\pi}{h^3} (2m^3)^{1/2} \int_0^{\varepsilon_F} E^{1/2} dE = \frac{1}{6\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon_F \right)^{3/2}$$

de donde se obtiene inmediatamente la expresión [17.4.21]. Análogamente, en el cero absoluto,

$$E_T = \frac{4\pi V}{h^3} (2m^3)^{1/2} \int_0^{\varepsilon_F} E^{3/2} dE = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$$

donde la última igualdad se obtiene de la expresión de ε_F en función de N .

17.10. Como $\mu \equiv k_B T \ln z$, el desarrollo [17.4.23] puede escribirse

$$\left(\frac{\varepsilon_F}{k_B T} \right)^{3/2} = \left(\frac{\mu}{k_B T} \right)^{3/2} + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{\mu}{k_B T} \right)^{-1/2} + \dots + O(e^{-\mu/k_B T})$$

de donde

$$1 = \left(\frac{\mu}{\varepsilon_F} \right)^{3/2} + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 \left(\frac{\mu}{\varepsilon_F} \right)^{-1/2} + \dots + O(e^{-\mu/k_B T})$$

Haciendo ahora el desarrollo

$$\frac{\mu}{\varepsilon_F} = c_0 + c_1 \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right) + c_2 \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots$$

y sustituyendo en la igualdad anterior, se van obteniendo los diferentes coeficientes c_i en cada orden. Al orden más bajo, $c_0 = 1$. Al siguiente orden, $c_1 = 0$. Al siguiente, se obtiene:

$$0 = \frac{3}{2} c_2 + \frac{\pi^2}{8} \Rightarrow c_2 = -\frac{\pi^2}{12}$$

con lo que hemos hallado la expresión [17.4.24].

17.11. Denotaremos $N_h/g_h \equiv f(E_h)$. Entonces, la expresión [17.4.26] se escribe

$$f(E_h) = \frac{1}{e^{(E_h - \mu)/k_B T} + 1}$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} f(2\mu - E_h) &= \frac{1}{e^{(\mu - E_h)/k_B T} + 1} = 1 - \frac{e^{(\mu - E_h)/k_B T}}{e^{(\mu - E_h)/k_B T} + 1} = \\ &= 1 - \frac{1}{e^{(E_h - \mu)/k_B T} + 1} = 1 - f(E_h) \end{aligned}$$

- 17.12. a) De los datos, se obtiene que N/V es 2.5×10^{28} átomos/m³, que corresponde a una distancia promedio interatómica de 3.4 Å. La energía de Fermi es 2.34×10^{-19} J, o equivalentemente, 1.5 eV, que nos da una temperatura de Fermi de 1.68×10^4 K.
- b) Los átomos de He³ se comportan como fermiones, ya que su espín es 1/2. La energía de Fermi es, en este caso, 8.25×10^{-23} J $\equiv 5.2 \times 10^{-4}$ eV, que equivale a una temperatura de Fermi de 6 K.

17.13. Para un gas de Bose,

$$\frac{N_h}{V} = \frac{g_h}{V} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta E_h} - 1} \leq \frac{g_h}{V} \frac{1}{e^{\beta E_h} - 1}$$

ya que la fugacidad z es siempre menor o igual a 1. Si suponemos que el gas está encerrado en una caja cúbica, los niveles de energía E_h obedecen la relación [10.2.11], es decir,

$$E_h = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mV^{2/3}} n_h^2 \quad \text{con} \quad n_h^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

donde $V \equiv a^3$ es el volumen del cubo. Como $e^x - 1 > x$, obtenemos que

$$\frac{N_h}{V} \leq \frac{g_h}{V} \frac{1}{\beta E_h} = \frac{g_h}{V} \frac{2mV^{2/3}}{\pi^2 \hbar^2 n_h^2 \beta} \xrightarrow{V \rightarrow \infty} 0$$

con lo que queda probado.

18.1. Tras sustituir $\Psi(\mathbf{r}, t)$ por el segundo término en [18.1.3], hay que aplicar ∇ en coordenadas polares esféricas a

$$f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \frac{\exp[i(|\mathbf{p}||\mathbf{r}| - Et)/\hbar]}{|\mathbf{r}|}$$

Las coordenadas polares esféricas se detallan en la figura 11.1. Las propiedades de los vectores \mathbf{u}_r , \mathbf{u}_θ y \mathbf{u}_φ se resumen a continuación ($r = |\mathbf{r}|$)

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_r &= \frac{\mathbf{r}}{r} = (\text{sen } \theta \cos \varphi, \text{sen } \theta \text{sen } \varphi, \cos \theta) \\ \mathbf{u}_\theta &= (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \text{sen } \varphi, -\text{sen } \theta) \\ \mathbf{u}_\varphi &= (-\text{sen } \varphi, \cos \varphi, 0) \\ \mathbf{u}_r^2 &= \mathbf{u}_\theta^2 = \mathbf{u}_\varphi^2 = 1 \\ \mathbf{u}_r \mathbf{u}_\theta &= \mathbf{u}_r \mathbf{u}_\varphi = \mathbf{u}_\theta \mathbf{u}_\varphi = 0\end{aligned}$$

El gradiente en coordenadas polares esféricas es

$$\nabla = \mathbf{u}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{u}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{u}_\varphi \frac{1}{r \text{sen } \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Nótese que, según muestra [18.1.4], $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ depende de los ángulos que caracterizan \mathbf{u}_r . Sólo es necesario retener los términos dominantes cuando $r \rightarrow \infty$. Se tiene

$$\nabla \left[f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \frac{\exp \frac{i}{\hbar} (|\mathbf{p}|r - Et)}{r} \right] \sim \frac{i|\mathbf{p}|}{\hbar} \frac{f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \exp \frac{i}{\hbar} (|\mathbf{p}|r - Et)}{r} \mathbf{u}_r$$

En efecto, todos los términos omitidos van como $1/r^n$ con $n \geq 2$ y son despreciables frente al retenido (de orden $1/r$). Tomando el complejo conjugado de la expresión anterior y sustituyendo en [6.7.7], se obtiene [18.1.8].

18.2. La aplicación de [18.3.1] da, integrando sucesivamente sobre ángulos (como al pasar de [18.3.3] a [18.3.4]) y sobre r :

$$\begin{aligned}f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r \exp \left[i \frac{\mathbf{r}}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \right] V_0 \exp(-|r|/d) = \\ &= -\frac{2mV_0}{\hbar|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|} \int_0^\infty d|r||r| \exp(-|r|/d) \text{sen} \left(\frac{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'||r|}{\hbar} \right) = \\ &= -\frac{4mV_0d^3}{\hbar^2 [1 + (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2 d^2 / \hbar^2]^2}\end{aligned}$$

La sección eficaz diferencial, en aproximación de Born, es (usando [18.3.6]):

$$\sigma(\Omega) \simeq \frac{16m^2V_0^2d^6}{\hbar^4 [1 + (8mEd^2/\hbar^2) \text{sen}^2 \theta/2]^4}$$

18.3. La combinación directa de [18.3.1-2], [18.3.a'], [18.3.3] y [18.3.5] conduce a:

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2} - 1 \right\} \quad [18.3.b']$$

$$I = \frac{1}{4\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r} \left\{ \exp \left[i \frac{\mathbf{r}}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \right] \int \frac{d^3\mathbf{r}' |\Phi_{100}(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \right\} \quad [18.3.c']$$

Intercambiando órdenes de integración en [18.3.c'], y recordando, de nuevo, [18.3.3] y [18.3.5], se obtiene ($\mathbf{y} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$)

$$I = F(\mathbf{q}) \frac{1}{4\pi\hbar^2} \int \frac{d^3\mathbf{y}}{|\mathbf{y}|} \exp i\mathbf{y}\mathbf{q} = F(\mathbf{q}) \frac{1}{(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2} \quad [18.3.d']$$

$$F(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r}' |\Phi_{100}(\mathbf{r}')|^2 \exp i\mathbf{r}'\mathbf{q} \quad , \quad \mathbf{q} = \frac{1}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad [18.3.e']$$

La función $F(\mathbf{q})$, que evaluaremos más tarde, recibe un nombre especial: factor de forma de la distribución de carga del electrón ligado. Combinando [18.3.d'] y [18.3.b'], se obtiene:

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2m}{(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2} [1 - F(\mathbf{q})] \quad [18.3.f']$$

Con objeto de evaluar $F(\mathbf{q})$, nótese que (capítulo 12):

$$|\Phi_{100}(\mathbf{r}')|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} \exp(-2|\mathbf{r}'|/a_0) \quad [18.3.g']$$

La sustitución de [18.3.g'] en [18.3.e'] conduce, tras una integración elemental, a:

$$F(\mathbf{q}) = \frac{1}{\left[1 + \frac{a_0^2 \mathbf{q}^2}{4} \right]^2} \quad [18.3.h']$$

Es inmediato evaluar la sección eficaz diferencial en aproximación de Born usando [18.3.f'], [18.3.h'], [18.1.3] y [18.3.2]. Para una discusión detallada, véase¹.

¹ L. D. Landau y E. Lifchitz, *Mecanique Quantique Theorie Non-Relativiste*, Editions Mir, Moscú.

18.4. La aplicación de [18.3.1-2] junto con [18.4.a'] da

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \mathbf{d} \int d^3r \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\mathbf{r}\right] \quad [18.4.b']$$

Es conveniente elegir $(1/\hbar)(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ según el eje z positivo, y expresar \mathbf{r} en coordenadas esféricas (véase figura 11.1). En tal caso:

$$\mathbf{d} = |\mathbf{d}|(\cos \gamma \text{ sen } \sigma, \text{ sen } \gamma \text{ sen } \sigma, \cos \sigma)$$

Sustituyendo en [18.4.b'] e integrando en φ :

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{q}{4\pi\epsilon_0} |\mathbf{d}| \cos \sigma \int_0^\infty d|\mathbf{r}| \times \\ \times \int_0^\pi d\theta \cos \theta \text{ sen } \theta \exp\left[\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p} - \mathbf{p}'||\mathbf{r}| \cos \theta\right]$$

Integrando sobre $|\mathbf{r}|$ y θ , se obtiene:

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{q}{4\pi\epsilon_0} |\mathbf{d}| \cos \sigma \frac{i\hbar 4\pi}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|} \quad [18.4.c']$$

Dado que:

$$|\mathbf{d}| \cos \sigma = \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\mathbf{d}}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|}$$

podemos reexpresar [18.4.c'] como

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = -\frac{imq}{2\pi\hbar\epsilon_0} \frac{[(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\mathbf{d}]}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} \quad [18.4.d']$$

Es fácil ver, a partir de [18.4.d'], que la sección eficaz diferencial se aproxima a infinito si $\mathbf{p}' - \mathbf{p}$ tiende a cero. Un análisis detallado de esta dispersión fue realizado por M. E. Villalón, Tesina de Licenciatura, Universidad Complutense de Madrid, 1974. Véase también R. F. Álvarez-Estrada y M. E. Villalón, *Il Nuovo Cimento*, 27B, 79 (1975). Otros resultados para una partícula microscópica en un potencial dipolar pueden verse en A. Galindo y P. Pascual, *Problemas de Mecánica Cuántica* (problema 1.27), Eudema Universidad, Madrid, 1989, y en las referencias allí citadas.

18.5. Para $0 \leq r \leq a$, todas las funciones radiales y, por tanto, $\Phi(\mathbf{r})$ se anulan: la razón es análoga a la expuesta en la sección 8.2. Para $r > a$, las funciones radiales son $[k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}]$

$$R_{\ell M}(r) = A_{\ell M} h_\ell^{(1)}(kr) + B_{\ell M} h_\ell^{(2)}(kr) \quad [18.5.a']$$

y son, así, la generalización natural al presente caso de [12.2.10]. Ambas funciones de Bessel (de tercera clase), representando ondas esférica entrantes ($h_\ell^{(2)}$) y salientes ($h_\ell^{(1)}$), deben contribuir a $R_{\ell M}(r)$. $A_{\ell M}$ y $B_{\ell M}$ son constantes. Puesto que $R_{\ell M}(r)$ ha de ser continua para todo r : $\lim_{r \rightarrow a} R_{\ell M}(r) = 0$. Por tanto:

$$A_{\ell M} h_\ell^{(1)}(ka) + B_{\ell M} h_\ell^{(2)}(ka) = 0 \quad [18.5.b']$$

Para $r \rightarrow \infty$, el comportamiento asintótico de $h_\ell^{(1)}$ y $h_\ell^{(2)}$ (sección 12.2), [18.6.3] y la comparación con [18.6.2] permiten expresar $A_{\ell M}$ y $B_{\ell M}$ en términos de las constantes $C_{\ell M}$ y de los defasajes δ_ℓ :

$$A_{\ell M} = \frac{k}{2} C_{\ell M} \exp i\delta_\ell \quad , \quad B_{\ell M} = \frac{k}{2} C_{\ell M} \exp(-i\delta_\ell) \quad [18.5.c']$$

Las constantes $C_{\ell M}$ vendrían dadas por [18.4.b] (en el caso en el que la onda incidente fuese plana). Finalmente, la fórmula general para $\exp 2i\delta_\ell$ se obtiene inmediatamente a partir de [18.5.b'] y [18.5.c']:

$$\exp 2i\delta_\ell = -\frac{h_\ell^{(2)}(ka)}{h_\ell^{(1)}(ka)} \quad [18.5.d']$$

de donde, a su vez, pueden extraerse fácilmente δ_ℓ y, posteriormente, f_ℓ .

18.6. La combinación de [18.1.14] y [18.6.8] junto con la propiedad

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta P_\ell(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) = \frac{1}{2\ell + 1} \delta_{\ell\ell'} \quad [18.6.a']$$

(véase la sección 11.4), conducen directamente a [18.6.9].

18.7. La fórmula de recurrencia $(\ell + 1)P_{\ell+1}(\cos \theta) = (2\ell + 1) \cos \theta \cdot P_\ell(\cos \theta) - \ell P_{\ell-1}(\cos \theta)$, junto con $P_0(\cos \theta) = 1$, $P_1(\cos \theta) = \cos \theta$ implican $P_\ell(\cos \theta = 1) = 1$ para todo ℓ . A partir de este resultado, haciendo $\mathbf{p}' = \mathbf{p}$ en [18.6.6] (con lo cual $\theta = 0$), notando que todos los δ_ℓ son reales y comparando [18.6.6-7] con [18.6.9], se comprueba directamente el teorema óptico.

18.8. Para $\ell = 0$, la fórmula [18.5.d'] y las fórmulas para $h_0^{(1)}(ka)$ y $h_0^{(2)}(ka)$ que resultan de la sección 12.2 implican directamente

$$\delta_0 = -ak \quad [18.8.a']$$

para cualquier valor de k , es decir, de la energía. Claramente, [18.8.a'] es consistente con [18.6.11], siendo $a_0 = a$ la correspondiente longitud de dispersión. Nó-

tese que $a_0 > 0$, de acuerdo con la idea intuitiva de que el potencial considerado es (¡infinitamente!) repulsivo en $0 < r < a$.

Para $\ell \geq 1$, [18.5.d'] y las fórmulas que dan los comportamientos de $j_\ell(ka)$, $y_\ell(ka)$ para $k \rightarrow 0$ (sección 12.2) implican, tras unas pequeñas manipulaciones:

$$\delta_\ell \approx -\arctg \left\{ \frac{(ka)^{2\ell+1}}{[(2\ell+1)!(2\ell-1)!]} \right\} \approx -\frac{(ka)^{2\ell+1}}{[(2\ell+1)!(2\ell-1)!]}$$

que es consistente con [18.6.11]. En consecuencia:

$$a_\ell = \frac{a^{2\ell+1}}{[(2\ell+1)!(2\ell-1)!]}$$

18.9. Para $0 \leq r < a$, la función de onda radial es similar a [12.2.9], es decir

$$R_{\ell M}(r) = A_{\ell M} j_\ell(k_1 r)$$

La función esférica de Bessel $j_\ell(k_1 r)$ y k_1 fueron dadas en la sección 12.2. Para $a < r < +\infty$, la función de onda está dada en [18.5.a'] y [18.5.c']. Las constantes $A_{\ell M}$ y $C_{\ell M}$ y los defasajes δ_ℓ están relacionados entre sí debido a las dos condiciones de continuidad de $R_{\ell M}$ y de $dR_{\ell M}/dr$ en $r = a$. Dichas condiciones ya fueron utilizadas en la sección 12.2 y son la generalización directa, en el caso tridimensional actual, de las utilizadas en los capítulos 8 y 9. Así pues, dividiendo entre sí esas dos condiciones, $A_{\ell M}$ y $C_{\ell M}$, se cancelan y se obtiene la ecuación que da $\exp i2\delta_\ell$

$$\frac{\left. \frac{dj_\ell(k_1 r)}{dr} \right|_{r=a}}{j_\ell(k_1 a)} = \frac{\exp i2\delta_\ell \left. \frac{dh_\ell^{(1)}(kr)}{dr} \right|_{r=a} + \left. \frac{dh_\ell^{(2)}(kr)}{dr} \right|_{r=a}}{\exp i2\delta_\ell \times h_\ell^{(1)}(ka) + h_\ell^{(2)}(ka)}$$

18.10. Se tiene

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \approx \frac{1}{k} \sum_{\ell'=0}^{\infty} (2\ell'+1) f_{\ell'} P_{\ell'}(\cos \theta)$$

Multiplicando por $\sin \theta P_\ell(\cos \theta)$, integrando en $0 \leq \theta \leq \pi$ y utilizando [18.6.a'], se obtiene la fórmula buscada

$$f_\ell \approx \frac{1}{k} \int_0^\pi d\theta \sin \theta P_\ell(\cos \theta) f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \quad , \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Recuérdese que, a su vez, $f_{\text{Born}}(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ está dada en [18.3.1].

PARTE TERCERA

Átomos

- El átomo de hidrógeno.
- Átomos en campos externos constantes.
- Absorción y emisión de luz por los átomos.
- El átomo de helio.
- Átomos multielectrónicos.

BIBLIOGRAFÍA

- Galindo, A., Pascual, P., Sancho, J., Guerra, J. M. y Escudero, J. L. (1985). *Mecánica Cuántica (Física Cuántica)*. Madrid: UNED.
La parte de Física Atómica y molecular, aunque de un nivel más elemental que la de este libro, puede servir al alumno para iniciarse en el estudio de estos temas.
- Gasiorowicz, S. (1974). *Quantum Physics*. Nueva York: John Wiley & Sons.
Libro de nivel similar a éste que puede complementarlo en algunos temas.
- Finkelburg, W. (1964). *Structure of matter*, Nueva York: Academic Press.
Es un libro clásico en el estudio de la estructura de la materia. En el tratamiento de todos los temas que aborda parte de hechos experimentales y describe los instrumentos adecuados para su comprobación.
- Sánchez del Río, C. (1977). *Introducción a la teoría del átomo*. Madrid: Alhambra.
Libro específico de Física Atómica de nivel superior a lo exigible a un alumno que aborda por primera vez el estudio de la Física Cuántica; sin embargo, trata los temas de manera muy didáctica, lo que permite que sea adecuado para consulta en algunos casos.
- Holden, A. (1971). *Bonds Between atoms*. Oxford: Clarendon Press.
Es un libro breve adecuado para el lector que quiera introducirse en el estudio de la Física Molecular a partir de la consideración de las interacciones interatómicas. Son interesantes los ejemplos y las discusiones que presenta para reflexionar sobre diferentes aspectos de los temas que trata.

19

El átomo de hidrógeno

José Luis Escudero
José Manuel Guerra

19.1. INTRODUCCIÓN

Una vez que en los capítulos anteriores se ha estudiado con cierto detalle el formalismo de la mecánica cuántica, nos encontramos ya en condiciones de abordar, haciendo uso del mismo, algunos problemas particulares de interés en física. De la misma manera que el estudio clásico del movimiento se reduce en general al planteamiento y resolución de la ecuación de Newton, cuando se trata un problema con los métodos de la mecánica cuántica se debe plantear y resolver la ecuación de Schrödinger. En la mayor parte de los casos la resolución de esta ecuación no es sencilla y, desde luego, casi nunca es posible su resolución analítica; veremos más adelante que en muchos casos es incluso necesario efectuar aproximaciones en el propio proceso de plantear dicha ecuación.

Sin entrar en detalles de la importancia que tiene el conocimiento de la estructura atómica en amplios campos de la física, a cualquiera se le alcanza que el estudio de los átomos es fundamental para la comprensión de la Naturaleza. En definitiva, las propiedades de todo tipo de materiales vendrán definidas por la clase de átomos que los componen, ya sean aislados o formando parte de estructuras más complicadas.

Al ocuparnos en este capítulo del tratamiento cuántico del átomo de hidrógeno, estamos realmente iniciando el estudio microscópico de la estructura de la materia, que proseguirá con el de átomos más complicados, moléculas, sólidos, núcleos y partículas elementales. La razón de dedicar algunos capítulos al tratamiento específico del átomo de hidrógeno es doble. En primer lugar, es el único caso físico en el cual, en su tratamiento elemental, es posible la resolución analítica de la ecuación de Schrödinger, lo cual ya le da suficiente singularidad, pero, además, los métodos que se utilizarán en el tratamiento de los átomos más complicados se basan en definitiva en los resultados que se obtienen con este átomo, tomándolos como punto de partida en las aproximaciones necesarias para ser resueltos.

Realmente, cuando se consideran todas las propiedades del electrón en el átomo de hidrógeno (espín o efectos relativistas), el tratamiento no es tan sencillo y, de hecho, habría que acudir a ecuaciones más complicadas para su estudio. Sin embargo las modificaciones que estos efectos producen en el esquema de niveles de energía del átomo, aunque importantes, representan correcciones pequeñas que pueden ser tratadas como aproximaciones con la propia ecuación de Schrödinger.

19.2. FUNCIÓN DE ONDAS DEL ÁTOMO DE HIDRÓGENO

El átomo de hidrógeno está formado por un electrón de carga e ($e \approx -1.6 \times 10^{-19}$ C) y masa del orden de 10^{-30} kg y un núcleo de carga $|e|$ y una masa aproximadamente 1.800 veces la del electrón. El problema no se complica si se incluye en el tratamiento un núcleo de carga $|Ze|$, que corresponde a un ion procedente de un átomo de Z electrones al que se le ha dejado solamente un electrón (átomos hidrogenoides).

El átomo así descrito constituirá un sistema de dos partículas en interacción coulombiana (figura 19.1) de potencial:

$$-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad [19.2.1]$$

caso que ya se ha estudiado en el capítulo 12 como ejemplo de un potencial central. Allí se obtuvieron las soluciones en la forma:

$$\phi_{n\ell m}(\mathbf{r}, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

donde $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$; $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$ son los armónicos esféricos y las funciones radiales $R_{n\ell}(r)$ están dadas y tabuladas para los primeros números cuánticos en el capítulo 12.

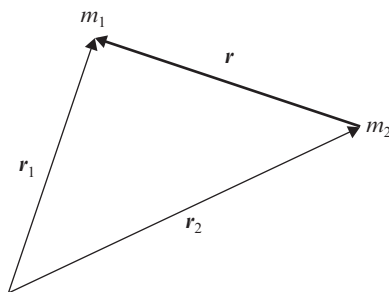


Figura 19.1. Sistema de dos partículas en interacción.

Tal como está indicado en la propia notación, la función de ondas del átomo de hidrógeno depende de tres números cuánticos: n , ℓ y m . Sin embargo, existen ciertas experiencias, como las de Stern-Gerlach, el efecto Zeeman anómalo o la estructura fina de las líneas espectrales, que indican que la función de ondas que hemos obtenido está incompleta, y para describir adecuadamente a los átomos hidrogenoides es necesario otro grado de libertad, es decir, introducir un nuevo número cuántico. Fueron Uhlenbeck y Goudsmit quienes postularon en 1925 la existencia del número cuántico de espín.

Por otro lado, hasta ahora hemos venido estudiando un planteamiento no-relativista que es válido en tanto que las velocidades típicas en el sistema sean pequeñas frente a la de la luz; así ocurre en el átomo de hidrógeno, en el que $v/c \approx 1/137$. No obstante, incluso en este caso hay efectos medibles, como la estructura fina de los niveles, que sólo tiene explicación cuantitativa en un cálculo relativista.

Para poder incluir tanto el espín como la teoría de la relatividad especial resulta necesario un planteamiento más general de la mecánica cuántica, al menos en lo que se refiere a la ecuación diferencial que da la evolución del estado del sistema. De modo general, y en el caso de un solo electrón, todos estos efectos quedan incluidos en una ecuación conocida como ecuación de Dirac. Esta ecuación no es generalizable a más de un electrón y, por tanto, con excepción de los átomos hidrogenoides, los demás deben estudiarse con hamiltonianos que sólo incluyen correcciones relativistas hasta un cierto orden.

19.3. CORRECCIÓN RELATIVISTA AL ÁTOMO DE HIDRÓGENO

En la teoría de Schrödinger no-relativista del átomo de hidrógeno, lo mismo que en la teoría no-relativista de Sommerfeld, la energía sólo depende del número cuántico principal n , estando, por tanto, degenerados los niveles de energía.

Vamos a ver en este apartado que en el caso de efectuar un planteamiento relativista se introducen correcciones al hamiltoniano que pueden ser tratadas como términos perturbativos y que como tales harán que la energía de los orbitales dependa, además, del número cuántico ℓ .

No obstante, debemos señalar que, en última instancia, la justificación de los resultados que obtendremos con el sencillo planteamiento que desarrollaremos a continuación se encuentra en su corroboración por la teoría relativista de Dirac.

En la teoría de Schrödinger, el hamiltoniano se plantea a partir de la ecuación de la energía:

$$E = \frac{p_c^2}{2m} + V \quad [19.3.1]$$

siendo $p_c = mv$.

La energía cinética es:

$$T = \frac{p_c^2}{2m} = \frac{1}{2}mv^2$$

Supongamos ahora que el electrón se mueve en un campo electromagnético:

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A} \\ \mathbf{E} &= -\nabla\varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \end{aligned}$$

donde \mathbf{A} es el potencial vector y φ el escalar. Como el campo electromagnético no es conservativo, habrá que hallar la nueva forma del hamiltoniano, para lo cual consideraremos la fuerza que actúa sobre el electrón, que será la de Lorentz:

$$\mathbf{F} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

cuyas componentes pueden escribirse:

$$F_i = \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial v_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \right) [e(\varphi - \mathbf{v} \times \mathbf{A})] \quad x_i = x, y, z \quad [19.3.2]$$

Por otro lado, teniendo en cuenta la ecuación de Newton

$$F_i = \frac{d}{dt} (mv_i) = \frac{d}{dt} (m\dot{x}_i)$$

y la expresión de la energía cinética

$$T = \sum_i \frac{1}{2} m \dot{x}_i^2$$

[19.3.2] es una ecuación de Lagrange:

$$F_i = \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \right) [e(\varphi - \mathbf{v} \times \mathbf{A})] = \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \right) T$$

con lagrangiano:

$$L = T - e\varphi + e\mathbf{v} \times \mathbf{A}$$

Así pues, el hamiltoniano no-relativista del electrón en el campo electromagnético será:

$$H = \sum_i p_i \dot{x}_i - L$$

donde el momento generalizado p_i es:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i + eA_i \quad \Rightarrow \quad \dot{x}_i = \frac{p_i - eA_i}{m}$$

y, por tanto, en vez del hamiltoniano que se deriva de [19.3.1], tenemos:

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + e\varphi \quad [19.3.3]$$

en donde \mathbf{p} representa el momento lineal generalizado del electrón en el campo electromagnético, y es a esta magnitud a la que se asociará el operador de momento lineal:

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$$

La magnitud que hay que sustituir por el operador momento para convertir la expresión clásica [19.3.1] en su correspondiente cuántica será entonces:

$$\mathbf{p}_e = m\mathbf{v} = \mathbf{p} - e\mathbf{A} \quad [19.3.4]$$

El hamiltoniano [19.3.3] no contiene explícitamente el momento intrínseco de espín; para introducirlo, se puede seguir un camino de regresión hacia los resultados de la teoría de Dirac. Postularemos que debe de hacerse la siguiente sustitución:

$$(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 \rightarrow [\boldsymbol{\sigma} \times (\mathbf{p} - e\mathbf{A})]^2 \quad [19.3.5]$$

donde $\boldsymbol{\sigma}$, como el momento angular de espín, es un operador vectorial que actúa sobre un espacio de Hilbert bidimensional, cuyas componentes son las matrices de Pauli.

El postulado [19.3.5] representa una versión no-relativista del procedimiento que se utiliza para obtener la ecuación de Dirac a la que anteriormente hemos aludido y se justifica en que los resultados que obtendremos se corresponden con los que aparecen cuando se utiliza dicha ecuación.

Con [19.3.5], el hamiltoniano [19.3.3] se transforma en:

$$H = \frac{1}{2m} [\boldsymbol{\sigma} \times (\mathbf{p} - e\mathbf{A})]^2 + e\varphi \quad [19.3.6]$$

Si se hace uso de la identidad fácilmente comprobable:

$$(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{b}) = \mathbf{a} \times \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad [19.3.7]$$

siendo \mathbf{a} y \mathbf{b} vectores cuyas componentes sean operadores sobre otro espacio de Hilbert y que, por tanto, conmutan con las matrices de Pauli y se trabaja en el referencial de Coulomb:

$$\nabla \times \mathbf{A} = 0$$

se obtiene (ejercicio 19.4):

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 - \frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{B} + e\varphi \quad [19.3.8]$$

En el hamiltoniano [19.3.8], el primer término representa el efecto de un campo magnético en el movimiento del electrón, y el segundo (consecuencia de la introducción de las matrices de Pauli) es la interacción intrínseca del electrón con el campo magnético a través de su momento magnético de espín:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$$

Además, desde el punto de vista de la dinámica relativista, la energía cinética será:

$$T_{\text{rel}} = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} - mc^2 \quad [19.3.9]$$

donde m es la masa en reposo del electrón.

La energía total es, por tanto, eliminando la de masa:

$$E_{\text{rel}} = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} - mc^2 + e\varphi \quad [19.3.10]$$

Las velocidades orbitales, como ya hemos indicado, son del orden de la centésima parte de la de la luz:

$$p^2 \ll m^2 c^2$$

con lo que se puede desarrollar en serie la raíz cuadrada de [19.3.9] quedándose solamente con los primeros términos:

$$T_{\text{rel}} = mc^2 \left[\frac{p^2}{2m^2 c^2} - \frac{p^4}{8m^4 c^4} + \dots \right] \simeq \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2}$$

Así pues, aparece un término adicional:

$$-\frac{p^4}{8m^3 c^2}$$

que habrá que añadir al hamiltoniano no-relativista:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V \quad ; \quad V = e\varphi \quad [19.3.11]$$

Para incorporar el espín a esta corrección relativista deberemos hacer uso del postulado [19.3.5]:

$$\begin{aligned} p^4 &= (p^2)^2 \rightarrow (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p})^2 (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p})^2 = (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) [p^2 + i\boldsymbol{\sigma} \times (\mathbf{p} \times \mathbf{p})] (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) = \\ &= (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) p^2 (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \simeq 2m(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p})(H_0 - V)(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \end{aligned} \quad [19.3.12]$$

donde se ha hecho uso de [19.3.7] y de que por [19.3.11], aproximadamente:

$$p^2 \simeq 2m(H_0 - V) \quad [19.3.13]$$

No se ha efectuado aquí la sustitución [19.3.4] porque los términos adicionales que se obtendrían serían una corrección de orden superior a la que estamos considerando en el potencial vector.

Entonces, el hamiltoniano corregido hasta términos en p^4 y considerando el espín es:

$$H = H_0 - \frac{1}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p})(H_0 - V)(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \quad [19.3.14]$$

en donde, si se hace otra vez uso de [19.3.7], se puede poner en la forma:

$$(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p})(H_0 - V)(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) = (H_0 - V)p^2 + i\hbar(\nabla V) \times \mathbf{p} - \hbar\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V \times \mathbf{p}$$

Por otro lado:

$$[p^2, (H_0 - V)] = p^2(H_0 - V) - (H_0 - V)p^2 = \hbar^2(\nabla^2 V) + 2i\hbar(\nabla V) \times \mathbf{p} \quad [19.3.15]$$

es decir:

$$p^2(H_0 - V) = (H_0 - V)p^2 + \hbar^2(\nabla^2 V) + 2i\hbar(\nabla V) \times \mathbf{p}$$

o, lo que es lo mismo:

$$(H_0 - V)p^2 + i\hbar^2(\nabla V) \times \mathbf{p} = p^2(H_0 - V) - \hbar^2(\nabla^2 V) - i\hbar(\nabla V) \times \mathbf{p} \quad [19.3.16]$$

La expresión [19.3.16] puede ponerse en una forma más adecuada despejando $i\hbar(\nabla V) \times \mathbf{p}$ y sustituyéndolo en el lado derecho de [19.3.16]:

$$(H_0 - V)p^2 + i\hbar(\nabla V) \times \mathbf{p} = \frac{1}{2}[(H_0 - V)p^2 + p^2(H_0 - V)] - \frac{1}{2}\hbar^2(\nabla^2 V) \quad [19.3.17]$$

Por último, con [19.3.17], y recordando la aproximación [19.3.13], el hamiltoniano [19.3.14] toma la forma:

$$H = H_0 - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{\hbar^3}{8m^2c^2}\nabla^2 V + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \times (\nabla V \times \mathbf{p})$$

y, en definitiva, con [19.3.8] y [19.3.17] el hamiltoniano del electrón con espín en un campo electromagnético y con corrección relativista es:

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 - \frac{e\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{B} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2 V + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \times (\nabla V \times \mathbf{p}) + e\varphi \quad [19.3.18]$$

Cada uno de los términos de [19.3.18] puede ser interpretado en la siguiente forma:

- Los dos primeros ya han sido interpretados anteriormente.
- El tercero es la corrección de primer orden debida a la variación relativista de la masa con la velocidad.
- El cuarto se conoce como término de Darwin y no tiene análogo clásico.

- El quinto término corresponde al acoplo espín-órbita, que, en el caso de un potencial central, toma la forma:

$$\nabla V = \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{r} \quad [19.3.19]$$

o sea:

$$\frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \times \mathbf{L} \quad [19.3.20]$$

ya que:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad \text{y} \quad \mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}$$

19.4. LA CORRECCIÓN RELATIVISTA Y EL TÉRMINO DE DARWIN

En el caso de los átomos hidrogenoides aislados, el campo en el que se mueve el electrón es el creado por el núcleo:

$$V = e\varphi = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad [19.4.1]$$

Si de las correcciones que hemos calculado al hamiltoniano del electrón nos quedamos únicamente con la correspondiente a la corrección relativista de la masa, la ecuación de Schrödinger toma la forma:

$$E_s \chi_s = \left(\frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3c^2} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \chi_s \quad [19.4.2]$$

observándose que las dos componentes de χ_s cumplen exactamente la misma ecuación diferencial y, por tanto, se puede resolver el problema con una de ellas prescindiendo del carácter espinorial de la ecuación.

Para tratar el problema mediante teoría de perturbaciones consideraremos como hamiltoniano no perturbado:

$$H^0 = \frac{p^2}{2m} + V \quad [19.4.3]$$

y como perturbador:

$$W = -\frac{p^4}{8m^3c^2} \quad [19.4.4]$$

Despejando:

$$p^2 = 2m(H^0 - V)$$

se puede poner

$$W = -\frac{1}{2mc^2} [(H^0)^2 + V^2 - (H^0V + VH^0)] \quad [19.4.5]$$

H^0 es el hamiltoniano del átomo de hidrógeno no corregido, por lo que los autovalores de la energía no perturbada dependerán solamente del número cuántico principal. Si llamamos a esta energía E_n^0 y por simplicidad de notación agrupamos los dos subíndices ℓ, m en uno solo, las correcciones a la energía se obtendrán resolviendo el determinante secular:

$$\begin{vmatrix} \langle n1|W|n1\rangle - \Delta E_{n1} & \dots & \langle n1|W|ng_n\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle ng_n|W|n1\rangle - n_1 & \dots & \langle ng_n|W|ng_n\rangle - \Delta E_{ng_n} \end{vmatrix} = 0 \quad [19.4.6]$$

Los elementos de matriz haciendo uso de [19.4.5] toman la forma:

$$\langle ni'|W|ni\rangle = \langle n\ell'm' | -\frac{1}{2mc^2} [(H^0)^2 + V^2 - (H^0V + VH^0)] |n\ell m\rangle \quad [19.4.7]$$

Estudiaremos separadamente cada uno de los sumandos:

$$\langle n\ell'm' | (H^0)^2 |n\ell m\rangle = E_n^{0_2} \langle n\ell'm' |n\ell m\rangle = E_n^{0_2} \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm} \quad [19.4.8]$$

ya que $|n\ell m\rangle$ es autovector de H^0 con autovalor E_n^0 . Es decir, este sumando sólo da términos diagonales.

Como V^2 es sólo función de r , en la representación de la posición queda:

$$\langle n\ell'm' | V^2 |n\ell m\rangle = \int_0^{4\pi} \int_0^\infty R_{n\ell}^2(r) V^2(r) r^2 dr Y_{\ell'}^{m'} Y_\ell^m d\Omega = \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm} \int_0^\infty R_{n\ell}^2 V^2 r^2 dr \quad [19.4.9]$$

que también es diagonal.

El siguiente sumando:

$$\begin{aligned} \langle n\ell'm'|H^0V|n\ell m\rangle &= E_n^0 \langle n\ell'm'|V|n\ell m\rangle = E_n^0 \int_0^\infty \int_0^{4\pi} R_{n\ell}^2 V r^2 dr Y_{\ell'}^{m'} Y_\ell^m d\Omega = \\ &= \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm} E_n^0 \int_0^\infty R_{n\ell}^2 V r^2 dr \end{aligned} \quad [19.4.10]$$

también es diagonal. Y, finalmente:

$$\begin{aligned} \langle n\ell'm'|VH^0|n\ell m\rangle &= E_n^0 \langle n\ell'm'|V|n\ell m\rangle = E_n^0 \int_0^\infty \int_0^{4\pi} R_{n\ell}^2 V r^2 dr Y_{\ell'}^{m'} Y_\ell^m d\Omega = \\ &= \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm} E_n^0 \int_0^\infty R_{n\ell}^2 V r^2 dr \end{aligned} \quad [19.4.11]$$

que es igual a [19.4.10]. Sustituyendo [19.4.8, 9, 10 y 11] en [19.4.7], y teniendo en cuenta que, al ser el determinante diagonal, las raíces de la ecuación [19.4.6] coinciden con los elementos de la diagonal principal:

$$\Delta E_{n\ell} = -\frac{(E_n^0)^2}{2mc^2} - \frac{1}{2mc^2} \int_0^\infty R_{n\ell}^2 V^2 r^2 dr + \frac{E_n^0}{mc^2} \int_0^\infty R_{n\ell}^2 V r^2 dr \quad [19.4.12]$$

que, como vemos, no depende del número cuántico m .

Como en un átomo hidrogenoide V está dado por [19.4.1], queda:

$$\Delta E_{n\ell} = -\frac{(E_n^0)^2}{2mc^2} - \frac{Z^2 e^4}{2(4\pi)^2 \epsilon_0^2 c^2 m} \int_0^\infty R_{n\ell}^2 dr - \frac{Z e^2 E_n^0}{4\pi \epsilon_0 c^2 m} \int_0^\infty R_{n\ell}^2 r dr$$

Sustituyendo los $R_{n\ell}$ por sus expresiones (capítulo 12), y realizando las integrales:

$$\Delta E_{n\ell} = \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{2}{2\ell+1} - \frac{3}{4n} \right) E_n^0 \quad [19.4.13]$$

donde:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

es la constante de estructura fina.

En [19.4.13] se puede observar que la corrección relativista ha levantado la degeneración en el número cuántico ℓ . La energía del estado que representa el autovector $|n\ell m\rangle$ será entonces:

$$E_{n\ell} = E_n^0 + \Delta E_{n\ell} = \left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{\ell + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] E_n^0 \quad [19.4.14]$$

Debe tenerse en cuenta que la corrección introducida es negativa, ya que $\ell \leq n - 1$, lo que significa que tiende a hacer más negativa la energía de los niveles. Veamos ahora cuál es el efecto del término de Darwin:

$$W = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 V \quad [19.4.15]$$

Para ello lo consideraremos como una perturbación del hamiltoniano:

$$H^0 = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

y, como en el caso que acabamos de estudiar, la ecuación de estado será:

$$E_s \chi_s = \left(\frac{p^2}{2m} + V(r) + \frac{\hbar^2 \nabla^2 V}{8m^2 c^2} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \chi_s \quad [19.4.16]$$

con lo que también ahora la ecuación es la misma para las dos componentes del espinor y prescindiremos del carácter espinorial de la ecuación.

Dado que el término perturbativo contiene únicamente variables espaciales, se le puede dar el mismo tratamiento que en la corrección relativista. Por tanto, deberemos calcular los elementos de matriz:

$$\langle n\ell'm' | \nabla^2 V(r) | n\ell m \rangle = \int \phi_{n\ell'm'}^*(r) \nabla^2 V(r) \phi_{n\ell m}(r) dr \quad [19.4.17]$$

con V dado por [19.4.1].

Pero cuando $\nabla^2(1/r)$ está en una integral de volumen, es una de las posibles representaciones de la delta de Dirac tridimensional:

$$-\frac{1}{4\pi} \nabla^2(1/r) = \delta(r)$$

con lo que [19.4.17] es:

$$\begin{aligned} \langle n\ell'm' | \nabla^2 V(r) | n\ell m \rangle &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} 4\pi \int \phi_{n\ell'm'}^* \delta(r) \phi_{n\ell m}(r) dr = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} 4\pi \phi_{n\ell'm'}^*(0) \phi_{n\ell m}(0) = \\ &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} 4\pi |\phi_{n00}(0)|^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2\alpha^4}{n^3} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \end{aligned}$$

ya que solamente son distintos de cero en el origen las funciones de onda de los estados s (véase el problema 19.2).

De esta manera, otra vez, es diagonal el determinante secular, siendo la corrección energética de Darwin:

$$E_D = \langle n00 | \frac{\hbar^2 \nabla^2 V}{8m^2 c^2} | n00 \rangle = \frac{1}{n^3} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = -\frac{Z^2 \alpha^2}{n} E_n^0 \quad [19.4.18]$$

Teniendo en cuenta todas las correcciones que hemos considerado hasta ahora, la energía del átomo hidrogenoide será:

$$E_{n\ell} = \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\delta_{\ell 0} + \frac{1}{\ell + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] E_n^0 \quad [19.4.19]$$

19.5. EL ACOPLLO ESPÍN-ÓRBITA Y LA ESTRUCTURA FINA EN LOS ÁTOMOS HIDROGENOIDES

Vamos ahora a estudiar la contribución a la energía de los niveles del término de acoplo entre los momentos magnéticos de espín y orbital del hamiltoniano [19.3.18]:

$$W = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \times \mathbf{L} \quad ; \quad \chi(r) = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \quad [19.5.1]$$

Para ello, consideraremos [19.5.1] como una perturbación del hamiltoniano:

$$H^0 = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

cuyos autovectores son los $|n\ell m\rangle$ correspondientes a los números cuánticos principal, n , y orbitales ℓ y m . Estos números cuánticos caracterizan la base común de los tres operadores H^0 , L^2 y L_z , los cuales forman un conjunto completo de observables que conmutan, siempre que se prescinda del espín del electrón.

El hamiltoniano no perturbado es independiente del espín, pero el perturbador [19.5.1] depende del espín, por lo que el espacio de Hilbert necesario para describir el sistema será el que se obtiene como producto tensorial del generado por H^0 por el bidimensional del espín.

Una posible base para este espacio es la que se obtiene como producto tensorial de los $|n\ell m\rangle$ por los de espín:

$$|sm_s\rangle \begin{cases} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

es decir:

$$|n\ell m\rangle \otimes |sm_s\rangle = |n\ell \frac{1}{2} mm_s\rangle \quad [19.5.2]$$

que en representación posición-espín serían:

$$\begin{aligned} R_{n\ell}(r)Y_\ell^m(\theta, \varphi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ R_{n\ell}(r)Y_\ell^m(\theta, \varphi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad [19.5.3]$$

El empleo de esta base se apoya en el hecho de que H^0 , L^2 , L_z , S^2 y S_z forman un conjunto completo de observables que conmutan en el espacio de Hilbert del sistema.

Ahora bien, el operador de acoplo espín-órbita:

$$L \times S = L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z \quad [19.5.4]$$

que conmuta con L^2 y con S^2 y, por tanto, con H^0 , no lo hace con L_z , ya que tiene sumandos en L_x y en L_y . Por la misma razón, tampoco conmuta con S_z . Sin embargo, ya sabemos que también es posible emplear la base estándar del acoplo.

$$|n\ell \frac{1}{2} jm_j\rangle \begin{cases} j = \ell + s \dots |\ell - s| \\ m_j = j, j - 1 \dots -j \end{cases} \quad [19.5.5]$$

que corresponde al conjunto completo de observables formado por H^0 , L^2 , S^2 , J^2 y J_z , siendo \mathbf{J} el momento angular total:

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \mathbf{L} + \mathbf{S} \\ J_z &= L_z + S_z \end{aligned}$$

Como:

$$L \times S = \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2)$$

es evidente que el hamiltoniano de acoplo [19.3.20] conmuta con J^2 y con J_z . Por tanto, en la base estándar este hamiltoniano perturbador será diagonal, siendo ésta la representación que nos interesa.

En términos clásicos, la energía de interacción espín-órbita en la primera órbita del átomo de hidrógeno es:

$$|E_{cs}| \approx \frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^2}{m^2} \frac{\hbar^3}{a_0^3} = 7.2 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

mientras que la energía E^0 es en esa órbita:

$$|E^0| = -13.6 \text{ eV}$$

por lo que:

$$E_{\ell s} \ll E^0$$

y el problema se puede tratar perturbativamente con gran precisión.

Al ser W diagonal en la base estándar, sus elementos de matriz en esta base darán directamente las correcciones a la energía:

$$(E_{\ell s})_{n\ell j} = \langle n\ell \frac{1}{2} jm_j | \frac{1}{2} \chi(r) (J^2 - L^2 - S^2) | n\ell \frac{1}{2} jm_j \rangle$$

que, al ser:

$$J^2 | n\ell \frac{1}{2} jm_j \rangle = j(j+1)\hbar^2 | n\ell \frac{1}{2} jm_j \rangle$$

$$L^2 | n\ell \frac{1}{2} jm_j \rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2 | n\ell \frac{1}{2} jm_j \rangle$$

$$S^2 | n\ell \frac{1}{2} jm_j \rangle = s(s+1)\hbar^2 | n\ell \frac{1}{2} jm_j \rangle = \frac{3\hbar^2}{4} | n\ell \frac{1}{2} jm_j \rangle$$

se obtiene:

$$(E_{\ell s})_{n\ell j} = \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right] \langle n\ell \frac{1}{2} jm_j | \chi(r) | n\ell \frac{1}{2} jm_j \rangle \quad [19.5.6]$$

Los elementos de matriz:

$$\langle n\ell \frac{1}{2} jm_j | \chi(r) | n\ell \frac{1}{2} jm_j \rangle$$

pueden obtenerse cambiando de representación, teniendo en cuenta que un valor cualquiera de m_j sólo puede obtenerse de dos maneras en la base $|n\ell s m_\ell m_s\rangle$:

$$\left. \begin{array}{l} m_\ell = m_j - \frac{1}{2} \\ m_s = \frac{1}{2} \end{array} \right\} |n, \ell, \frac{1}{2}, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\rangle$$

$$\left. \begin{array}{l} m_\ell = m_j + \frac{1}{2} \\ m_s = -\frac{1}{2} \end{array} \right\} |n, \ell, \frac{1}{2}, m_j + \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}\rangle$$

con lo que el vector $|n, \ell, 1/2, j, m_j\rangle$ será una combinación lineal de:

$$|n\ell \frac{1}{2} jm_j\rangle = C\left(j, m_j, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right)|n, \ell, \frac{1}{2}, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\rangle + \\ + C'\left(j, m_j, m_j + \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}\right)|n, \ell, \frac{1}{2}, m_j + \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}\rangle$$

donde los C 's son coeficientes de Clebsch-Gordan.

De esta manera, teniendo en cuenta las propiedades de los armónicos esféricos y la forma de las funciones radiales de los átomos hidrogenoides, se llega a (véase el problema 19.4):

$$(E_{\ell s})_{n\ell j} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z^4 e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2 a_0^3 n^3} \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4}{\ell(\ell+1)(\ell+1/2)}$$

y como:

$$E_n^0 = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z^2 e^2}{2m^2 a_0} \quad ; \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \quad ; \quad a_0 = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{me^2}$$

resulta:

$$(E_{\ell s})_{n\ell j} = -E_n^0 \frac{Z^2 \alpha^2}{2n} \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4}{\ell(\ell+1)(\ell+1/2)} \quad [19.5.7]$$

La ecuación [19.5.7] queda indeterminada cuando $\ell = 0$, ya que entonces $j = 1/2$ y se anulan simultáneamente numerador y denominador. Es éste un defecto de la aproximación que estamos utilizando; una mejor aproximación conduce a que este denominador es distinto de cero cuando $\ell = 0$ y, por tanto:

$$(E_{\ell s})_{n01/2} = 0$$

donde:

$$\lim_{\ell \rightarrow 0} j \rightarrow \ell + 1/2 \rightarrow 1/2$$

por lo que se debe eliminar esta contribución incorrecta que da la ecuación para $\ell = 0$:

$$(E_{\ell s})_{n\ell j} = \frac{Z^2 \alpha^2}{2n} \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4}{\ell(\ell+1)(\ell+1/2)} (1 - 2\delta_{\ell 0})$$

El último término se cancela con la contribución del término de Darwin, y queda, en definitiva, la energía corregida del átomo hidrogenoide:

$$E_{nj} = E_n^0 \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{2n} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad [19.5.8]$$

En definitiva, todos los niveles se desdoblán en dos (forman dobletes) y quedan caracterizados por tres números cuánticos: n , ℓ y j , además de m_j , del cual no depende la energía.

19.6. OTRAS CORRECCIONES

Si se observa la expresión que da la corrección correspondiente a la estructura fina, se puede ver que la energía depende del número cuántico principal n y del j , pero no lo hace del número ℓ . Sin embargo, esto no es estrictamente así; por ejemplo, en el hidrógeno, los niveles:

$$n = 2; \ell = 0; j = 1/2 \quad \text{y} \quad n = 2; \ell = 1; j = 1/2$$

se diferencian en una energía del orden de 10^{-6} eV. Este desplazamiento se conoce como desplazamiento de Lamb, el cual no es explicable más que en teoría electrodinámica cuántica.

Por otro lado, no solamente el electrón posee un momento magnético de espín, sino que también lo tienen muchos núcleos; por ello, además del acoplamiento espín-órbita para dar el número cuántico j , aparece un acoplamiento entre el momento total j del electrón y el de espín del núcleo, dando lugar a nuevas correcciones de energía y desdoblamiento de niveles que se conocen como estructura hiperfina de los átomos (véase capítulo 23).

EJERCICIOS

19.1. Un electrón que se mueve sometido a una energía potencial $V(\mathbf{r})$ ejecuta pequeñas fluctuaciones al azar alrededor de su trayectoria media (Zitterbewegung). La desviación cuadrática media de estas fluctuaciones es $\lambda_c/2$, siendo $\lambda_c = \hbar/mc$ la longitud de onda Compton. Se pide encontrar la corrección que aparece en la energía del electrón debida a estas fluctuaciones.

19.2. Para un electrón en el estado fundamental del átomo de hidrógeno, encontrar: *a)* el valor esperado, y *b)* el más probable de la posición. *c)* ¿Existirá, en este estado, una probabilidad no nula de encontrar al electrón en el interior del núcleo? ¿Y en otros estados?

19.3. Un átomo de hidrógeno se encuentra en el estado:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{100}(\mathbf{r}) + i\psi_{210}(\mathbf{r})]$$

Encontrar para cualquier instante el valor esperado de la energía total, de la potencial y de la cinética.

19.4. Encontrar los elementos de matriz del operador $\chi(r)$ dado por [19.5.1] entre estados [19.5.2].

19.5. En el término correctivo:

$$-\frac{(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p})(E - V)(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p})}{4m^2 c^2}$$

hacer uso de la identidad:

$$(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p})(E - V) = (E - V)(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) + i\hbar(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)$$

y comprobar que se obtienen términos correctivos al hamiltoniano que no son hermíticos.

20 Átomos en campos externos constantes

José Luis Escudero
José Manuel Guerra

20.1. INTRODUCCIÓN

Una vez que se ha considerado la corrección relativista y de haber tenido en cuenta el acoplamiento espín-órbita, cada estado del átomo de hidrógeno viene descrito por tres números cuánticos, por ejemplo, el número cuántico principal, n , que da cuenta aproximadamente de la energía del estado; el número cuántico orbital, ℓ , que da cuenta, en la teoría de Bohr, de la excentricidad de la órbita, y el j , que está relacionado con el momento angular total, incluido el espín. Sin embargo, del análisis de los espectros atómicos emitidos en presencia de campos se deduce la necesidad de introducir un cuarto número cuántico para describir de forma adecuada al electrón en el átomo. Este número cuántico m_j , especifica la orientación del momento angular total con respecto a una dirección privilegiada, introducida por el agente exterior, campo eléctrico o magnético, que interactúa con los electrones.

La manifestación experimental de esas interacciones es el desdoblamiento y desplazamiento de algunas líneas espectrales, observados por Zeeman en 1896, en lo que se refiere al efecto de un campo magnético, y por Stark en 1913, en cuanto a la acción de un campo eléctrico. Hoy en día se conocen como efectos Zeeman y Stark, respectivamente.

La importancia del efecto Zeeman se encuentra en que permite la determinación empírica de los números cuánticos de un estado atómico a partir del valor del desdoblamiento de la correspondiente línea espectral por efecto de un campo magnético, y el efecto Stark fue una de las primeras evidencias de la capacidad de la teoría cuántica para explicar un proceso atómico complicado.

20.2. EL EFECTO ZEEMAN

Faraday, a mediados del siglo XIX, ya había intentado, sin éxito, comprobar el efecto de un campo magnético sobre el espectro de una fuente luminosa. En 1896, repitió Zeeman el intento con un electroimán más potente, y observó efectivamente un ensanchamiento de las líneas espectrales emitidas por una llama de sodio. Este efecto fue prontamente explicado por Lorentz, considerando que la materia estaba formada por osciladores armónicos cargados, como los que veremos en el capítulo siguiente. En la figura 20.1 se esquematizan los resultados que se obtienen con la teoría de Lorentz. Si se observase el

espectro, valiéndose de un electroimán con las piezas polares perforadas, en la dirección en la que se aplica el campo magnético, estaría formado por dos líneas circularmente polarizadas, en sentidos contrarios, y desplazadas en frecuencias por igual a ambos lados de la línea que aparece en ausencia de campo, un valor:

$$\Delta v = \frac{eB}{4\pi m}$$

Por otro lado, si la observación se hiciese en la dirección normal al campo aplicado, se deberían ver tres líneas, todas ellas linealmente polarizadas; la de frecuencia central (que coincide con la original sin campo), con su vector eléctrico paralelo al eje del electroimán y en las dos laterales (de las mismas frecuencias que las que se observarían en la dirección del campo magnético), la dirección de polarización es perpendicular al campo magnético (figura 20.1).

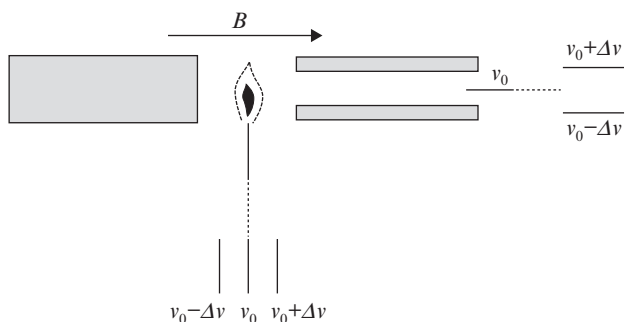


Figura 20.1. Efecto Zeeman del sodio.

El efecto que acabamos de describir se conoce como efecto Zeeman normal, y se da en muy pocas ocasiones; en general, la descomposición de líneas espectrales por efecto de un campo magnético es más complicada (efecto Zeeman anómalo) y no puede ser explicada mediante la teoría clásica de Lorentz. En concreto, el caso del sodio, como el de los demás alcalinos, corresponde a efectos anómalos, pero ya en 1897 el propio Zeeman comprobó experimentalmente los resultados de Lorentz en el efecto Zeeman normal del cadmio.

Nosotros vamos a tratar de explicar el efecto Zeeman en general sobre la base de los conocimientos que hemos adquirido en los anteriores capítulos sobre el modelo cuántico de los átomos hidrogenoides.

Supongamos entonces que se introduce el átomo de hidrógeno en un campo magnético externo B ; la razón física de la interacción entre el átomo y el campo externo está en que el electrón posee un momento magnético de origen orbital y otro de espín:

$$M_L = \frac{e}{2m} L \quad [20.2.1]$$

$$\mathbf{M}_S = \frac{e}{m} \mathbf{S} \quad [20.2.2]$$

que en presencia del campo magnético adquieren una energía:

$$E_B = -\mathbf{M}_L \times \mathbf{B} - \mathbf{M}_S \times \mathbf{B} = -\frac{e}{2m} \mathbf{B} \times (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \quad [20.2.3]$$

Si tomamos el eje z en la dirección del campo magnético:

$$E_B = -\frac{e}{2m} B(L_z + 2S_z) = -\frac{e}{2m} B(J_z + S_z) \quad [20.2.4]$$

Así pues, para tener en cuenta el efecto del campo magnético externo sobre los niveles atómicos habrá que añadir al hamiltoniano del mismo la energía [20.2.4]. Aparecen entonces dos situaciones que requieren diferente tratamiento:

1. A campos bajos:

$$E_B \ll E_{\ell s} = \chi(\mathbf{r}) \mathbf{L} \times \mathbf{S} \quad [20.2.5]$$

con lo que E_B será utilizado como un operador de perturbación del hamiltoniano atómico (incluidos en éste los operadores de estructura fina) (véase capítulo 19). Esta situación corresponde al efecto Zeeman.

2. Si, por el contrario, el campo magnético es suficientemente grande como para que:

$$E_B \gg E_{\ell s}$$

deberá ser considerado $E_{\ell s}$ como una perturbación de E_B y estaríamos ante el efecto Paschen-Back.

Las situaciones intermedias se describen como efecto Back-Goudsmit.

Nos limitaremos aquí a considerar el efecto Zeeman, en cuyo caso el hamiltoniano será:

$$H = H_0 - \frac{p^4}{8m^3c^3} + \chi(\mathbf{r}) \mathbf{L} \times \mathbf{S} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 V - \frac{e}{2m} B(J_z + S_z) \quad [20.2.6]$$

Para estudiar el efecto del campo magnético sobre los niveles de energía haremos uso de la teoría de perturbaciones ya conocida. Para ello, en [20.2.6] tomaremos como hamiltoniano no perturbado de estructura fina el:

$$H_{\text{of}} = H_0 - \frac{p^4}{8m^3c^3} + \chi(\mathbf{r}) \mathbf{L} \times \mathbf{S} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 V \quad [20.2.7]$$

y la perturbación magnética:

$$W_B = -\frac{e}{2m} B(J_z + S_z) \quad [20.2.8]$$

Como ya sabemos, el hamiltoniano no perturbado H_{of} [20.2.7] tiene como autovectores los de la base estándar $|n\ell jm_j\rangle$, pero si analizamos [20.2.8], observamos que, aunque conmuta con L^2 , S^2 y J_z , no lo hace con J^2 y, por tanto, los vectores de la base estándar no son autovectores de W_B y, en principio, por tanto, W_B no será diagonal en esta base. Los vectores de la base estándar están degenerados en el número cuántico m_j , por lo que, para diagonalizar el hamiltoniano W_B , deberemos resolver la ecuación secular:

$$\begin{vmatrix} \langle -j|W_B|-j\rangle - \Delta E_{-j} & \langle -j|W_B|-j+1\rangle & \langle -j|W_B|j\rangle \\ \langle -j+1|W_B|-j\rangle & \langle -j+1|W_B|-j+1\rangle - \Delta E_{-j+1} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle j|W_B|-j\rangle & \dots & \langle j|W_B|j\rangle - \Delta E_j \end{vmatrix} = 0 \quad [20.2.9]$$

donde para simplificar la notación hemos eliminado los números n, ℓ, j , con lo que, por ejemplo, la componente 1,1 del determinante representa:

$$\langle n, \ell, j, -j|W_B|n, \ell, j, -j\rangle - \Delta E_{M, \ell, j, -j}$$

Los elementos que aparecen en el determinante de la ecuación secular [20.2.9] son de la forma genérica:

$$\langle n, \ell, j, m'_j|W_B|n, \ell, j, m_j\rangle$$

El cálculo de estos elementos de matriz, aunque sencillo, es bastante laborioso si se hace directamente, pero existe una regla, deducida clásicamente por Landé, que permite su cálculo de forma sencilla (véase problema 20.3), obteniéndose:

$$\langle n, \ell, j, m'_j|W_B|n, \ell, j, m_j\rangle = -\frac{e}{2m} Bm_j\hbar g(\ell, s, j)\delta_{m'_j m_j} \quad [20.2.10]$$

donde los factores:

$$g(\ell, s, j) = 1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \quad [20.2.11]$$

se conocen como factores de Landé.

De esta manera, W_B es diagonal en la caja de su matriz correspondiente a los vectores $|n\ell jm_j\rangle$ con $m_j = -j, -j + 1, \dots, j$.

Conocido [20.2.10], es fácil resolver la ecuación secular [20.2.9] y obtener los desplazamientos energéticos correspondientes a cada nivel en la forma:

$$\Delta E_{n,\ell,j,m_j} = \langle n\ell jm_j | W_B | n\ell jm_j \rangle = -\frac{e\hbar B}{2m} g(\ell, s, j) m_j \quad [20.2.12]$$

La energía total será, por tanto,

$$E_{n\ell jm_j} = E_{n\ell j} + \Delta E_{n\ell jm_j} = E_{n\ell j} - \frac{e\hbar B}{2m} g(\ell, s, j) m_j \quad [20.2.13]$$

De esta forma, la energía depende de m_j y el campo magnético levanta la última degeneración que todavía permanecía en dicho número cuántico.

La frecuencia de la radiación obtenida mediante la transición entre dos niveles Zeeman será, de acuerdo con [20.2.13]:

$$\nu = \frac{E_{n'\ell'j'} - E_{n\ell j}}{h} - \frac{eB}{4\pi m} [g(\ell', s', j') m'_j - g(\ell, s, j) m_j] = \nu_0 - \frac{eB}{4\pi m} \Delta(g m_j) \quad [20.2.14]$$

donde ν_0 es la frecuencia de la transición en ausencia de campo magnético.

La regla de selección de estas transiciones es:

$$\Delta m_j = 1, 0, -1 \quad [20.2.15]$$

La ecuación [20.2.14] da cuenta del efecto Zeeman anómalo, apareciendo el efecto Zeeman normal como caso particular cuando $g' = g = 1$.

Estamos ya en condiciones de calcular el efecto Zeeman de la línea D de los átomos alcalinos al que nos hemos referido al comienzo del apartado, cuyos niveles conocemos por haber sido utilizado como ejemplo de estructura fina en el capítulo anterior. Tendremos que calcular para ello el factor de Landé de cada nivel:

$${}^2S_{1/2} \begin{cases} \ell = 0 \\ s = 1/2 \\ j = 1/2 \end{cases} \quad g = 2 \quad {}^2P_{1/2} \begin{cases} \ell = 1 \\ s = 1/2 \\ j = 1/2 \end{cases} \quad g = 2/3 \quad {}^2P_{3/2} \begin{cases} \ell = 1 \\ s = 1/2 \\ j = 3/2 \end{cases} \quad g = 4/3$$

En la transición ${}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2S_{1/2}$ (figura 20.2.(a)) el efecto Zeeman dará lugar a cuatro posibles transiciones, con desviaciones frente a la frecuencia a campo nulo dadas por [20.2.14]:

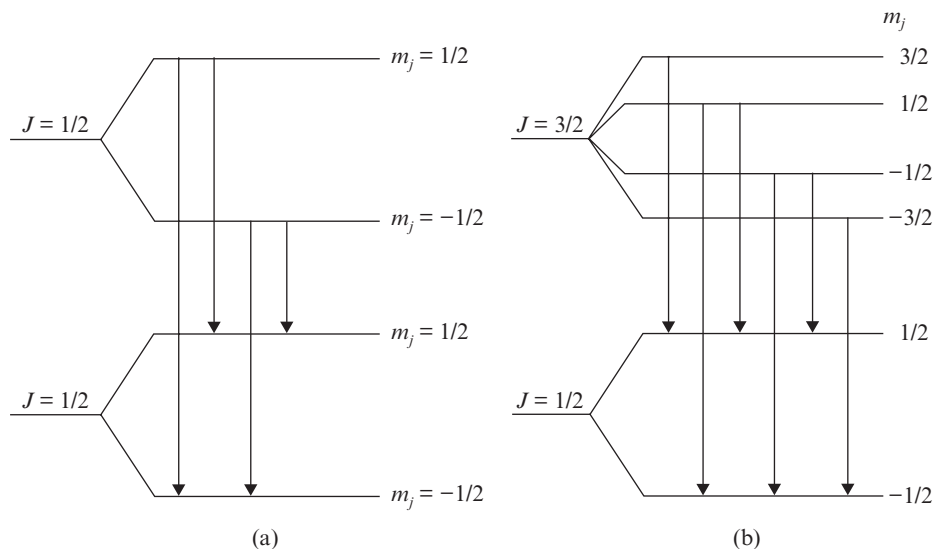


Figura 20.2. Descomposición por efecto Zeeman de los niveles del sodio: (a) línea D_1 , y (b) línea D_2 .

$$\Delta v_1 = \left(\frac{2}{3} \times \frac{1}{2} - 2 \times \frac{1}{2} \right) \left(-\frac{eB}{4\pi m} \right) = \frac{eB}{6\pi m}$$

$$\Delta v_2 = \left[\frac{2}{3} \times \frac{1}{2} - 2 \times \left(-\frac{1}{2} \right) \right] \left(-\frac{eB}{4\pi m} \right) = -\frac{eB}{3\pi m}$$

$$\Delta v_3 = \left[\frac{2}{3} \times \left(-\frac{1}{2} \right) - 2 \times \frac{1}{2} \right] \left(-\frac{eB}{4\pi m} \right) = \frac{eB}{3\pi m}$$

$$\Delta v_4 = \left[\frac{2}{3} \times \left(-\frac{1}{2} \right) - 2 \times \left(-\frac{1}{2} \right) \right] \left(-\frac{eB}{4\pi m} \right) = -\frac{eB}{6\pi m}$$

y de manera análoga se obtendría el correspondiente a la otra línea del doblete (figura 20.2.(b)). También citamos al comienzo de este apartado el caso del cadmio como típico del efecto Zeeman normal; no estamos todavía en condiciones de abordar su cálculo, ya que tiene más de un electrón en la última capa, pero el lector lo puede calcular una vez que haya estudiado el capítulo 23.

Quisiéramos, por último, resaltar que estos resultados se pueden obtener de una manera menos rigurosa tratando a los momentos como vectores (modelo vectorial). El problema que se plantea en el efecto Zeeman procede del hecho de que el momento magnético total \mathbf{M} tiene distinta dirección, desde un punto de vista clásico, que el momento cinético total \mathbf{J} como consecuencia de la expresión [20.2.3] (figura 20.3):

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_L + \mathbf{M}_S = \frac{e}{2m} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) = \frac{e}{2m} (\mathbf{J} + \mathbf{S})$$

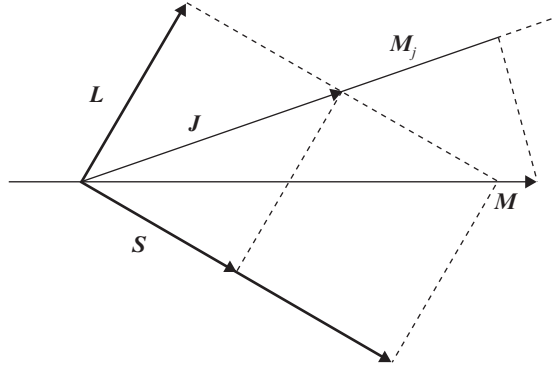


Figura 20.3. Modelo vectorial.

Ahora bien, desde un sistema de referencia externo, el eje de giro del sistema será paralelo a \mathbf{J} y, por tanto, en esta precesión, la componente de \mathbf{M} perpendicular a \mathbf{J} será nula en promedio. En definitiva, el sistema se comportará como si su momento magnético fuese la proyección de \mathbf{M} sobre \mathbf{J} :

$$\mathbf{M}_J = \frac{\mathbf{M} \times \mathbf{J}}{J^2} \mathbf{J} = \frac{e}{2mJ^2} (J^2 + \mathbf{J} \times \mathbf{S}) \mathbf{J} = \frac{e}{2m} \left(1 + \frac{\mathbf{J} \times \mathbf{S}}{J^2} \right) \mathbf{J} \quad [20.2.16]$$

donde el segundo sumando es la proyección de \mathbf{S} sobre \mathbf{J} :

$$\mathbf{S}_J = \frac{\mathbf{J} \times \mathbf{S}}{J^2} \mathbf{J}$$

Pero, al ser $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$:

$$\mathbf{S} \times \mathbf{J} = \frac{1}{2} (J^2 + S^2 - L^2)$$

que, sustituida en [20.2.16], da:

$$\mathbf{M}_J = \frac{e}{2m} \left(1 + \frac{J^2 + S^2 - L^2}{2J^2} \right) \mathbf{J}_z$$

La energía magnética en el campo \mathbf{B} sería:

$$E_B = -\mathbf{M}_J \times \mathbf{B} = -\frac{eB}{2m} \left(1 + \frac{J^2 + S^2 - L^2}{2J^2} \right) J_z$$

El paso a la expresión cuántica se haría substituyendo las magnitudes por sus correspondientes autovalores:

$$J^2 \rightarrow j(j+1)\hbar^2$$

$$L^2 \rightarrow \ell(\ell+1)\hbar^2$$

$$S^2 \rightarrow s(s+1)\hbar^2$$

$$J_z \rightarrow m_j\hbar$$

quedando:

$$\Delta E_{n\ell m_j} = -\frac{eB\hbar}{2m} g(\ell, s, j)m_j$$

expresión idéntica a la [20.2.12] con el factor de Landé:

$$g(\ell, s, j) = 1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

que coincide con [20.2.11].

20.3. EL EFECTO STARK

Análogamente a lo que ocurre con el campo magnético, cuando sobre un átomo actúa un campo eléctrico constante, ε , también se observan variaciones en la forma de su espectro. Como ya hemos indicado, este fenómeno fue primeramente observado por Stark, quien puso en evidencia la descomposición de las líneas de la serie de Balmer del espectro del átomo de hidrógeno bajo la acción de un campo eléctrico.

El estudio cuántico del efecto Stark sólo es posible abordarlo a este nivel en los átomos hidrogenoides, para lo cual habrá que considerar la energía del electrón en el campo exterior:

$$E_\varepsilon = e\boldsymbol{\varepsilon} \times \mathbf{r} = e\varepsilon z \quad [20.3.1]$$

en donde hemos tomado como eje z la dirección del campo eléctrico aplicado. La energía dada por [20.3.1] deberá añadirse al hamiltoniano en ausencia de campo y tratarla como una perturbación. Para ilustrar el problema vamos a considerar el átomo de hidrógeno sin correcciones, en cuyo caso el hamiltoniano no perturbado será:

$$H^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad [20.3.2]$$

cuyas funciones propias denotaremos por $\phi_{n\ell m}(\mathbf{r})$:

$$H^0 \phi_{n\ell m}(\mathbf{r}) = E_n^{(0)} \phi_{n\ell m}(\mathbf{r})$$

El estado fundamental ϕ_{100} es no degenerado, con lo que el desplazamiento en energía que sufre por efecto del campo será, en el primer orden del desarrollo perturbativo:

$$\Delta E_{100}^{(1)} = e\mathcal{E} \langle \phi_{100} | z | \phi_{100} \rangle = e\mathcal{E} \int |\phi_{100}(\mathbf{r})|^2 z \, d\mathbf{r} \quad [20.3.3]$$

La integral que aparece en [20.3.3] es nula debido a que su integrando es el producto de $|\phi_{100}(\mathbf{r})|^2$ (función par) por z , que es impar bajo reflexiones. Por tanto, para el estado fundamental no hay cambio de energía en el primer orden de desarrollo en teoría de perturbaciones.

Clásicamente, cuando un sistema posee un momento dipolar eléctrico permanente, \mathbf{p} , interacciona con un campo \mathbf{E} con una energía de interacción $-\mathbf{p}\mathbf{E}$; así, el hecho de que un átomo en su estado fundamental no modifique su energía en la interacción con el campo aplicado puede interpretarse en el sentido de que en ese estado el átomo no presenta momento dipolar permanente, lo cual puede generalizarse a los demás estados no degenerados. Sin embargo, existen moléculas que poseen estados fundamentales con momentos dipolares permanentes, aunque en sentido estricto no puede decirse que sean no degenerados.

Al ser nulo [20.3.3] deberemos acudir al segundo orden del desarrollo perturbativo:

$$\Delta E_{100}^{(2)} = e^2 \mathcal{E}^2 \sum_{n\ell m} \frac{|\langle \phi_{n\ell m} | z | \phi_{100} \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad [20.3.4]$$

Los elementos de matriz que aparecen en [20.3.4] pueden obtenerse explicitando las funciones de onda del átomo de hidrógeno y calculando la integral:

$$\langle \phi_{n\ell m} | z | \phi_{100} \rangle = \int R_{n\ell m}(r) (Y_\ell^m)^*(\theta, \varphi) r \cos \theta R_{100}(r) Y_0^0(\theta, \varphi) \, dr \quad [20.3.5]$$

en la que hemos sustituido z por $r \cos \theta$, como corresponde a las coordenadas esféricas.

No vamos a calcular las integrales [20.3.5], simplemente pondremos el resultado de la corrección de energía de segundo orden:

$$\Delta E_{100}^{(2)} = 2a_0^3 \mathcal{E}^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{n^2 f(n)}{n^2 - 1} \quad [20.3.6]$$

donde:

$$f(n) = \frac{1}{3} \frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}} a_0^2$$

En [20.3.6] se puede apreciar que el desdoblamiento del estado fundamental del átomo de hidrógeno por efecto Stark es proporcional al cuadrado del campo, por ello, se conoce como efecto Stark cuadrático.

Aunque en primer orden de perturbación el estado fundamental del átomo de hidrógeno no se desplace por efecto Stark, sí lo hacen algunos estados excitados. Así, por ejemplo, para $n = 2$, en la aproximación que estamos considerando [20.3.2] hay cuatro estados degenerados con la misma energía que corresponden a las siguientes funciones de onda:

$$\begin{aligned}
 \phi_{200} &= \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} 2\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_0^0 \\
 \phi_{210} &= \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_1^0 \\
 \phi_{211} &= \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_1^1 \\
 \phi_{21-1} &= \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_1^{-1}
 \end{aligned}
 \tag{20.3.7}$$

Al igual que vimos en el caso del efecto Zeeman, el hamiltoniano perturbador no será diagonal para las funciones de onda [20.3.7]. Para obtener los correspondientes desplazamientos de energía por efecto de la interacción deberemos resolver la ecuación secular:

$$\begin{vmatrix}
 \langle 200|e\mathcal{E}z|200\rangle - \Delta E & \langle 200|e\mathcal{E}z|210\rangle & \langle 200|e\mathcal{E}z|211\rangle & \langle 200|e\mathcal{E}z|21-1\rangle \\
 \langle 210|e\mathcal{E}z|200\rangle & \langle 210|e\mathcal{E}z|210\rangle - \Delta E & \langle 210|e\mathcal{E}z|211\rangle & \langle 210|e\mathcal{E}z|21-1\rangle \\
 \langle 211|e\mathcal{E}z|200\rangle & \langle 211|e\mathcal{E}z|210\rangle & \langle 211|e\mathcal{E}z|211\rangle - \Delta E & \langle 211|e\mathcal{E}z|21-1\rangle \\
 \langle 21-1|e\mathcal{E}z|200\rangle & \langle 21-1|e\mathcal{E}z|210\rangle & \langle 21-1|e\mathcal{E}z|211\rangle & \langle 21-1|e\mathcal{E}z|21-1\rangle - \Delta E
 \end{vmatrix} = 0
 \tag{20.3.8}$$

Ahora bien, el hamiltoniano perturbador es, en definitiva, z , con lo cual, como:

$$[L_z, z] = 0$$

solamente aquellos elementos de matriz del determinante secular [20.3.8] en los que ambas funciones tengan el mismo valor de m serán no nulos.

Por otro lado, los estados de $\ell = 0$ tienen paridad par y los de $\ell = 1$ impar, con lo que solamente los elementos de matriz de z entre estados de diferente paridad (diferente valor de ℓ en definitiva) serán también no nulos.

Por tanto, teniendo en cuenta los razonamientos anteriores, el determinante secular se simplifica mucho:

$$\begin{vmatrix} -\Delta E & \langle 200|e\mathcal{E}z|210\rangle & 0 & 0 \\ \langle 210|e\mathcal{E}z|200\rangle & -\Delta E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta E \end{vmatrix} = 0$$

es decir, los estados ϕ_{211} y ϕ_{21-1} continúan siendo autoestados y:

$$\Delta E_{211} = \Delta E_{21-1} = 0$$

de esta manera los estados con $m = 1$ y $m = -1$ continúan estando degenerados y sin desplazarse después de la interacción con el campo eléctrico por efecto Stark.

No ocurre lo mismo con los otros dos estados, ya que si haciendo uso de [20.3.7] calculamos los elementos de matriz no nulos del determinante secular, obtenemos:

$$\langle 200|z|210\rangle = \langle 210|z|200\rangle = -3a_0$$

con lo que una vez resuelta la ecuación secular y obtenidos los correspondientes nuevos autoestados:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{200} - \phi_{210}) &\rightarrow \Delta E = 3e\mathcal{E}a_0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{200} + \phi_{210}) &\rightarrow \Delta E = 3e\mathcal{E}a_0 \end{aligned} \quad [20.3.9]$$

y el esquema de niveles queda como el de la figura 20.4.

En [20.3.9] se puede ver que ahora los desplazamientos son proporcionales al campo (efecto Stark lineal).

En resumen, el efecto del campo eléctrico exterior es, en este caso, producir un desdoblamiento en los niveles del átomo, cuya energía, despreciando la interacción espín-órbita, dependía solamente del número cuántico principal n y, por tanto, el efecto Stark levanta, al igual que el Zeeman, esta degeneración.

El efecto Stark para los átomos polieletrónicos es diferente del que hemos desarrollado para el átomo de hidrógeno, lo cual es comprensible, pues, como veremos más adelante, en ellos la degeneración a la que nos hemos referido está levantada por el hecho de haber más de un electrón. La teoría cuántica del efecto Stark para átomos complejos fue desarrollada por Unsold en 1927, obteniendo un desplazamiento proporcional al cuadrado del campo en este caso.

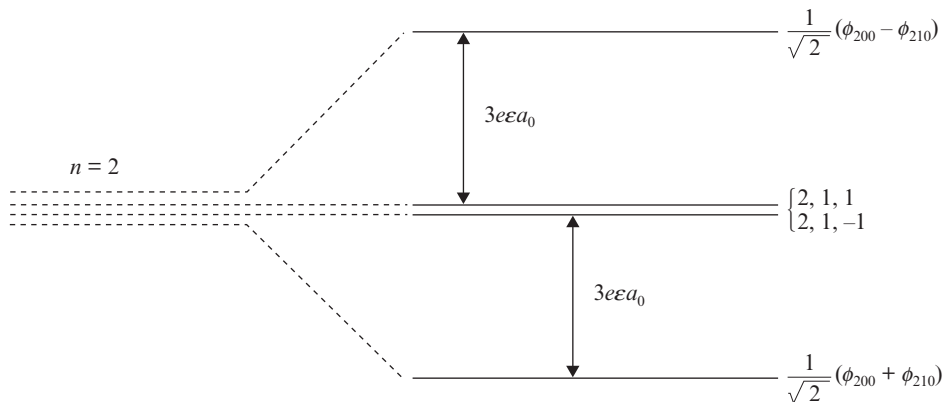


Figura 20.4. Descomposición por efecto Stark del estado $n = 2$ del átomo de hidrógeno.

EJERCICIOS

20.1. Deducir la fórmula de Landé:

$$\langle jm|A|jm\rangle = \frac{\langle jm|A \times J|jm\rangle}{j(j+1)} \langle jm|J|jm\rangle$$

donde A es un operador vectorial.

20.2. Deducir la misma fórmula de Landé del ejercicio anterior en su versión clásica haciendo uso del modelo vectorial.

20.3. Haciendo uso del resultado del problema 20.1, encontrar la expresión del factor de Landé [20.2.11].

20.4. Encontrar el número de estados de diferente energía que aparecen al desdoblarse por efecto Stark el nivel $n = 3$ del átomo de hidrógeno.

20.5. Encontrar el desdoblamiento Zeeman de la línea:

$$J = 3 \quad , \quad J = 2$$

21

Absorción y emisión de luz por los átomos

José Luis Escudero
José Manuel Guerra

21.1. INTRODUCCIÓN

Cuando la luz atraviesa un medio material, tanto una como el otro modifican sus propiedades como consecuencia de una interacción mutua entre ellos. De hecho, al comportarse la luz de manera distinta en diferentes materiales, del estudio de su comportamiento se pueden inducir características propias de los mismos. Ya hemos visto, por ejemplo, cómo del análisis del espectro del hidrógeno han surgido las teorías atómicas que han permitido comprender la estructura de los átomos.

En la transmisión de la luz a través de la materia, sus propiedades (intensidad, longitud de onda, polarización, etc.) pueden verse afectadas por fenómenos como la dispersión, la absorción, la emisión, etc., de la luz por parte de las partículas que componen el medio. La manera en la que las propiedades de la luz pueden verse afectadas por estos fenómenos dependen de unos parámetros que caracterizan ópticamente a cada medio material. Para relacionar estos parámetros con los de la luz es necesaria una teoría que describa la luz, la materia y la interacción entre ambas.

Una parte importante de los fenómenos de interacción luz-materia se puede explicar adecuadamente considerando a la materia como un conjunto de osciladores cargados y a la luz como una onda electromagnética, estando sus interacciones regidas por las ecuaciones de Maxwell. Esta descripción se conoce como teoría clásica cuando tanto la materia como la onda se tratan clásicamente. Sin embargo, el estudio de algunos fenómenos requiere la cuantificación de la materia, en cuyo caso se habla de la teoría semiclásica, y cuando tanto la materia como la radiación se describen cuánticamente, la teoría se refiere como completamente cuántica.

Nuestra intención en este capítulo es analizar los resultados más importantes que aparecen como consecuencia de la interacción básica de la luz con sistemas atómicos, dejando para más adelante las modificaciones necesarias para tener en cuenta que en la materia los átomos aparecen asociados: moléculas, sólidos, etc. En todo caso nos limitaremos a dar una reseña de la teoría clásica de la interacción radiación materia y, puesto que ya hemos sentado las bases de la teoría cuántica de los átomos, desarrollaremos también la teoría semiclásica.

21.2. RESUMEN DE LA TEORÍA CLÁSICA DE LA INTERACCIÓN RADIACIÓN-MATERIA

En la teoría clásica, desarrollada por Lorentz alrededor de 1900, se supone a la materia formada por distribuciones dinámicas de cargas positivas y negativas, cuya forma particular discutiremos posteriormente. El movimiento de las cargas genera en todo el espacio un campo eléctrico y otro magnético variables que son los que constituyen la radiación. Una vez que se conoce la distribución de cargas y sus movimientos, la expresión matemática del campo electromagnético se obtiene como solución de las ecuaciones de Maxwell, las cuales, en el vacío, tienen la forma:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{D} &= \rho & \nabla \cdot \mathbf{D} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} & \nabla \times \mathbf{E} &= \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \\ \mathbf{D} &= \epsilon_0 \mathbf{E} & \mathbf{B} &= \mu_0 \mathbf{H} \end{aligned} \quad [21.2.1]$$

Aunque no es éste el lugar para discutir estas ecuaciones, digamos que fueron introducidas por Maxwell en 1867, y que, escritas como en [21.2.1], son la forma diferencial de cuatro importantes leyes de la electricidad y el magnetismo.

Manipulando las ecuaciones de Maxwell se pueden obtener otras dos que describen el comportamiento espacio-temporal de los campos eléctrico y magnético en ausencia de cargas y corrientes:

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad \nabla^2 \mathbf{H} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \quad [21.2.2]$$

Las ecuaciones [21.2.2] son ecuaciones de ondas, con lo que se concluye que los campos electromagnéticos que constituyen la radiación, al ser soluciones de las ecuaciones de Maxwell y, por tanto, de [21.2.2], se comportarán como ondas que se propagan a la velocidad $1/(\epsilon_0 \mu_0)^{1/2}$, por lo que en teoría clásica la radiación se describe como una onda electromagnética.

Por otro lado, cuando en su propagación el campo electromagnético alcanza una zona del espacio en la que hay una densidad ρ de carga eléctrica, el campo eléctrico y el magnético que lo componen ejercen sobre ellas una densidad de fuerza:

$$\mathbf{f} = \rho(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad [21.2.3]$$

con lo cual las cargas modificarán su estado de movimiento y, a su vez, generarán nueva radiación.

Haciendo uso de las ecuaciones de Maxwell [21.2.1], de la fuerza de Lorentz [21.2.3] y de las leyes del movimiento de Newton, la teoría clásica puede abordar los diferentes

procesos de interacción radiación-materia; para ello, sin embargo, es necesario resolver las ecuaciones de Maxwell con las condiciones de contorno adecuadas a cada caso, lo cual no siempre es una tarea fácil.

Una forma de resolver las ecuaciones de Maxwell es definir dos potenciales ϕ y A , tales que:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad [21.2.4]$$

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad [21.2.5]$$

que pueden ser obtenidos en la forma (véase figura 21.1)

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}', t')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \quad [21.2.6]$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}', t')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \quad [21.2.7]$$

con

$$t' = t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c} \quad [21.2.8]$$

cuando

$$\nabla \times \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad [21.2.9]$$

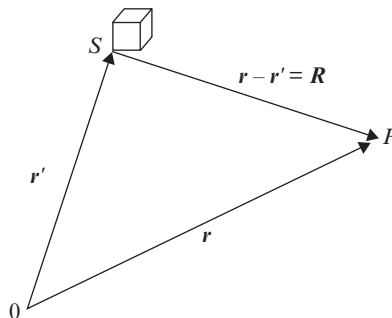


Figura 21.1. Vectores de posición del elemento de carga y del punto de observación.

La condición [21.2.9] se conoce como condición de gauge de Lorentz y deja una cierta libertad de elección de los potenciales A y ϕ que no discutiremos aquí.

Debido a la forma particular de depender del tiempo [21.2.8] que tienen los potenciales [21.2.6] y [21.2.7], éstos se conocen como potenciales retardados, ya que para obtenerlos en el punto r y en el instante t es preciso conocer la situación dinámica de la distribución de carga que los genera en un instante anterior, lo cual no es más que una manifestación de la velocidad finita de propagación de la onda electromagnética.

Una vez conocidos los potenciales ϕ y A , mediante las expresiones [21.2.4] y [21.2.5] se pueden obtener los campos E y B que componen la onda electromagnética. Ahora bien, para calcular ϕ y A haciendo uso de [21.2.6] y [21.2.7] es necesario conocer las densidades de carga y de corriente que los generan, es decir, hay que hacer alguna hipótesis acerca de la estructura microscópica de la materia. En tiempos de Lorentz se dedicó gran esfuerzo a buscar distribuciones de carga y corriente que describiesen de la mejor manera posible a los medios materiales dando cuenta de sus propiedades. Hoy en día sabemos que la teoría cuántica es la que permite efectuar esta descripción de la forma más precisa y también que la mayor parte de los resultados que se obtienen de la teoría clásica de la interacción radiación materia dependen poco de la forma exacta del modelo material que se utilice debido a las altas frecuencias de la radiación luminosa. Por ello, para ilustrar los resultados más importantes de esta teoría haremos uso del modelo más simple, sin preocuparnos demasiado de que no se adecúe a lo que conocemos en la actualidad.

Supondremos entonces que la materia está formada por átomos, a veces aislados y otras formando parte de moléculas, que a su vez pueden agruparse en entes más complicados. Nos limitaremos aquí a considerar el caso de un átomo aislado, el cual contendrá un núcleo pesado de carga positiva $|Ze|$ y Z electrones negativamente cargados. En el estado de mínima energía se supondrá que tanto el núcleo como los electrones están en reposo ocupando un volumen de dimensiones lineales del orden de 10^{-13} cm. Si, por efecto de un agente exterior, una colisión, por ejemplo, se produce la excitación del átomo, uno o más electrones son desplazados de sus posiciones de equilibrio siguiendo movimientos cuya expresión puede obtenerse con la segunda ley de Newton haciendo uso de las fuerzas de interacción entre cargas eléctricas. Si como fuerzas de interacción se consideran únicamente las eléctricas dadas por la ley de Coulomb, las propiedades de la radiación que genera el movimiento de cargas resultante no coinciden con las que se obtienen de la experiencia, por lo que Lorentz postuló que, además de estas fuerzas eléctricas, deberían existir otras, de carácter no eléctrico, que sumadas a las anteriores dieran como resultado que en cada instante el electrón excitado esté sometido a una fuerza total elástica ($-ks$) dirigida hacia el núcleo. Como consecuencia, cada electrón ejecutará un movimiento oscilatorio (en general elíptico) independiente del de los demás, y la fuerza sobre el núcleo será la resultante de las reacciones de las que actúan sobre los electrones; pero como su masa es mucho mayor que la de ellos, permanecerá en reposo. Para ser exactos, en la teoría de Lorentz, a esta fuerza de carácter elástico que actúa sobre cada electrón se debe añadir una pequeña corrección que se conoce como fuerza de reacción de la radiación; a pesar de ello, el movimiento de cada electrón continúa siendo independiente del de los demás.

Las expresiones [21.2.6] y [21.2.7] de los potenciales están pensadas para obtener éstos en el caso de que sean creados por distribuciones continuas de carga y corriente; sin embargo, en el modelo atómico que estamos considerando, cada electrón aparece como una carga individual que ejecuta un cierto movimiento cuando se la separa de la posición de

equilibrio. Liénard y Wiechert calcularon, hacia 1900, el límite de los potenciales retardados cuando son generados por una carga puntual e que se mueve a velocidad \mathbf{v} :

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{e}{R - \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{R}}{c}} \right]_{t - \frac{R}{c}} \quad [21.2.10]$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{e\mathbf{v}}{R - \frac{\mathbf{R} \times \mathbf{v}}{c}} \right]_{t - \frac{R}{c}} \quad [21.2.11]$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$$

donde los paréntesis cuadrados indican que \mathbf{R} y \mathbf{v} han de ser evaluados en el tiempo retardado $t - R/c$.

Si consideramos un átomo en el cual uno de sus electrones ejecuta un movimiento cuya velocidad es, en todo caso, pequeña frente a c y que siempre está en las proximidades del núcleo, no se cometerá un gran error si los potenciales se desarrollan en potencias de s/R y v/c , siendo s la distancia del electrón al núcleo (véase figura 21.2), y nos quedamos con el primer término del desarrollo (aproximación dipolar eléctrica). Las expresiones de los campos obtenidos después de efectuar estas aproximaciones son:

$$\mathbf{E} = \frac{e}{4\pi\epsilon} \left\{ \left[\left(\frac{2s}{R^3} + \frac{2}{cR^2} \frac{ds}{dt} \right) \times \hat{\mathbf{R}} \right] \hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{R}} \times \left[\hat{\mathbf{R}} \times \left(\frac{s}{R^3} + \frac{1}{cR^2} \frac{ds}{dt} + \frac{1}{c^2R} \frac{d^2s}{dt^2} \right) \right] \right\}_{t - \frac{R}{c}} \quad [21.2.12]$$

$$\mathbf{B} = -\frac{\mu_0 c}{4\pi} e \hat{\mathbf{R}} \times \left(\frac{1}{cR^2} \frac{ds}{dt} + \frac{1}{c^2R} \frac{d^2s}{dt^2} \right)_{t - \frac{R}{c}} ; \quad \hat{\mathbf{R}} = \frac{\mathbf{R}}{|\mathbf{R}|} \quad [21.2.13]$$

El electrón sometido a la fuerza elástica de Lorentz ejecutará un movimiento armónico, en general tridimensional, pero si, por simplicidad, suponemos que es lineal, de amplitud s_0 y de frecuencia ω , tomando la dirección de oscilación como eje z (véase figura 21.2), los campos creados por dicho oscilador son:

$$E_r = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} s_0 k^3 \cos \theta \left[\frac{2}{(kR)^3} - \frac{2i}{(kR)^2} \right] e^{i(k \times R - \omega t)}$$

$$E_\theta = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} s_0 k^3 \sin \theta \left[\frac{1}{(kR)^3} - \frac{i}{(kR)^2} - \frac{1}{kR} \right] e^{i(k \times R - \omega t)} \quad [21.2.14]$$

$$E_\phi = 0 \quad B_r = 0 \quad B_\theta = 0$$

$$B_\phi = -\frac{\mu_0 c}{4\pi} e s_0 k^3 \sin \theta \left[\frac{1}{(kR)^2} + \frac{1}{kR} \right] e^{i(k \times R - \omega t)}$$

siendo $k = \omega/c$.

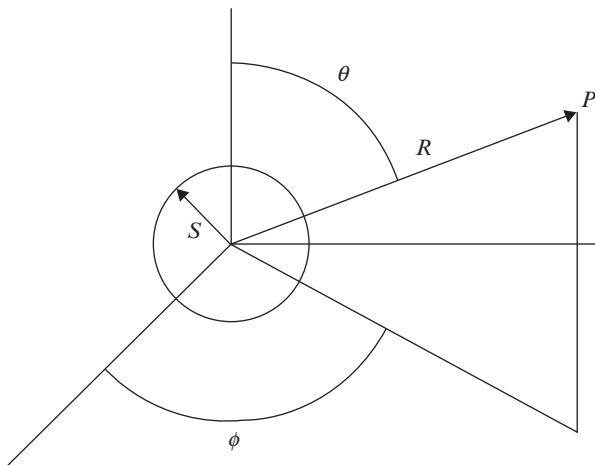


Figura 21.2. Coordenadas para el cálculo de los campos creados por una carga que ejecuta un movimiento oscilatorio tridimensional.

A largas distancias (zona de ondas) predominan los términos en $1/R$, que son los que habitualmente se detectan a frecuencias ópticas, ya que, como puede apreciarse en la figura 21.3, a distancias del orden de pocas longitudes de onda ya el término E_r , que no contiene contribución, en $1/R$ es prácticamente nulo. A estas distancias el campo eléctrico y el magnético generados por el oscilador lineal cargado son, por tanto, de [21.2.14]:

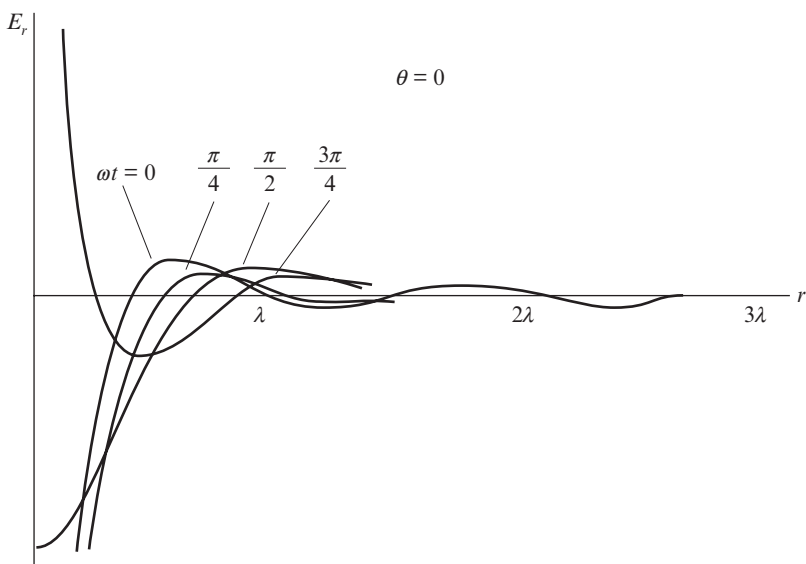


Figura 21.3. Zona de ondas.

$$E_{\theta} = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{s_0 k^2 \sin\theta}{R} e^{i(k \times R - \omega t)}$$

$$B_{\phi} = \frac{E_{\theta}}{c}$$

$$E_r = E_{\phi} = B_r = B_{\theta} = 0$$
[21.2.15]

es decir, \mathbf{E} , \mathbf{B} y la dirección de observación forman un triedro trirectángulo (campo electromagnético transversal).

Con los campos [21.2.15] se puede calcular el promedio temporal del vector de Poynting, cuyo módulo nos dará la potencia que en media atraviesa la unidad de superficie perpendicular a la dirección de propagación de la onda electromagnética:

$$\mathbf{N} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$$

obteniéndose:

$$|\mathbf{N}| = \frac{\omega^4 e^2 s_0^2}{(4\pi)^2 \epsilon_0 c^3 R^2} \widehat{\text{sen}}^2(\widehat{\mathbf{R}}, \widehat{\mathbf{s}}_0)$$
[21.2.16]

que nos dará la distribución de la intensidad emitida por el oscilador lineal, la cual se representa en un diagrama polar en la figura 21.4.

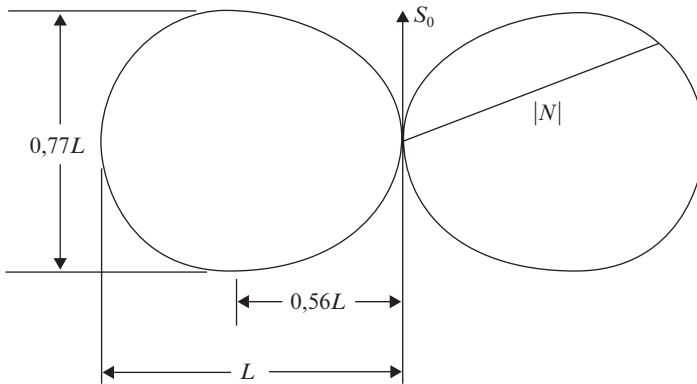


Figura 21.4. Diagrama polar de emisión de un oscilador lineal.

La potencia emitida en todas las direcciones se obtendrá integrando [21.2.16] sobre una esfera de centro en el átomo:

$$P = \frac{e^2 \omega^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} s_0^2$$
[21.2.17]

En el cálculo que hemos efectuado se ha considerado que el electrón se encontraba ejecutando un movimiento armónico sometido únicamente a la fuerza elástica que lo mantiene unido al núcleo. La radiación emitida en estas condiciones se conoce como emisión espontánea. Si, además de la fuerza elástica, existiese un campo electromagnético periódico exterior que actuase sobre el electrón, éste estaría también sometido a la correspondiente fuerza periódica y su movimiento sería el de un oscilador forzado. La radiación que emitiría en este caso se obtendría de [21.2.12] y [21.2.13], especificando el correspondiente movimiento. En todo caso, la energía emitida en forma de radiación se simula por una fuerza amortiguadora (reacción de la radiación) que frena el movimiento, lo cual no hemos considerado en estos razonamientos.

21.3. TEORÍA SEMICLÁSICA DE LA INTERACCIÓN RADIACIÓN-MATERIA

En la teoría clásica aparecen claramente separadas la absorción, la emisión espontánea y la estimulada, la primera como consecuencia de la acción de la fuerza de Lorentz sobre la carga, modificando su estado de movimiento y las emisiones, respectivamente, como resultado de oscilaciones libres o forzadas. En la teoría semiclásica, la materia se describe mediante funciones de onda estacionarias y, como consecuencia de la interacción entre un átomo y un campo electromagnético, aquél puede cambiar de estado, pasando a ser descrito por otra combinación de funciones de onda estacionarias, con lo que se pueden describir los fenómenos de absorción y emisión estimuladas. Pero la emisión espontánea no aparece como resultado de la teoría, ya que como el campo se describe clásicamente, en ausencia de radiación no hay interacción capaz de producir la transición. Como consecuencia, la emisión espontánea ha de introducirse *ad hoc*. En la interpretación probabilística de la mecánica cuántica, el sistema posee una cierta probabilidad de efectuar una transición debido a su interacción con la radiación y lo único que la teoría podrá predecir es el valor de esta probabilidad.

En la teoría semiclásica los átomos se describen cuánticamente, es decir, su función de ondas ha de ser una de las autofunciones del hamiltoniano atómico:

$$H_0 \phi_n(\mathbf{r}) = E_n \phi_n(\mathbf{r}) \quad [21.3.1]$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

La radiación, sin embargo, se trata clásicamente como una onda electromagnética, es decir, si considerarnos una onda linealmente polarizada de vector de ondas \mathbf{k} , el campo eléctrico en la posición del electrón vendrá descrito, salvo factores de fase constante¹ (véase figura 21.5), por:

¹ Realmente, en notación compleja, el campo en la posición del electrón sería:

$$e^{i\mathbf{k} \times \mathbf{R}} = e^{i\mathbf{k} \times \mathbf{R}_0} \times e^{i\mathbf{k} \times \mathbf{r}}$$

pero $e^{i\mathbf{k} \times \mathbf{R}_0}$ no aporta más que una fase constante y prescindiremos de él.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \cos(\mathbf{k} \times \mathbf{r} - \omega_0 t) \quad [21.3.2]$$

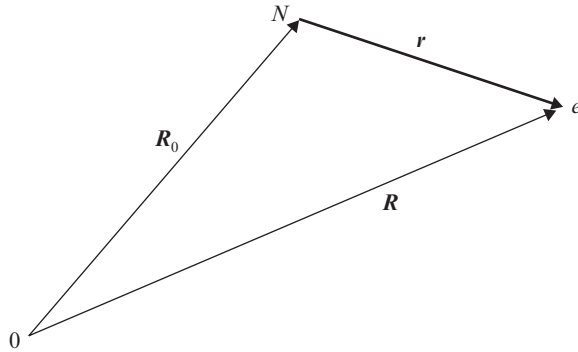


Figura 21.5. Vectores de posición en el átomo.

Si suponemos que este campo eléctrico interactúa con un átomo que posee un único electrón, la energía de interacción es:

$$H_1 = e\mathbf{r} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad [21.3.3]$$

De esta manera, la función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$ que describirá al átomo perturbado por la radiación incidente será solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = H\psi \quad [21.3.4]$$

donde $H = H_0 + H_1$.

Para resolver la ecuación [21.3.4] vamos a probar soluciones de la forma:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) \phi_n(\mathbf{r}) e^{-i(E_n/\hbar)t} \quad [21.3.5]$$

siendo los $a_n(t)$ coeficientes a determinar.

Si en el instante $t = 0$ en el que comienza la interacción el átomo se encuentra en el estado ϕ_i , entonces $a_i(0) = 1$ y $a_{n \neq i}(0) = 0$. Sustituyendo [21.3.5] en la ecuación de Schrödinger [21.3.4], tendremos:

$$\sum_n (i\hbar \dot{a}_n + E_n a_n) \phi_n e^{-i(E_n/\hbar)t} = (H_0 + H_1) \sum_n a_n \phi_n e^{-i(E_n/\hbar)t} \quad [21.3.6]$$

donde hemos llamado:

$$\dot{a}_n = \frac{da_n}{dt}$$

[21.3.6] se convierte en:

$$\sum_n i\hbar \dot{a}_n \phi_n e^{-i(E_n/\hbar)} = \sum_n a_n H_1 \phi_n e^{-i(E_n/\hbar)} \quad [21.3.7]$$

si se tiene en cuenta [21.3.1].

Si se supone que el campo de radiación es suficientemente débil como para que las amplitudes de probabilidad $a_n(t)$ no cambien significativamente con el tiempo, podemos aproximar [21.3.7] poniendo en el término de la derecha sus valores iniciales:

$$a_i(0) = 1 \quad a_{n \neq i}(0) = 0$$

con lo que:

$$\sum_n i\hbar \dot{a}_n \phi_n e^{-i(E_n/\hbar)} = H_1 \phi_i e^{-i(E_i/\hbar)} \quad [21.3.8]$$

multiplicando [21.3.8] por $\phi_k^* e^{-i(E_k/\hbar)}$ e integrando a todo el espacio:

$$i\hbar \dot{a}_k = \int \phi_k^* H_1 \phi_i e^{i(E_k - E_i)t/\hbar} d\mathbf{r} \quad [21.3.9]$$

El campo eléctrico [21.3.2] se puede escribir en la forma:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{E_0}{2} [e^{i(k \times \mathbf{r} - \omega t)} + e^{-i(k \times \mathbf{r} - \omega t)}] \quad [21.3.10]$$

con lo que, poniendo en [21.3.9] la forma explícita del campo y haciendo uso de [21.3.3]:

$$i\hbar \dot{a}_k(t) = \frac{1}{2} \langle k | \mathbf{e} \mathbf{r} \times \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k} \times \mathbf{r}} | i \rangle e^{i(\omega_{ki} - \omega)t} + \frac{1}{2} \langle k | \mathbf{e} \mathbf{r} \times \mathbf{E}_0 e^{-i\mathbf{k} \times \mathbf{r}} | i \rangle e^{i(\omega_{ki} - \omega)t} \quad [21.3.11]$$

donde, por comodidad, hemos usado:

$$\int \phi_k^* H_1 \phi_i d\mathbf{r} = \langle k | H_1 | i \rangle$$

y hemos llamado:

$$\omega_{ki} = \frac{E_k - E_i}{\hbar} = \omega_k - \omega_i \quad [21.3.12]$$

Para obtener la amplitud de probabilidad a_k , hay que integrar [21.3.11] en el tiempo. Al efectuar esta integración, por efecto del término exponencial, el primer sumando que-

dará multiplicado por un factor $1/(\omega_{ki} - \omega)$ y el segundo por $1/(\omega_{ki} + \omega)$. A frecuencias ópticas $\omega_{ki} + \omega$ toma un valor muy elevado ($\omega \gg 1$), y si $\omega \approx \omega_{ki}$, el segundo sumando es despreciable (aproximación de la onda rotante). En esta aproximación:

$$a_k(t) = \frac{1}{2} e\langle k|\mathbf{r} \times \mathbf{E}_0 e^{ik \cdot \mathbf{r}}|i\rangle \left[\frac{1 - e^{i(\omega_{ki} - \omega)t}}{\hbar(\omega_{ki} - \omega)} \right] \quad [21.3.13]$$

Por tanto, la probabilidad de encontrar al átomo en el estado ϕ_k en el instante t será:

$$|a_k(t)|^2 = \frac{e^2}{4\hbar^2} |\langle k|\mathbf{r} \times \mathbf{E}_0 e^{ik \cdot \mathbf{r}}|i\rangle|^2 \frac{\text{sen}^2 \{(\omega_{ki} - \omega)t/2\}}{[(\omega_{ki} - \omega)/2]^2} \quad [21.3.14]$$

Para ilustrar el problema vamos a suponer que el sistema atómico tuviese únicamente dos estados de energía no degenerados ϕ_2 y ϕ_1 con energías $E_2 > E_1$, $\omega_{21} = \omega_2 - \omega_1$ (figura 21.6), y que en el instante inicial:

$$a_2(0) = 0 \quad \text{y} \quad a_1(0) = 1$$

con lo que [21.3.14] describirá $|a_2(t)|^2$, que nos dará la probabilidad de encontrar el sistema en el estado de mayor energía en cada instante, habiendo partido del de energía menor. Si $|a_2(t)|^2 \neq 0$, el átomo gana energía y, por tanto, la pierde la radiación; por ello $|a_2(t)|^2$ se conoce como la probabilidad de absorción estimulada (inducida) de radiación.

En la figura 21.7 se representa $|a_2(t)|^2$ como función del tiempo para diferentes valores de $(\omega_{21} - \omega)$ (falta de sintonía entre la frecuencia del campo aplicado y del sistema atómico). La probabilidad oscila con frecuencia $\omega_{21} - \omega$,

$$\text{sen}^2 \frac{(\omega_{21} - \omega)t/2}{2} = \frac{1 - \cos(\omega_{21} - \omega)t/2}{2}$$

y es proporcional a $(\omega_{21} - \omega)^{-2}$. En ella se puede apreciar que la probabilidad de que se produzca la transición es tanto menor cuanto más diferentes son las frecuencias del campo y la de transición. Este efecto puede verse mejor en la figura 21.8, en la que se representa $|a_2(t)|^2$ en función del desacoplo de frecuencias.

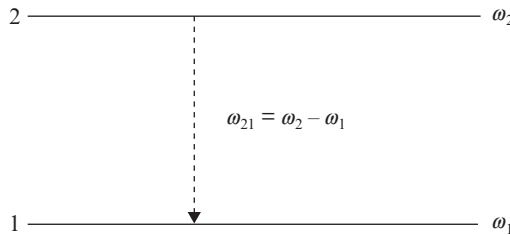


Figura 21.6. Sistema de dos niveles cuánticos.

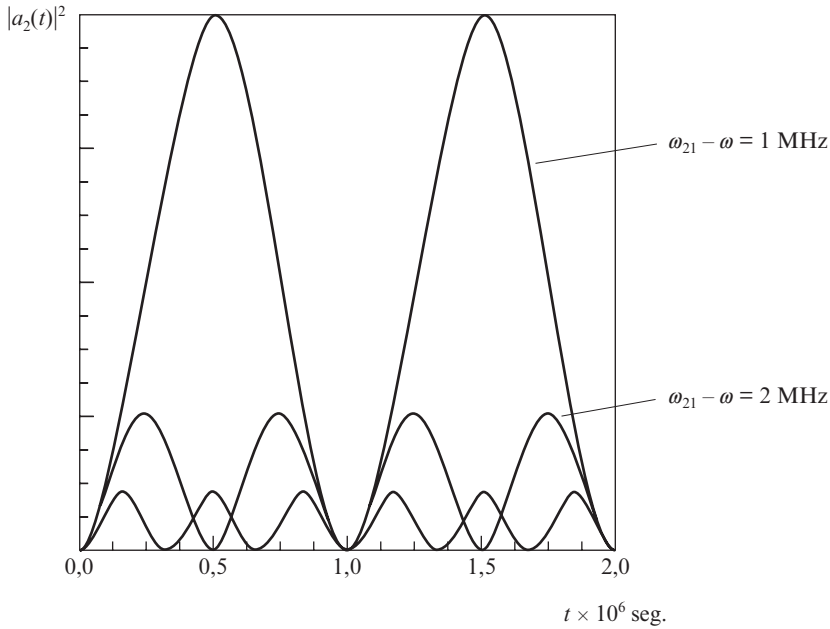


Figura 21.7. Probabilidad de absorción en función del tiempo para una excitación periódica. Se ha tomado como parámetro la diferencia de frecuencia entre el campo y el sistema.

En la mayor parte de los casos de interacción radiación-materia el campo no es perfectamente monocromático, con lo que la expresión [21.3.14] debe ser integrada a todas las frecuencias:

$$P_2 = \int d(|a_2(t)|^2) = \frac{e^2}{4\hbar^2} \int_0^\infty \langle k | \mathbf{r} \times \mathbf{E}_\omega e^{ik \cdot \mathbf{r}} | i \rangle \frac{\text{sen}^2 \{(\omega_{21} - \omega)t/2\}}{[(\omega_{21} - \omega)/2]^2} d\omega$$

donde E_ω es la correspondiente amplitud de Fourier del campo no monocromático. Si se supone que la distribución espectral del campo varía lentamente frente al factor $\text{sen}^2 xt/x^2$, el resultado es:

$$P_2 = \frac{\pi e^2}{2\hbar^2} |\langle k | \mathbf{r} \times \mathbf{E}_\omega e^{ik \cdot \mathbf{r}} | i \rangle|^2 t \tag{21.3.15}$$

La probabilidad de absorción estimulada por unidad de tiempo será entonces:

$$\frac{dP_2}{dt} = \frac{\pi e^2}{2\hbar^2} |\langle k | \mathbf{r} \times \mathbf{E}_\omega e^{ik \cdot \mathbf{r}} | i \rangle|^2 \tag{21.3.16}$$

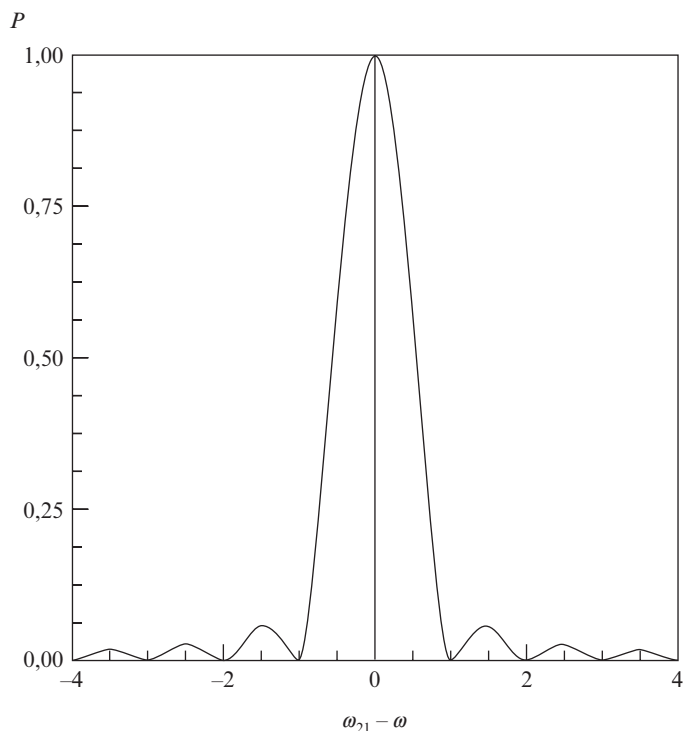


Figura 21.8. Probabilidad de transición para un sistema de dos niveles en función de la diferencia entre la frecuencia propia y la del campo excitador.

Ahora bien, $|\mathbf{r}|$ es del orden del angstrom (1 angstrom = 10^{-8} cm) y para frecuencias ópticas $|k| \approx 10^5 \text{ cm}^{-1}$, con lo que no se comete gran error al sustituir $e^{i\mathbf{k} \times \mathbf{r}}$ por 1 en el desarrollo:

$$e^{i\mathbf{k} \times \mathbf{r}} = 1 + i\mathbf{k} \times \mathbf{r} + \dots$$

con lo que:

$$\frac{dP_2}{dt} = \frac{\pi e^2}{2\hbar^2} |\langle k|\mathbf{r} \times \mathbf{E}_\omega|i\rangle|^2 \quad [21.3.17]$$

Haciendo uso de la expresión del vector de Poynting, la densidad de energía de la radiación por unidad de volumen y de intervalo de frecuencia angular se puede poner:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{2} \epsilon_0 E_\omega^2$$

y, por tanto:

$$\frac{dP_2}{dt} = \frac{\pi}{\hbar^2 \epsilon_0} \mathcal{P}^2 \rho(\omega) \quad [21.3.18]$$

donde \mathcal{P} es el elemento de matriz de la transición:

$$\mathcal{P} = \langle k | \mathbf{r} \times \hat{z} | i \rangle \quad [21.3.19]$$

siendo \hat{z} el vector unitario en la dirección de polarización del campo.

Si la radiación fuera isotrópica y no polarizada, [21.3.18] debería ser promediada a todas las posibles direcciones de polarización, con lo que se hubiese obtenido:

$$\frac{dP_2}{dt} = \frac{\pi e^2}{3\epsilon_0 \hbar^2} |\langle k | \mathbf{r} | i \rangle|^2 \rho(\omega) \quad [21.3.20]$$

siendo:

$$|\langle k | \mathbf{r} | i \rangle|^2 = |\langle k | x | i \rangle|^2 + |\langle k | y | i \rangle|^2 + |\langle k | z | i \rangle|^2$$

La expresión [21.3.20] es una variante de la conocida regla de oro de Fermi. En ella se observa que la probabilidad del proceso es proporcional a la densidad de radiación, por esto se dice que la absorción de radiación es estimulada por la propia radiación. A más radiación presente, mayor es la probabilidad de absorción. Aunque pueda parecer extraño, lo mismo ocurre cuando el proceso es de emisión de radiación. Así, si en el problema de dos niveles que hemos analizado hubiéramos supuesto que en el estado inicial $a_2 = 1$ y $a_1 = 0$, habríamos obtenido de forma análoga la probabilidad por unidad de tiempo de emisión estimulada.

A veces, la expresión [21.3.20] se escribe:

$$\frac{dP_2}{dt} = B \rho(\omega) \quad [21.3.21]$$

donde B se conoce como coeficiente estimulado de Einstein.

De esta manera hemos obtenido las probabilidades por unidad de tiempo de absorción y emisión estimulada en teoría semiclásica. Además, existe una probabilidad de que la emisión sea espontánea, esto es, en ausencia de radiación presente. La probabilidad por unidad de tiempo de emisión espontánea, A , puede obtenerse por el siguiente procedimiento.

Supongamos de nuevo un sistema de dos niveles en interacción con la radiación (véase figura 21.9). Si llamamos n_2 y n_1 al número de átomos por unidad de volumen de cada nivel, entonces:

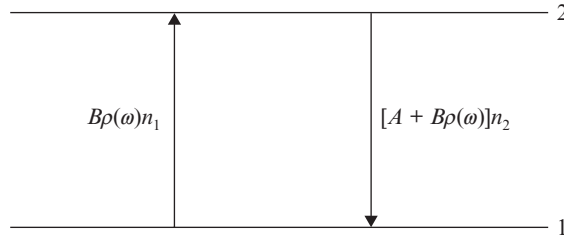


Figura 21.9. Probabilidades de transición en un sistema de dos niveles.

$An_2 \Rightarrow$ número de átomos que por unidad de tiempo pasan del nivel 2 al 1 por emisión espontánea.

$B\rho(\omega)n_1 \Rightarrow$ número de átomos que por unidad de tiempo salen del nivel 1 por absorción.

$B\rho(\omega)n_2 \Rightarrow$ número de átomos que por unidad de tiempo pasan del nivel 2 al 1 por emisión estimulada.

En definitiva:

$$\begin{aligned} \frac{dn_2}{dt} &= -An_2 - B\rho(\omega)(n_2 - n_1) \\ \frac{dn_1}{dt} &= An_2 + B\rho(\omega)(n_2 - n_1) \end{aligned} \quad [21.3.22]$$

Si el sistema estuviese en equilibrio térmico con la radiación a temperatura T , ésta tendría una distribución espectral dada por la fórmula de Planck:

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3/\pi^2c^3}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad [21.3.23]$$

y las poblaciones de los niveles serían constantes, con lo que [21.3.22]:

$$[A + B\rho(\omega)]n_2 = B\rho(\omega)n_1 \quad [21.3.24]$$

Además, en equilibrio térmico, de acuerdo con la distribución de Boltzman:

$$n_2 = n_1 e^{-\hbar\omega/kT} \quad [21.3.25]$$

Haciendo uso de [21.3.23], [21.3.24] y [21.3.25]:

$$\frac{A}{B} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3} \quad [21.3.26]$$

y con [21.3.20] y [21.3.21]:

$$A = \frac{\omega^3 e^2}{3\pi\hbar\epsilon_0 c^3} |\langle 2|\mathbf{r}|1\rangle|^2 \quad [21.3.27]$$

Multiplicando [21.3.27] por $\hbar\omega$, obtendremos la potencia emitida en forma espontánea:

$$P = \frac{\omega^4 e^2}{3\pi\epsilon_0 c^3} |\langle 2|\mathbf{r}|1\rangle|^2 \quad [21.3.28]$$

$\langle 2|\mathbf{r}|1\rangle$ es el valor del momento dipolar de la transición, con lo que, comparando [21.3.28] con su equivalente obtenido de la teoría clásica, [21.2.17], sólo coinciden si:

$$|\langle 2|\mathbf{r}|1\rangle|^2 = \frac{s_0^2}{4}$$

La necesidad de introducir la emisión espontánea es consecuencia de que, en caso contrario, la ecuación [21.3.24] no sería compatible con la ley de Planck [21.3.23]. Este fallo de la teoría de no dar cuenta de la emisión espontánea se resuelve cuando se cuantifica el campo electromagnético, en cuyo caso aparece como resultado de la interacción del átomo con la radiación de cero fotones.

21.4. OSCILADORES CLÁSICOS Y CUÁNTICOS

Hemos estudiado a lo largo de este capítulo dos interpretaciones aparentemente muy diferentes de la interacción radiación-materia. En la teoría clásica, los emisores de radiación son cargas que realizan oscilaciones, ya sean libres, amortiguadas, forzadas, etc., mientras que en la teoría semiclásica la radiación aparece como consecuencia de transiciones entre estados estacionarios del átomo.

Consideremos, sin embargo, de nuevo la emisión de radiación en un sistema cuántico de dos niveles, estando el átomo en el instante inicial en el estado de menor energía.

Debido a la interacción con el campo exterior, aparece una probabilidad de que el átomo cambie de estado, con lo que en el instante t , posterior al comienzo de la interacción, el estado del átomo será, de acuerdo con [21.3.5], una superposición de la forma:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = a_2(t)e^{-i(E_2/\hbar)t}\phi_2(\mathbf{r}) + a_1(t)e^{-i(E_1/\hbar)t}\phi_1(\mathbf{r}) \quad [21.4.1]$$

Como la función de onda está definida, salvo factores de fase, podemos multiplicar [21.4.1] por $\exp(iE_1 t/\hbar)$:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = a_2 e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} \phi_2(\mathbf{r}) + a_1(t) \phi_1(\mathbf{r})$$

El valor esperado del momento dipolar $\mathbf{p} = e\mathbf{r}$ en este estado es:

$$\langle p \rangle = \langle 2|r|1 \rangle a_2^* a_1 e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} + \text{constantes}$$

con lo que, en definitiva, el átomo cuántico está actuando como un dipolo oscilante a la frecuencia:

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

de forma análoga a lo que ocurría en la teoría clásica.

21.5. LAS REGLAS DE SELECCIÓN

Como ya hemos visto al estudiar la estructura fina del átomo de hidrógeno, los niveles atómicos (cuyas energías dependerán, en el modelo no-relativista, solamente del número cuántico principal n) han levantado la degeneración sobre el número cuántico ℓ y, con la consideración del momento angular interno (espín), también sobre el número cuántico j (véase figura 21.10).

Si ahora consideramos, por ejemplo, las transiciones de la serie de Lyman, vemos que la línea $\alpha(n=2 \Rightarrow n=1)$ a su vez debería de tener una estructura fina formada por tres transiciones en el espectro. La línea $\beta(n=3 \Rightarrow n=1)$, a su vez, debería estar estructurada en cinco líneas, y así sucesivamente.

No obstante, la espectroscopía fina muestra que todas las líneas de la serie de Lyman están escindidas en simples dobletes, lo cual indica que no todas las transiciones entre niveles se realizan, sino que hay muchas que, de algún modo, son prohibidas. Estas transiciones prohibidas serían aquellas para las que el elemento de matriz dipolar eléctrico:

$$\langle n' \ell' s' j' m'_j | \mathbf{r} | n, \ell, s, j, m_j \rangle \quad [21.5.1]$$

tenga nulas sus tres componentes.

Vamos a continuación a analizar cuándo se produce esta circunstancia: como los vectores de la base estándar son combinaciones lineales de los vectores de la base producto tensorial:

$$|n, \ell, s, j, m_j\rangle = \sum_{m_\ell} \sum_{m_s} C(j, m_j, m_\ell, m_s) |n, \ell, s, m_\ell, m_s\rangle \quad [21.5.2]$$

comenzaremos por estudiar los elementos de matriz de r entre los vectores de la base producto, es decir:

$$\langle n', \ell', s', m'_\ell, m'_s | \mathbf{r} | n, \ell, s, m_\ell, m_s \rangle \quad [21.5.3]$$

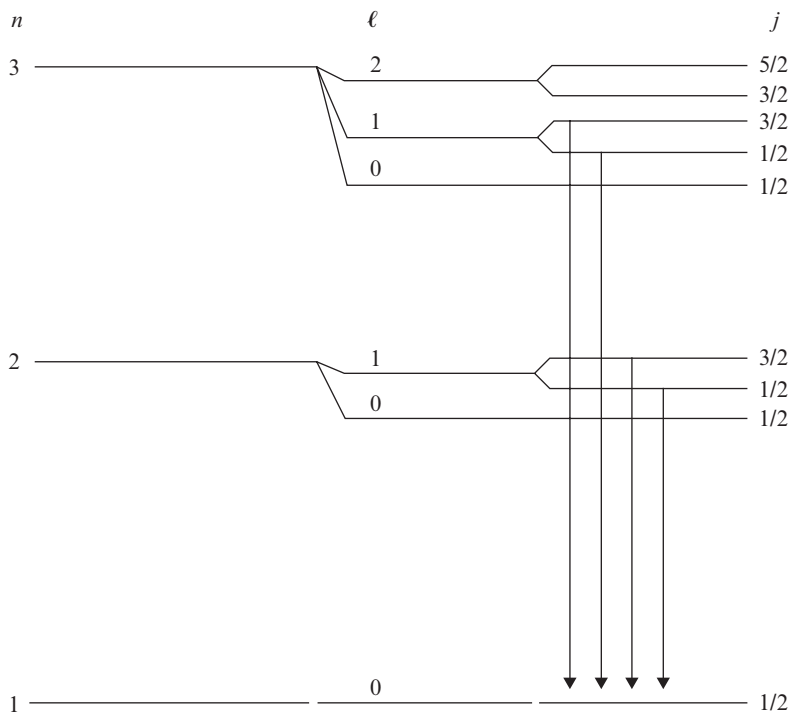


Figura 21.10. Descomposición de líneas espectrales.

Si llamamos x, y, z a las componentes de r , el estudio se facilita si se realiza sobre los elementos de matriz de los operadores:

$$\begin{aligned} \xi &= x + iy \\ \eta &= x - iy \end{aligned} \quad [21.5.4]$$

además de sobre la tercera componente z .

Escribiendo dichos operadores en coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned} \xi &= r \operatorname{sen} \theta e^{i\varphi} \\ \eta &= r \operatorname{sen} \theta e^{-i\varphi} \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad [21.5.5]$$

y teniendo en cuenta que:

$$|n\ell sm_\ell m_s\rangle = |n\ell m_\ell\rangle \otimes |sm_s\rangle \quad [21.5.6]$$

los elementos no nulos serán aquellos en los que no cambia el espín:

$$\Delta s = 0 \quad ; \quad \Delta m_s = 0 \quad [21.5.7]$$

lo cual nos da una primera *regla de selección*.

Además de cumplirse la condición [21.5.7], tendrá que ser distinto de cero alguno de los elementos de matriz:

$$\begin{aligned} \langle n' \ell' m'_\ell | \begin{Bmatrix} \xi \\ \eta \\ z \end{Bmatrix} | n \ell m_\ell \rangle &\sim \int_0^\infty R_{n'\ell'} R_{n\ell} r^3 dr \int_0^\pi \begin{Bmatrix} \text{sen}^2 \theta \\ \text{sen}^2 \theta \\ \text{sen} \theta \cos \theta \end{Bmatrix} P_\ell^{m'}(\cos \theta) P_\ell^m(\cos \theta) d\theta \\ &\int_0^{2\pi} \begin{Bmatrix} \exp[i(m - m' + 1)\varphi] \\ \exp[i(m - m' - 1)\varphi] \\ \exp[i(m - m')\varphi] \end{Bmatrix} d\varphi \end{aligned} \quad [21.5.8]$$

Como los integrandos en φ son funciones periódicas de período 2π , las integrales se anularán, a menos que:

$$\Delta m = m - m' = -1, 1, 0 \quad [21.5.9]$$

lo cual nos da la *regla de selección* para la tercera componente del momento orbital.

En lo que se refiere al caso $\Delta m = 0$, deberá ser distinta de cero la integral:

$$\int_0^\pi P_\ell^m(\cos \theta) P_\ell^m(\cos \theta) \text{sen} \theta \cos \theta d\theta$$

que, con el cambio: $x = \cos \theta$, queda:

$$\int_{-1}^1 P_\ell^m(x) P_\ell^m(x) x dx$$

Podemos ahora usar la ley de recurrencia entre los polinomios de Legendre:

$$x P_\ell^m = a_{\ell m} P_{\ell+1}^m + b_{\ell m} P_{\ell-1}^m$$

con lo que:

$$a_{\ell m} \int_{-1}^1 P_{\ell+1}^m P_\ell^m dx + b_{\ell m} \int_{-1}^1 P_{\ell-1}^m P_\ell^m dx$$

pero, por la ortogonalidad de los polinomios de Legendre:

$$\int_{-1}^1 P_\ell^m P_{\ell'}^m dx = C_{\ell m} \delta_{\ell\ell'}$$

lo que implica que la integral doble sobre θ sólo será distinta de cero si:

$$\Delta\ell = \ell' - \ell = 1, -1 \quad [21.5.10]$$

Haciendo el mismo cambio de variable ($x = \cos \theta$) y de la relación de recurrencia:

$$\sqrt{1-x^2} P_\ell^m = a'_{\ell m} P_{\ell+1}^{m+1} + b'_{\ell m} P_{\ell-1}^{m+1}$$

se tratan de manera análoga los casos $\Delta m = 1, -1$, obteniéndose la misma regla de selección [21.5.10], que es la del número cuántico de momento orbital.

Como las integrales sobre r en [21.5.8] son siempre distintas de cero, no hay regla de selección sobre el número cuántico principal n .

Las reglas de selección [21.5.7, 8, 10] junto con [21.5.2] implican que los elementos de matriz [21.5.1] son distintos de cero sólo si:

$$\begin{cases} \Delta s = 0 \\ \Delta \ell = 1, -1 \\ \Delta j = 1, 0, -1 \quad (\text{excepto } j = 0, j' = 0) \\ \Delta m_j = 1, 0, -1 \end{cases} \quad [21.5.11]$$

Estos resultados están ligados al carácter impar de los operadores de r y a la paridad definida de la parte angular de las autofunciones de los potenciales esféricamente simétricos.

Haciendo uso de [21.5.11] se explican los espectros de estructura fina observados experimentalmente, en particular los dobletes de la serie de Lyman mencionados anteriormente.

EJERCICIOS

21.1. Calcular la potencia electromagnética emitida por una carga que ejecuta un movimiento circular uniforme (rotador). Encontrar, asimismo, la polarización de dicho campo.

21.2. Explicar el efecto Zeeman normal mediante la teoría de Lorentz suponiendo que la materia está formada por osciladores lineales cargados.

21.3. Encontrar la probabilidad de emisión espontánea desde el nivel $n = 2, \ell = 1$ al fundamental del átomo de hidrógeno.

21.4. Sea P la probabilidad constante de desexcitación por unidad de tiempo de un cierto estado. Si en un cierto instante es $N(0)$ la población del mismo, encontrar la población en cualquier instante posterior y el tiempo de vida del nivel.

21.5. Un gas formado por átomos con dos niveles de energía separados por 2 eV se ilumina con una densidad de radiación de 10^{-12} erg \times seg \times cm $^{-3}$ en la frecuencia de resonancia. La temperatura de la experiencia es tal que la diferencia de energía entre niveles es mucho mayor que KT . Calcular, sabiendo que el tiempo de vida del nivel superior es de 10^{-8} s: *a)* las poblaciones de ambos niveles al cabo de $3,33 \times 10^{-9}$ s de comenzar la iluminación, y *b)* dichas poblaciones en estado estacionario. Número de átomos por cm 3 : 10^{10} .

22

El átomo de helio

José Luis Escudero
José Manuel Guerra

22.1. INTRODUCCIÓN

Una vez que hemos estudiado el átomo de hidrógeno, y por extensión los átomos que contienen un único electrón en la última capa (átomos hidrogenoides), discutiremos en éste y en el próximo capítulo, de una forma general, los átomos con varios electrones en la última capa.

En un principio pudiera suponerse que el tratamiento de los átomos con varios electrones externos podría abordarse de una forma similar al de los átomos hidrogenoides, es decir, planteando la correspondiente ecuación de Schrödinger y resolviéndola posteriormente haciendo uso de los conocidos métodos de la mecánica cuántica. Sin embargo, el único caso atómico resoluble es el del átomo de hidrógeno, ni siquiera el átomo de dos electrones, helio, se puede resolver; es más, incluso ni siquiera se puede plantear la ecuación correspondiente a cada uno de los electrones sin hacer ciertas aproximaciones, ya que la energía potencial de cada electrón está influenciada por la de repulsión de todos los demás sobre él y, por ello, no se puede distinguir la función de ondas de cada electrón, sino que únicamente tiene sentido la función de ondas atómica, considerando el átomo como un conjunto. El método aproximado que se utiliza con generalidad en el tratamiento de los átomos multielectrónicos es el método de Hartree, en el cual se supone que cada electrón se mueve en un potencial esféricamente simétrico debido a la interacción nuclear y a un cierto promedio de las interacciones de los demás electrones.

Una complicación añadida procede del hecho de que, por ejemplo, en el átomo de helio, los dos electrones son idénticos y, por tanto, indistinguibles. Como ya se ha visto en el capítulo 15, se entiende por partículas idénticas aquellas que se comportan de la misma manera en todos los experimentos preparados en las mismas condiciones. Desde un punto de vista clásico, la mecánica de partículas idénticas no presenta problemas particulares. Clásicamente dos partículas son siempre distinguibles y sus trayectorias individuales, en principio, pueden ser seguidas sin ambigüedad en los experimentos. Sin embargo, en mecánica cuántica el concepto de trayectoria de una partícula no tiene sentido, ya que una medida de la posición modifica profundamente su función de ondas. Por otra parte, si consideramos las partículas idénticas desde el punto de vista cuántico, es decir, descritas por sus funciones de ondas, éstas pueden solaparse en ciertas regiones del espacio, y, al menos durante los choques, este solapamiento puede ser considerable. Si se efectúa una medida de la posición mientras que las funciones de ondas están fuertemente solapadas

(véase figura 22.1) y se detecta una de las dos partículas, es imposible saber cuál de ellas ha sido detectada. De hecho, no se puede efectuar ningún experimento individual en el que se pueda saber o predecir cuál de las dos partículas ha intervenido. La mecánica cuántica establece entonces que la pretensión de distinguir en un sistema de partículas idénticas cuál es la que interviene en un suceso individual carece de sentido, y con mayor razón en un resultado estadístico. En coherencia con este postulado, la formulación teórica con la que se pretenda describir el comportamiento del sistema de partículas idénticas debe ser invariante bajo la permutación de las mismas.

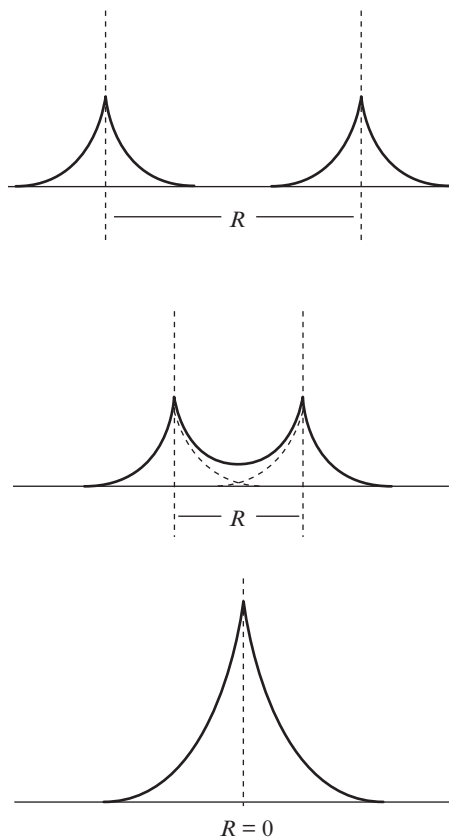


Figura 22.1. Solapamiento de las funciones de ondas de dos partículas que se aproximan.

Teniendo en cuenta que ya sabemos resolver la ecuación de Schrödinger para potenciales centrales, y que el potencial de Coulomb es central, podremos abordar cuánticamente la descripción de los átomos multielectrónicos si somos capaces de aproximar el potencial ejercido sobre cada electrón por todos los demás, por un potencial promedio, el mismo para todos los electrones, y que además sea central, es decir, que dependa únicamente de la distancia del electrón al núcleo. En ese caso habremos conseguido: prime-

ro, que la ecuación de Schrödinger del átomo sea separable en tantas ecuaciones como electrones, ya que el potencial al que estará sometido cada electrón dependerá solamente de sus coordenadas, y segundo, que cada una de estas ecuaciones sea resoluble, puesto que en todas ellas el potencial será central. Esta aproximación, en la que cada electrón se mueve en un potencial promedio debido a los demás electrones (potencial de Hartree), se conoce como aproximación de electrones independientes o aproximación de un electrón.

En lo que sigue veremos cómo obtener el potencial de Hartree y la resolución de las ecuaciones de estado en aproximación de electrones independientes, así como las correcciones necesarias para que la teoría se acerque a los resultados experimentales, primero para el átomo de helio y posteriormente para átomos de más de dos electrones.

22.2. EL ESPECTRO DEL ÁTOMO DE HELIO

Vamos a iniciar el estudio de los átomos multielectrónicos desarrollando las aproximaciones indicadas en el párrafo anterior para el caso más sencillo, el átomo de helio, que posee solamente dos electrones. Pero antes de llevar a cabo el estudio teórico de dicho átomo describiremos las diferentes líneas que presenta su espectro, ya que, de la misma manera que en el átomo de hidrógeno, el análisis del espectro del helio va a ser un fiel reflejo experimental del esquema de niveles energéticos.

El análisis empírico de los espectros desarrollado por los espectroscopistas ha permitido en muchos casos inferir resultados sobre los niveles energéticos de los átomos, resultados que, en definitiva, no difieren en gran medida de los que se obtienen como resultado de las teorías cuánticas, y que, sin duda, han servido de guía para el desarrollo de dichas teorías (considérese el caso de las series espectroscópicas del átomo de hidrógeno). Los elementos más sencillos, aquellos que poseen un único electrón de valencia, siempre dan lugar a líneas espectrales dobles, llamadas dobletes, mientras que si se analizan los espectros de los átomos con dos electrones de valencia se observan series de líneas únicas (singletes) y triples (tripletes). A finales del siglo pasado y principios de éste, diferentes investigadores desarrollaron métodos empíricos que les permitieron encontrar relaciones entre las frecuencias o números de onda de las series de líneas, así como diferencias de energías entre ciertos términos, de manera análoga al procedimiento usado por Rydberg con el espectro del átomo de hidrógeno.

Según aumenta el número de electrones, este análisis empírico se complica e incluso, en un principio, no se encontraban relaciones que permitieran analizar los espectros de los elementos de la zona central de la tabla periódica. El origen de una sistemática adecuada que permitió por fin este estudio hay que buscarlo en el método usado por Miguel Catalán en 1922 para analizar el espectro del manganeso. Mediante dicho procedimiento consiguió clasificar las líneas de ese espectro en grupos que hoy se conocen como multipletes. El modelo vectorial de Landé fue el inicio de la aplicación de técnicas cuánticas al estudio de los átomos multielectrónicos.

En concreto, el análisis empírico del espectro del átomo más simple con dos electrones en la última capa, el helio, condujo a pensar en la existencia de dos sistemas independien-

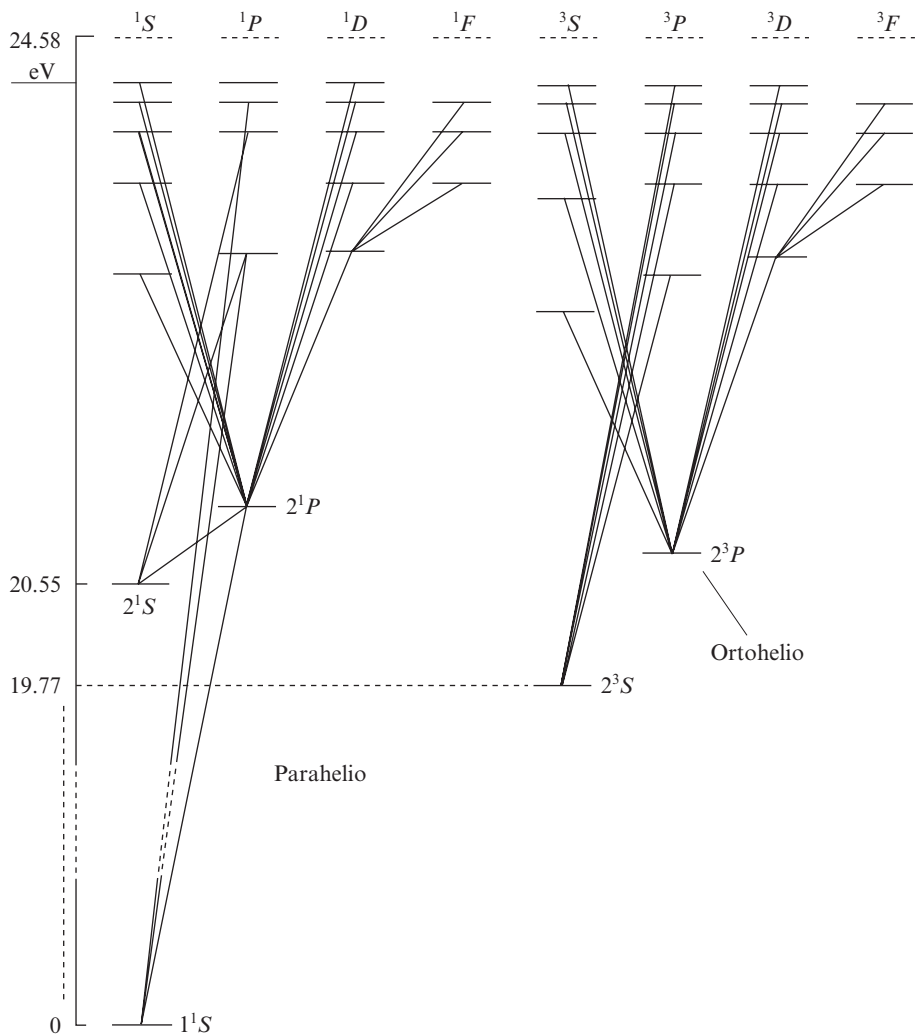


Figura 22.2. Esquema de niveles y líneas espectrales del ortohelio y del parahelio.

tes de términos (véase figura 22.2), de manera que la serie de líneas singletes respondía a las fórmulas empíricas con los términos de uno de los sistemas, y la serie de tripletes a la otra, sin que se observaran líneas que respondieran a contribuciones que mezclaran términos de uno y otro sistemas. Estos resultados dieron lugar a que en un principio se estableciese la existencia de dos clases de átomos de helio, el ortohelio, responsable del sistema de líneas singlete, y el parahelio, de los tripletes. Como veremos más adelante, ésta no es la explicación correcta de este espectro, pero todavía hoy en día hay quien designa con esos nombres a los sistemas de líneas del espectro del único átomo de helio. Sistemas

dobles de líneas como el que acabamos de describir aparecen en los espectros de todos los átomos o iones con dos electrones ópticos en la última capa y también en los de moléculas como la de H_2 . A pesar de ello los espectros se complican a medida que aumenta el número atómico, ya que, en el caso de átomos ligeros, la separación entre niveles es tan pequeña que sólo aparece como una estructura fina, mientras que en los átomos pesados estas diferencias son tan grandes que hacen que sea muy difícil reconocer el carácter de las series en estos átomos.

Fenómenos análogos se encuentran en átomos con más de dos electrones externos. Así, los de la tercera columna de la tabla periódica presentan dos series, una de dobletes y otra de cuatripletas; los de cuatro electrones, tres series: singletes, tripletes y quintupletes, etcétera. Sin embargo, en todos los casos el término de menor energía es singlete, como en el átomo de helio (véase figura 22.2).

22.3. PARTÍCULAS IDÉNTICAS. EL ÁTOMO DE HELIO

Para fijar las ideas básicas del tratamiento cuántico de los átomos multielectrónicos vamos a plantear el caso del átomo de helio, pero suponiendo que en una primera aproximación del método del potencial esféricamente simétrico despreciamos la interacción mutua entre sus dos electrones, de manera que cada electrón sufre solamente la atracción nuclear, con lo que podemos tratar el conjunto de ambos electrones como dos partículas independientes, las cuales, por otro lado, son indistinguibles.

Si se designa con el subíndice 1 a las magnitudes que se refieren a uno de los electrones y con el 2 a las que se refieren al otro, la ecuación que describe el comportamiento de los dos electrones en la aproximación indicada será:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \phi_T - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 \phi_T + [V(\mathbf{r}_1) + V(\mathbf{r}_2)] \phi_T = E_T \phi_T \quad [22.3.1]$$

En esta ecuación se pueden separar las variables que corresponden a cada partícula haciendo:

$$\phi_T = \phi_\alpha(\mathbf{r}_1) \cdot \phi_\beta(\mathbf{r}_2) \quad [22.3.2]$$

con lo que [22.3.1] toma la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \phi_\alpha(\mathbf{r}_1) + V(\mathbf{r}_1) \phi_\alpha(\mathbf{r}_1) = E_\alpha \phi_\alpha(\mathbf{r}_1) \quad [22.3.3]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 \phi_\beta(\mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_2) \phi_\beta(\mathbf{r}_2) = E_\beta \phi_\beta(\mathbf{r}_2)$$

$$E_T = E_\alpha + E_\beta \quad [22.3.4]$$

Las dos ecuaciones [22.3.3] con el potencial coulombiano $V(r)$ son ecuaciones de átomo de hidrógeno y sus soluciones ya son conocidas. Cada una de estas soluciones se caracteriza por sus cuatro números cuánticos, tres orbitales y el de espín:

$$\begin{matrix} \alpha \\ \beta \end{matrix} \equiv n, \ell, m_\ell, m_s$$

Para simplificar la notación, en lugar de r_1 y r_2 escribiremos simplemente 1 y 2, con lo que la función de ondas del átomo de helio [22.3.2] se escribirá:

$$\phi_T = \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) \quad [22.3.5]$$

y la densidad de probabilidad que genera esta función es:

$$\phi_T^* \phi_T = \phi_\alpha^*(1)\phi_\beta^*(2)\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) \quad [22.3.6]$$

Si en [22.3.5] y [22.3.6] permutamos las partículas en el espacio:

$$1 \rightarrow 2$$

$$2 \rightarrow 1$$

se obtiene:

$$\phi'_T = \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1) \quad [22.3.7]$$

$$\phi_T^* \phi'_T = \phi_\alpha^*(2)\phi_\beta^*(1)\phi_\alpha(2)\phi_\beta(1) \quad [22.3.8]$$

Como sabemos, la densidad de probabilidad es una magnitud medible que, al ser partículas indistinguibles, no debe variar al permutarlas; evidentemente [22.3.6] no coincide, en general, con [22.3.8], ya que las funciones que en ellas aparecen están evaluadas en diferentes puntos. Las expresiones [22.3.6] y [22.3.8] suponen que al efectuar medidas de posición se puede saber qué partícula se mide en cada observación, lo cual carece de sentido al ser éstas indistinguibles. Sin embargo [22.3.5] y [22.3.7] son ambas soluciones de [22.3.1], pero claramente son soluciones distintas desde el punto de vista de las predicciones experimentales, en contra del principio de indistinguibilidad. No obstante, es posible construir una solución de [22.3.1] correspondiente al mismo autovalor E_T dado por [22.3.4] que esté libre de estas dificultades.

Las funciones [22.3.5] y [22.3.7] corresponden ambas al mismo autovalor, siendo, por tanto, degeneradas, y, por ello, las dos combinaciones de ambas, normalizadas¹, que escribamos a continuación, son degeneradas con el mismo autovalor:

$$\phi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) + \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1)] \quad [22.3.9]$$

¹ Si $\alpha = \beta$ la función [22.3.9] no está normalizada, en cuyo caso, la combinación simétrica escribe $\phi_S = \phi_\alpha(1)\phi_\alpha(2)$.

$$\phi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) - \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1)] \quad [22.3.10]$$

La configuración ϕ_S es conocida como función total simétrica, y la ϕ_A como antisimétrica. En estas funciones, al permutar las partículas:

$$\begin{array}{ccc} \phi_S & \xrightarrow{\substack{1 \rightarrow 2 \\ 2 \rightarrow 1}} & \phi_S \\ \phi_A & \xrightarrow{\substack{1 \rightarrow 2 \\ 2 \rightarrow 1}} & -\phi_A \end{array}$$

por lo que:

$$\begin{array}{ccc} |\phi_S|^2 = \phi_S^* \phi_S & \xrightarrow{\substack{1 \rightarrow 2 \\ 2 \rightarrow 1}} & \phi_S^* \phi_S \\ |\phi_A|^2 = \phi_A^* \phi_A & \xrightarrow{\substack{1 \rightarrow 2 \\ 2 \rightarrow 1}} & (-1)^2 \phi_A^* \phi_A = \phi_A^* \phi_A \end{array}$$

Así pues, $|\phi_A|^2$ y $|\phi_S|^2$ son invariantes bajo la permutación de las partículas. Se puede demostrar que, como la predicción de los resultados de las medidas se hace a partir del módulo de la función de ondas, estas predicciones efectuadas con ϕ_S y ϕ_A son invariantes bajo permutación. Por tanto, el conjunto formado por las dos partículas indistinguibles ha de ser descrito por una combinación ya sea simétrica o antisimétrica (capítulo 15).

Por otro lado, de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli, cada estado cuántico de un átomo no puede tener más que un electrón: ahora bien, si dos partículas idénticas estuvieran descritas por una combinación lineal antisimétrica y se encontrasen ambas en el mismo estado cuántico ϕ_α :

$$\phi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_\alpha(1)\phi_\alpha(2) - \phi_\alpha(2)\phi_\alpha(1)] \equiv 0$$

Es decir, su función de ondas total sería idénticamente nula, con lo que no es posible esta situación. Por tanto, el hecho de que la función total sea antisimétrica implica la verificación del principio de exclusión en su enunciado anterior, por lo que una formulación más estricta del principio de exclusión sería: un sistema que contenga varios electrones deberá ser descrito por una función de ondas total antisimétrica.

Las consecuencias prácticas del carácter antisimétrico de la función de ondas total de estos sistemas son muy significativas e irán apareciendo en el tratamiento sucesivo de sistemas cuánticos complejos. El carácter de simetría o antisimetría de las funciones de ondas totales que describen sistemas de partículas idénticas se obtiene a través de la experiencia, la cual ha demostrado que los sistemas de partículas con espín fraccionario, a las que se llamará fermiones, tienen función antisimétrica, mientras que las que tienen espín entero o nulo, bosones, la tienen simétrica.

La función de ondas [22.3.10], correspondiente a la combinación antisimétrica de las funciones de dos electrones, se puede escribir en la forma:

$$\phi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_\alpha(1) & \phi_\alpha(2) \\ \phi_\beta(1) & \phi_\beta(2) \end{vmatrix} \quad [22.3.11]$$

Si fueran más de dos las partículas idénticas que hubiera que describir, se puede generalizar la función antisimétrica anterior en la forma:

$$\phi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_\alpha(1) & \phi_\alpha(2) & \dots & \phi_\alpha(N) \\ \phi_\beta(1) & \phi_\beta(2) & \dots & \phi_\beta(N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \quad [22.3.12]$$

expresión que se conoce como determinante de Slater, y en ella N es el número de partículas idénticas.

Ahora ya conocemos el procedimiento a seguir para construir la función de ondas total de un átomo multielectrónico a partir de las funciones individuales de cada electrón en la aproximación de electrones independientes; veamos entonces cómo calcular la energía de los diferentes niveles en el caso más sencillo de átomo multielectrónico, el átomo de helio.

En la aproximación indicada, las ecuaciones [22.3.3], en las cuales:

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

son ecuaciones de átomo de hidrógeno, es decir, en cada una de ellas ($Z = 1$):

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{(4\pi\epsilon_0)^2 2n^2 \hbar^2} = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{2e^4 m}{n^2 \hbar^2}$$

y entonces la energía total en el sistema de ambos electrones:

$$E_{T, n_1, n_2} = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{2e^4 m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right) \quad [22.3.13]$$

De acuerdo con [22.3.13], las energías del estado fundamental y del primero excitado son:

$$E_{T, 1, 1} = -109 \text{ eV}$$

$$E_{T, 1, 2} = -68 \text{ eV}$$

Estos valores difieren sustancialmente de los observados experimentalmente:

$$E_{T, 1, 1} \simeq -79 \text{ eV}$$

$$E_{T, 1, 2} \simeq -62 \text{ eV}$$

lo cual, simplemente, confirma que la aproximación de electrones independientes es demasiado mala y no debe de ser despreciada la interacción mutua entre los electrones. La interacción más importante entre los dos electrones es la repulsión coulombiana, que, al ser considerada, modifica la ecuación de Schrödinger [22.3.1] de forma que el nuevo hamiltoniano será:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad [22.3.14]$$

$$r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$$

Este hamiltoniano conduce a una ecuación de Schrödinger demasiado compleja para ser resuelta exactamente, y se impone la utilización de métodos aproximados. En el apartado 22.4 se resuelve esta ecuación por el método variacional y el perturbativo. Sin embargo, es posible, sin necesidad de resolver la ecuación [22.3.14], obtener resultados cualitativos interesantes. Así, al ser repulsiva la interacción entre los electrones, será de energía positiva y entonces aumentará la energía de estos estados, con lo que, al tenerla en cuenta, nos acercaremos a los experimentos; además, en el estado excitado, uno de los electrones tiene número cuántico $n_1 = 1$ y el otro $n_2 = 2$, con lo que al considerar el número cuántico ℓ , aparecen dos posibles estados:

$$a) \quad \begin{cases} n_1 = 1 & \ell_1 = 0 \\ n_2 = 2 & \ell_2 = 0 \end{cases} \quad \text{y} \quad b) \quad \begin{cases} n_1 = 1 & \ell_1 = 0 \\ n_2 = 2 & \ell_2 = 1 \end{cases}$$

Si nos fijamos en la figura [22.3], en el estado (a) los electrones están más separados que en el (b) y como consecuencia la energía de interacción coulombiana será mayor en el (b) que en el (a). Así, al considerar dicha interacción, se levanta parcialmente la degeneración del estado excitado (véase figura 22.4).

En las consideraciones precedentes no se ha tenido en cuenta el espín, ya que en el hamiltoniano no se han incluido las interacciones magnéticas. Ahora bien, en los átomos con pocos electrones los momentos de espín tienden a acoplarse entre ellos y el espín total se acopla posteriormente al momento orbital total; este hecho justifica que la función de ondas tenga separadas la parte orbital y la de espín de ambos electrones.

Como es natural, la función [22.3.11] no es la única forma antisimétrica que se puede obtener. Las funciones antisimétricas que ahora nos interesan son combinaciones lineales que tengan separadas la parte orbital de la de espín. La forma más sencilla de conseguirla consiste en multiplicar una función orbital total por una de espín total; para que el producto sea antisimétrico, bastará con que uno de los factores sea simétrico y el otro antisimétrico.

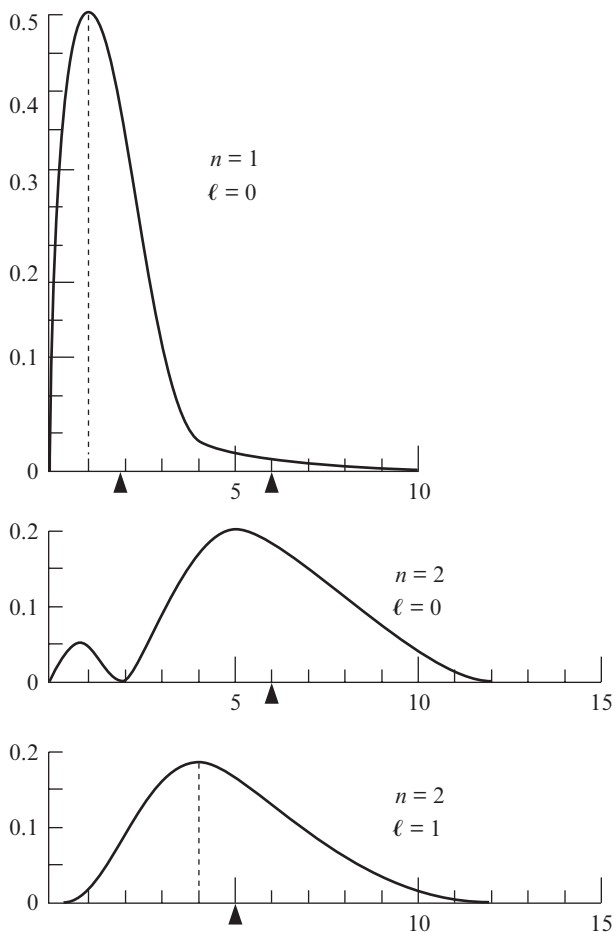


Figura 22.3. Probabilidad de encontrar al electrón en las proximidades del núcleo para varios estados del átomo de H. En el estado (a): $n_1 = 1, \ell_1 = 0; n_2 = 2, \ell_2 = 0$ la distancia entre flechas (posición media) es mayor que en el (b): $n_1 = 1, \ell_1 = 0; n_2 = 2, \ell_2 = 1$.

Designando con un subíndice literal arábigo al conjunto de los tres números cuánticos orbitales, podemos construir para el átomo de dos electrones una combinación orbital simétrica y otra antisimétrica:

$$\text{Simétrica} \begin{cases} \phi_a(1)\phi_a(2) & \text{si } a = b \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_a(1)\phi_b(2) + \phi_a(2)\phi_b(1)] \end{cases} \quad [22.3.15]$$

$$\text{Antisimétrica} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_a(1)\phi_b(2) - \phi_a(2)\phi_b(1)] \quad [22.3.16]$$

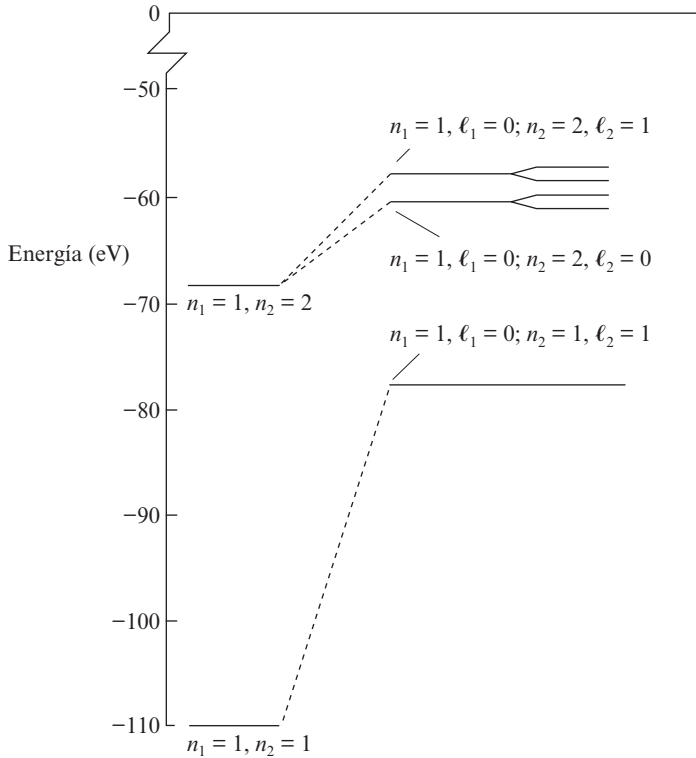


Figura 22.4. Levantamiento de la degeneración por interacción de canje.

Como el número cuántico de espín de cada electrón es $s = 1/2$, la tercera componente será: $m_s = \pm 1/2$, con lo que se puede formar una única función antisimétrica de espín total, la cual, si designamos:

$$\chi_+ \equiv \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \quad \text{y} \quad \chi_- \equiv \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle$$

toma la forma:

$$\text{Antisimétrica} \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)] \quad [22.3.17]$$

$$\text{Simétrica} \begin{cases} \chi_+(1)\chi_+(2) & [22.3.18] \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)] & [22.3.19] \\ \chi_-(1)\chi_-(2) \end{cases}$$

En definitiva, se obtienen cuatro posibles funciones de ondas correspondientes a otros tantos estados atómicos, uno con función de espín antisimétrica (estado singlete) y tres con función de espín simétrica (estado triplete). La interpretación de la parte de espín del estado triplete y del singlete se efectúa teniendo en cuenta el acoplo de los dos momentos de espín para dar un espín total:

$$\begin{matrix} s_1 = \frac{1}{2} \\ s_2 = \frac{1}{2} \end{matrix} \left\{ \begin{matrix} S = 0 & M_s = 0 & ; \text{ (espines antiparalelos)} \\ S = 1 & M_s = -1, 0, 1 & ; \text{ (espines paralelos)} \end{matrix} \right.$$

con lo que el estado singlete corresponde a la función de espín antisimétrica y el triplete a las simétricas. Para que la función de ondas total sea antisimétrica, en el estado singlete la orbital debe ser simétrica y en el triplete sería antisimétrica.

En lo que se refiere a la parte orbital, observaremos que al pretender localizar a ambos electrones próximos entre sí ($r_1 \approx r_2$):

$$\phi_a(r_1)\phi_b(r_2) \approx \phi_a(r_2)\phi_b(r_1)$$

por lo que, si los electrones están en el estado triplete:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_a(1)\phi_b(2) - \phi_a(2)\phi_b(1)] \approx 0$$

es decir, la probabilidad de encontrar a los dos electrones en posiciones próximas en el estado triplete, es muy baja; los electrones actúan como si se repeliesen cuando sus momentos de espín son paralelos².

Por el contrario, en el estado singlete, la probabilidad de encontrarlos juntos es:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_a(1)\phi_b(2) + \phi_a(2)\phi_b(1)] \approx \frac{2}{\sqrt{2}}\phi_a(1)\phi_b(2)$$

y tendrá el mayor valor posible; es como si los electrones con espines antiparalelos se atrajeran.

² Recuérdese que en la aproximación en la que estamos trabajando se ha despreciado la repulsión coulombiana.

Esta atracción o repulsión de los electrones, que no tiene un origen coulombiano, se denomina interacción de canje, y su origen se encuentra en las propiedades de simetría frente a permutaciones de las funciones de ondas, y es, por tanto, un efecto puramente cuántico que no posee análogo clásico.

La energía del sistema estará relacionada con la distribución espacial de la función de ondas, por lo que los niveles con función de ondas orbital simétrica es de esperar que tengan distinta energía que los que la tienen antisimétrica.

En el estudio energético del átomo de helio consideraremos en primer lugar el estado fundamental; en la aproximación de electrones independientes, los dos electrones tienen la misma función de ondas orbital, por lo que la total será simétrica:

$$\phi_{100}(1)\phi_{100}(2)$$

por tanto, la de espín será la antisimétrica [22.3.17], siendo este estado, por consiguiente, singlete:

$$\phi_{T\ 1,1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_{100}(1)\phi_{100}(2)[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)]$$

El caso del primer estado excitado es diferente. En primer lugar, ya hemos indicado cualitativamente que la interacción coulombiana levanta parcialmente la degeneración de este estado (para más detalles véase apartado 22.4), con lo que la energía de

$$a) \quad \begin{cases} n_1 = 1 & \ell_1 = 0 \\ n_2 = 2 & \ell_2 = 0 \end{cases}$$

es diferente de la de

$$b) \quad \begin{cases} n_1 = 1 & \ell_1 = 0 \\ n_2 = 2 & \ell_2 = 1 \end{cases}$$

Al considerar las funciones de espín, tanto en el estado *a*) como en el *b*) se puede conseguir una función total antisimétrica de dos maneras:

1. Orbital simétrica \times espín antisimétrica \Leftrightarrow singlete.
2. Orbital antisimétrica \times espín simétrica \Leftrightarrow triplete.

Pero la interacción de canje también produce el desdoblamiento de cada uno de estos estados, ya que en el estado singlete los electrones estarán más cerca que en el triplete y, por tanto, la energía del singlete será menos negativa que la del triplete (véase figura 22.4).

Ahora bien, las transiciones ópticas entre los estados excitados se efectúan con la regla de selección: $\Delta s = 0$, por lo cual las transiciones entre estados singletes y tripletes están prohibidas; esto hace que el espectro del helio presente dos grupos diferentes de

líneas: transiciones entre singletes, por un lado, y entre tripletes, por otro. Los tres niveles que componen el estado triplete están separados por muy poca energía (en la aproximación que hemos utilizado no se levanta esta degeneración), hecho que indujo a los espectroscopistas a pensar en dos clases de átomos de helio, pero que puede explicarse mediante transiciones entre grupos de niveles de diferentes características dentro del mismo átomo.

Finalmente, hemos de señalar que, como se deduce de todo lo expuesto, la razón del acoplo separado de espines y momentos orbitales está en la interacción de canje. Esta interacción es la que hace más favorable el acoplo mutuo de los espines que el acoplo espín-órbita separado de cada electrón. Para que pueda prevalecer la energía de canje sobre la magnética es preciso que esta última sea pequeña, lo cual ocurre si el núcleo no contiene demasiadas cargas.

22.4. COMPLEMENTO 1: RESOLUCIÓN APROXIMADA DE LA ECUACIÓN DEL ÁTOMO DE HELIO

Consideremos el hamiltoniano [22.3.14], en el cual se ha tenido en cuenta la repulsión coulombiana entre los dos electrones del átomo de helio:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad [22.4.1]$$

$$r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$$

La energía del estado fundamental se puede obtener con bastante precisión aplicando el método variacional. Para ello se puede tomar como función de partida la del estado fundamental en la aproximación de electrones independientes, es decir, la del estado fundamental del átomo de hidrógeno para cada uno de los electrones:

$$\phi_{100}(\mathbf{r}_1)\phi_{100}(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2}{a_0}\right)^3 e^{-2(r_1+r_2)/a_0}$$

la cual escribiremos en la forma:

$$\phi = N_0 e^{-\alpha(r_1 + r_2)} \quad [22.4.2]$$

$$|\phi|^2 = N_0^2 \iint e^{-2\alpha(r_1+r_2)} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = N_0^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{-2\alpha r_1} r_1^2 \sin^2 \theta_1 d\theta_1 d\varphi_1 dr_1 \times$$

$$\times \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{-2\alpha r_2} r_2^2 \sin^2 \theta_2 d\theta_2 d\varphi_2 dr_2 = \frac{\pi^2}{\alpha^6} N_0^2$$

con lo que la función [22.4.2] normalizada es:

$$\phi = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha(r_1+r_2)} \quad [22.4.3]$$

El método variacional exigirá minimizar la expresión:

$$E(\alpha) = \iint \phi^* H \phi \, dr_1 \, dr_2$$

Poniendo el hamiltoniano [22.4.1] en coordenadas esféricas, con [22.4.3] se obtiene:

$$E(\alpha) = \frac{\hbar^2}{m} \alpha^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{27}{8} \alpha \quad [22.4.4]$$

y para minimizar la energía:

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = 2 \frac{\hbar^2}{m} \alpha - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{27}{8} = 0$$

con lo que:

$$\alpha = \frac{27}{16} \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} \quad [22.4.5]$$

y sustituyendo en [22.4.4], la energía del estado fundamental queda:

$$E_{T,1,1} = -\left(\frac{27}{16}\right)^2 \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2} = -77.38 \text{ eV} \quad [22.4.6]$$

El resultado experimental es de -79 eV , por lo que el error del método variacional es, en este caso, del orden del 2%.

El cálculo se puede efectuar también mediante la teoría de perturbaciones. En efecto, como hemos indicado, la función de ondas en el estado fundamental del hamiltoniano no perturbado es el producto de las funciones de ondas del estado fundamental de cada uno de los electrones por separado:

$$\phi = \phi_a(\mathbf{r}_1)\phi_a(\mathbf{r}_2) = \phi_{100}(\mathbf{r}_1)\phi_{100}(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2}{a_0}\right)^3 e^{-2r_1/a_0} e^{-2r_2/a_0}$$

El hamiltoniano perturbador es:

$$W = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad [22.4.7]$$

Por tanto, la corrección a la energía del estado fundamental de H_0 será:

$$\Delta E = \iint \phi_{100}^*(\vec{r}_1)\phi_{100}^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \phi_{100}(\vec{r}_1)\phi_{100}(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \frac{5}{4} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = 34.06 \text{ eV} \quad [22.4.8]$$

con lo que la energía perturbada del estado fundamental es:

$$E_{T, 1, 1} = (E_{T, 1, 1})_0 + \Delta E = -109 + 34.06 = -74.94 \text{ eV} \quad [22.4.9]$$

El resultado es peor que el obtenido con el método variacional debido a que, como puede apreciarse, la corrección ΔE no es una pequeña fracción de $(E_{T, 1, 1})_0$, que es la condición necesaria para que converja el desarrollo perturbativo con rapidez. No obstante, la ventaja del método perturbativo es que permite obtener también la energía de los estados excitados.

Los primeros estados excitados del hamiltoniano no perturbado se obtendrán dejando uno de los electrones en su estado fundamental y excitando el otro. Al hacer esto se obtienen los siguientes estados:

$$\phi_{100}(\vec{r}_1)\phi_{200}(\vec{r}_2) \quad [22.4.10]$$

$$\left. \begin{aligned} &\phi_{100}(\vec{r}_1)\phi_{21-1}(\vec{r}_2) \\ &\phi_{100}(\vec{r}_1)\phi_{210}(\vec{r}_2) \\ &\phi_{100}(\vec{r}_1)\phi_{211}(\vec{r}_2) \end{aligned} \right\} \quad [22.4.11]$$

que en orden cero poseen todos la misma energía. Para solucionar el problema hay que resolver el determinante secular formado con los elementos de matriz del hamiltoniano perturbador [22.4.7] obtenidos con las funciones [22.4.10] y [22.4.11]. Este proceso es bastante complejo y no lo vamos a realizar aquí, pero sí vamos a razonar cualitativamente el resultado. Así, tenemos que la energía coulombiana mutua entre las dos partículas será tanto mayor cuanto más próximas estén; esto nos indica que el solapamiento de la probabilidad radial de las funciones de ambos electrones es el factor decisivo para tener la corrección de energía mutua.

Como la probabilidad radial sólo depende de n y ℓ , tendremos que los tres estados [22.4.11] tendrán la misma energía [véase figura 22.3], y observando en la misma figura el solapamiento de las funciones que intervienen en [22.4.10] y [22.4.11], resulta evidente que es mayor en las [22.4.11], por lo cual la energía de estos estados es mayor que la del estado [22.4.10].

EJERCICIOS

22.1. Encontrar la energía necesaria para arrancar uno de los electrones de un átomo de helio que se encuentra en su estado fundamental. Hacer uso del resultado obtenido en 22.4 con la teoría de perturbaciones.

22.2. En un átomo de helio, los vectores de posición de cada uno de los electrones respecto al núcleo son \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 , $r_1 > r_2$. Demostrar que si $r_{12} = r_1 - r_2$, se puede desarrollar:

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{r_1} \sum_{n=0}^{\infty} a_n P_n(\cos \alpha) \quad \alpha = \widehat{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}$$

con $a_n = x^n$, donde $x = r_2/r_1$ y P_n son los polinomios de Legendre.

22.3. Encontrar el elemento de matriz de $1/r_{12}$ entre funciones de ondas del estado fundamental del átomo de helio en la aproximación [22.3.5]. Razonar en unidades atómicas.

22.4. Suponer que uno de los electrones del átomo de He (el 1, por ejemplo) se mueve en el potencial del núcleo y en el promedio temporal del producido por el otro electrón, dando lugar a un potencial efectivo que se pide calcular en unidades atómicas.

22.5. A la vista del resultado del problema anterior, discutir el apantallamiento del efecto del núcleo por cada uno de los electrones.

23

Átomos multielectrónicos

José Luis Escudero
José Manuel Guerra

23.1. INTRODUCCIÓN

En el tratamiento del átomo del helio realizado en el capítulo anterior se ha podido constatar que se obtenían buenos resultados cualitativos si se despreciaba la interacción entre los dos electrones, pero para obtener resultados cuantitativos aceptables era preciso tener en cuenta de alguna manera esta interacción mutua electrónica; el procedimiento utilizado para este fin fue un método aproximado, comprobándose que daba mejor resultado el método variacional que el perturbativo, por las razones que ya fueron allí apuntadas.

Cuando crece el número de electrones, el problema de resolver la ecuación de Schrödinger del átomo multielectrónico se complica considerablemente, y si se quiere tener en cuenta la interacción entre los electrones, además de acudir al método variacional, es necesario hacer uso de procedimientos numéricos para la resolución de las ecuaciones que aparecen. Habitualmente, el problema se aborda mediante aproximaciones sucesivas al potencial de interacción electrónico a través de un método iterativo conocido como método de Hartree, en el cual las funciones de partida han de ser previamente encontradas en aproximación de un electrón.

En lo que sigue veremos con cierto detalle el desarrollo de los métodos indicados para el tratamiento de los átomos multielectrónicos.

23.2. APROXIMACIÓN DE UN ELECTRÓN

Consideraremos un átomo genérico de carga nuclear $|Ze|$ con N electrones; en general, $Z = N$ para poder extender el tratamiento a iones. Al ser muy pesado el núcleo en los átomos multielectrónicos, lo supondremos en reposo en este tratamiento. En estas condiciones, tomando el origen de coordenadas en el núcleo, llamando \mathbf{r} al vector de posición del i -ésimo electrón y:

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$$

la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, prescindiendo del espín y teniendo en cuenta tanto la interacción coulombiana nuclear como la de los demás electrones, toma la forma:

$$\left[\sum_{i=1}^N H_{0i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \sum_{j}^N V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right] \phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = E \phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)^1 \quad [23.2.1]$$

donde hemos llamado:

$$H_{0i} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \quad [23.2.2]$$

$$V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad [23.2.3]$$

Si en la ecuación [23.2.1] se prescinde de la interacción entre los electrones, se puede escindir en N ecuaciones de tipo hidrogenoide, de solución conocida. En este caso se obtendría la que se conoce como solución de orden cero como producto de las de cada electrón:

$$\phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \varphi_1(\mathbf{r}_1)\varphi_2(\mathbf{r}_2), \dots, \varphi_N(\mathbf{r}_N) \quad [23.2.4]$$

Las funciones [23.2.4] son adecuadas para ser utilizadas directamente como funciones de prueba en un método variacional, aunque sean de variables separadas, mientras que la ecuación [23.2.1] no es separable. Es por ello necesario plantear el método de manera que tenga en cuenta la interacción electrónica y permita separar las variables de los diversos electrones.

Si en un método variacional utilizásemos una función de prueba del tipo [23.2.4], el valor medio del hamiltoniano de la ecuación [23.2.1] sería:

$$\langle H \rangle = \sum_i \int \varphi_i^* H_{0i} \varphi_i d\mathbf{r}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_j \iint \varphi_i^* \varphi_j^* V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \varphi_j \varphi_i d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_j$$

Para minimizar $\langle H \rangle$ variaremos $\varphi_i^* \varphi_j^*$ dejando constante $\varphi_i \varphi_j$, es decir, variaremos los parámetros en $\varphi_i^* \varphi_j^*$, pero no en $\varphi_i \varphi_j$:

$$\delta \langle H \rangle = \sum_i \int \delta \varphi_i^* H_{0i} \varphi_i d\mathbf{r}_i + \sum_{i \neq j} \sum_j \int \delta \varphi_i^* \left[\int \varphi_j^* V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \varphi_j d\mathbf{r}_j \right] \varphi_i d\mathbf{r}_i \quad [23.2.5]$$

donde las variaciones $\delta \varphi_i^*$ no son independientes al tener que conservarse la norma de φ_i :

$$\int \delta \varphi_i^* \varphi_i d\mathbf{r}_i = 0$$

¹ El factor 1/2 en la expresión [23.2.1] tiene en cuenta la repetición de términos.

Esta ecuación de condición se puede incluir en [23.2.5] para resolver el problema de mínimo condicionado por el método de los multiplicadores de Lagrange, multiplicándola por el parámetro indeterminado $-E_i$:

$$\sum_i \int \delta\varphi_i^* \left[H_{0i} + \sum_{j \neq i} \int \varphi_i^* V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \varphi_j d\mathbf{r}_j - E_i \right] \varphi_i d\mathbf{r}_i = 0$$

Al hacer esto, las $\delta\varphi_i^*$ son independientes y tendrán que anularse sus coeficientes, quedando:

$$\left[H_{0i} + \sum_{j \neq i} \int \varphi_i^* V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \varphi_j d\mathbf{r}_j \right] \varphi_i = E_i \varphi_i \quad [23.2.6]$$

En esta expresión puede observarse que el potencial efectivo que experimenta el electrón i , que sustituye a los potenciales coulombianos que sobre él producen los demás electrones, es:

$$V(\mathbf{r}_i) = \sum_{j \neq i}^N \int \varphi_i^* V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \varphi_j d\mathbf{r}_j = \sum_{j \neq i}^N \int |\varphi_j|^2 V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j = \sum_{j \neq i}^N V_j(\mathbf{r}_i) \quad [23.2.7]$$

Para interpretar este potencial observaremos que la densidad de probabilidad $|\varphi_j|^2$ se puede entender como una distribución de la carga del electrón, de tal forma que la carga contenida en un volumen $d\mathbf{r}_j$ será:

$$\rho(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j = e |\varphi_j(\mathbf{r}_j)|^2 d\mathbf{r}_j$$

Esta carga producirá en el punto en que está la partícula i un potencial (véase figura 23.1):

$$dV_j(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{e^2 |\varphi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} d\mathbf{r}_j$$

y el potencial producido por toda la distribución de carga del electrón j en el punto en que se encuentra el i será:

$$V_j(\mathbf{r}_i) = \int \frac{e^2 |\varphi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} d\mathbf{r}_j \quad [23.2.8]$$

Es decir, que el potencial efectivo que afecta al electrón producido por el resto de los electrones es la suma de los potenciales producidos por las distribuciones de carga a que equivalen las funciones de ondas de estos electrones restantes.

Con esta aproximación de origen variacional, la ecuación [23.2.1] se convierte en N ecuaciones del tipo [23.2.6]:

$$[H_{0i} + V(\mathbf{r}_i)]\varphi_i(\mathbf{r}_i) = E_i \varphi_i(\mathbf{r}_i) \quad [23.2.9]$$

que por tener separadas las variables de los distintos electrones se conocen como aproximación de un electrón, y deben permitir la construcción de una solución del tipo [23.2.4].

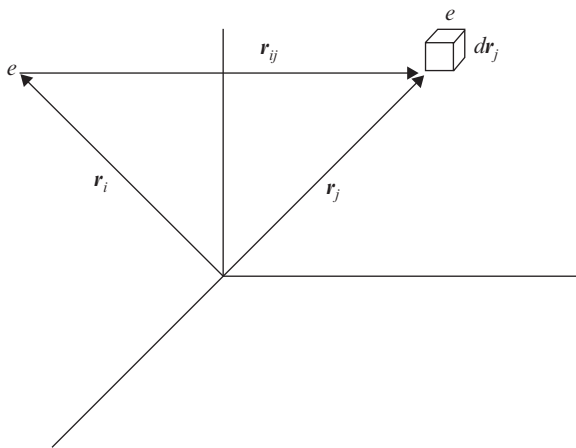


Figura 23.1. Efecto de la distribución de carga correspondiente al electrón j sobre el i .

23.3. MÉTODO DE HARTREE

En el apartado anterior hemos llegado a obtener la ecuación [23.2.9] correspondiente a un átomo multielectrónico en aproximación de un electrón, pero para integrar esta ecuación y obtener así las soluciones $\varphi_i(\mathbf{r}_i)$ es necesario conocer el potencial efectivo $V(\mathbf{r}_i)$, el cual, a su vez, depende de las $\varphi_i(\mathbf{r}_i)$. Para resolver esta ecuación íntegro-diferencial se acude a un método iterativo debido a Hartree. En este método se toman unas funciones, $\varphi_i^0(\mathbf{r}_i)$, de partida, por ejemplo, las soluciones hidrogenoides de orden cero:

$$H_{0i}\varphi_i^0(\mathbf{r}_i) = E_i^0(\mathbf{r}_i)$$

Con estas funciones se calcula el potencial o potenciales $V^0(\mathbf{r}_i)$ mediante la expresión [22.2.8]. Con los potenciales así obtenidos se resuelve la ecuación [22.2.9] obteniendo las soluciones de orden uno: $\varphi_i^{(1)}(\mathbf{r}_i)$. Estas soluciones permiten calcular los potenciales $V^1(\mathbf{r}_i)$ para, con ellos, obtener un nuevo grupo de soluciones, y así sucesivamente hasta obtener autoconsistencia, es decir, hasta que los potenciales y las soluciones se reproduzcan a sí mismos. Si las soluciones de partida $\varphi_i^0(\mathbf{r}_i)$ proceden de un potencial central, se generará un potencial efectivo también central, de esta manera todos los potenciales serán centrales y tendremos un potencial autoconsistente central:

$$V(\mathbf{r}_i) = V(\mathbf{r}_i) \quad [23.3.1]$$

Entonces las soluciones sólo diferirán de las hidrogenoides en la función radial, que será la que se calculará habitualmente:

$$\varphi_i(\mathbf{r}_i) = R_i(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad [23.3.2]$$

Así, cada $\varphi_i(\mathbf{r}_i)$ procede de una función hidrogenoide caracterizada por los números cuánticos del átomo de hidrógeno:

$$\varphi_{i_n, \ell, m}^0(\mathbf{r}_i) = R_{i_n}(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

Una vez conocidas las soluciones y el potencial autoconsistentes, se puede hallar la energía total del átomo:

$$\begin{aligned} E &= \int \phi^* H \phi \, d\mathbf{r}_1, \dots, d\mathbf{r}_N = \int \varphi_1^*, \dots, \varphi_N^* \left[\sum_i H_{0i} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right] \varphi_1, \dots, \varphi_N \, d\mathbf{r}_1, \dots, d\mathbf{r}_N = \\ &= \sum_i \int \varphi_i^* H_{0i} \varphi_i \, d\mathbf{r}_i + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \int \varphi_i^* \varphi_j^* V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \varphi_i \varphi_j \, d\mathbf{r}_i, d\mathbf{r}_j \end{aligned}$$

Haciendo uso de [23.2.7] y de [23.2.9], la energía puede ponerse en la forma:

$$E = \sum_i \left[E_i - \frac{1}{2} \int \varphi_i^* V(\mathbf{r}_i) \varphi_i \, d\mathbf{r}_i \right] \quad [23.3.3]$$

El principal reproche que puede hacerse a este método procede del hecho de no haber utilizado funciones de onda antisimetrizadas, con lo que desprecian las energías de canje. Sin embargo, este método de Hartree ha sido perfeccionado en este sentido por Fock partiendo de una función de prueba antisimétrica que incluye el espín:

$$\begin{aligned} \varphi_\lambda &= R_{i_n \ell} Y_\ell^m |s_z\rangle = \varphi_\lambda(\xi_i) \\ \lambda &= (n, \ell, m, s_z) \\ i &= (\mathbf{r}_i, \theta_i, \varphi_i, S_{zi}) \end{aligned} \quad [23.3.4]$$

La función de partida se construye mediante un determinante de Slater formado por las N funciones φ_λ situadas en las N posiciones ξ_i de los N electrones:

$$\phi(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\xi_1) & \varphi_1(\xi_2) & \dots & \varphi_1(\xi_N) \\ \varphi_2(\xi_1) & \varphi_2(\xi_2) & \dots & \varphi_2(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_N(\xi_1) & \varphi_N(\xi_2) & \dots & \varphi_N(\xi_N) \end{vmatrix} \quad [23.3.5]$$

El cálculo es ahora más complicado, pero esencialmente análogo al de Hartree y tiene en cuenta el potencial efectivo de canje que antes había sido despreciado.

23.4. CLASIFICACIÓN DE LOS ORBITALES ATÓMICOS

Volviendo a las ecuaciones [23.2.12] de la aproximación de un electrón, podemos observar que son ecuaciones de Schrödinger en las que el potencial total es el coulombiano más el potencial promedio; difieren de las hidrogenoides en que el potencial central total no es coulombiano. Las soluciones autoconsistentes obtenidas con los métodos descritos serán, por tanto, como las hidrogenoides desde el punto de vista de su dependencia angular, y los métodos autoconsistentes calcularán, en definitiva, el potencial efectivo y la parte radial de las soluciones para un electrón.

En la resolución de la ecuación radial se parte de una función radial que en aproximación de orden cero corresponderá a ciertos valores de n y ℓ . La parte angular, que no cambia, estará caracterizada por estos mismos números cuánticos. Entonces, como en el caso del átomo de H, los orbitales se clasificarán en primer lugar por el valor de sus números: n , ℓ , m_ℓ , m_s . Los electrones se habrán de disponer en las diferentes capas de acuerdo con el principio de Pauli, con lo que es fácil comprobar que en la capa n cabrán:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell + 1) = 2n^2 \quad [23.4.1]$$

Esta distribución de los electrones ha de tenerse en cuenta al escoger las funciones de orden cero para el planteamiento del método autoconsistente.

Definiendo la probabilidad radial $P_{n\ell}(r)$ como en el átomo de hidrógeno y sumando para todos los electrones, obtendremos la distribución radial de electrones:

$$P(r) = \sum_n \sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell + 1)P_{n\ell}(r) \quad [23.4.2]$$

En la figura 23.2 se representa esta distribución para el átomo de Ar ($Z = 18$), en la que se aprecian bien las capas de $n = 1$, 2 y 3.

Por otra parte, el potencial efectivo, suma del coulombiano y el potencial promedio en aproximación de un electrón, se puede utilizar para definir el número efectivo de carga nuclear en la forma:

$$V_{\text{ef}} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + V(r) = -\frac{Z(r)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad [23.4.3]$$

La definición [23.4.3] permite aproximar en cada capa el potencial efectivo por un potencial coulombiano en que el número de carga nuclear es el que corresponde al radio medio de la capa:

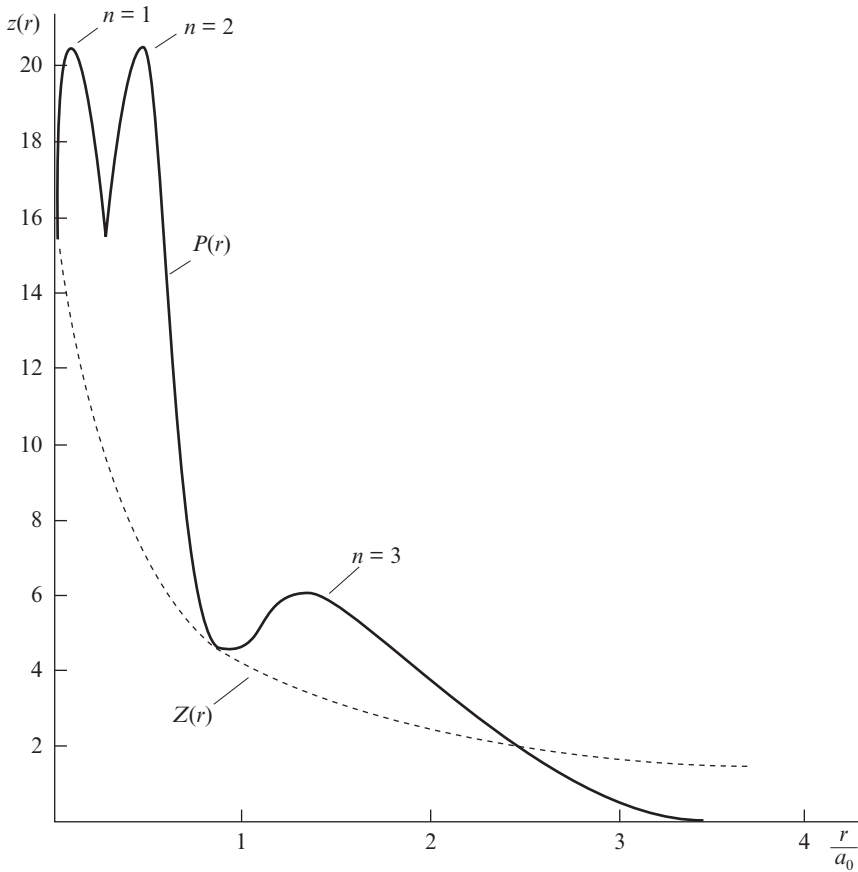


Figura 23.2. Distribución radial de probabilidad en el átomo de Argón. Se representa también $Z(r)$ para el mismo átomo.

$$(V_{ef})_n = -\frac{Z(r_n)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad [23.4.4]$$

para el cual: $Z(r_1) = 16$; $Z(r_2) = 8$; $Z(r_3) = 3$. En la misma figura 23.2 se ha representado también la curva $Z(r)$ para el átomo de Argón.

Con esta aproximación se puede calcular la energía de cada capa como si el potencial fuera coulombiano con $Z = Z_{ef}$, con lo que para el Ar se obtiene:

$$E_1 = -3500 \text{ eV} \quad E_2 = -2200 \text{ eV} \quad E_3 = -14 \text{ eV}$$

En general $Z(r_1) = Z - 2$, lo cual se explica por el mutuo apantallamiento de los dos electrones de la primera capa y la influencia mucho menor del resto de los electrones, que

prácticamente cancelan sus efectos sobre esta primera órbita. Como consecuencia de esto el radio de la primera órbita de un átomo multielectrónico será:

$$\bar{r}(n = 1) = \frac{a_0}{Z - 2}$$

Este resultado deja de ser correcto cuando la energía de esta órbita es comparable a la de masa del electrón ($mc^2 = 5 \times 10^5$ eV), en cuyo caso hay que considerar efectos relativistas.

Por otro lado, para los electrones más externos, el apantallamiento de los demás es tan elevado que no se diferencian demasiado de los del átomo de hidrógeno ($Z(r_n) = n$). Como consecuencia de ello el radio de la capa más externa crece muy lentamente con Z , hasta el punto de que en el átomo más complejo no llega a ser mayor de $3a_0$:

$$\bar{r} = \frac{n^2 a_0}{Z(r_n)} \approx na_0$$

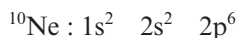
resultado que, sin embargo, difiere del real.

Equivalentemente, la energía en la última capa es del orden de la de la primera órbita del hidrógeno. Estos electrones se conocen como electrones ópticos, ya que en todos los átomos sus energías son parecidas y dan lugar a radiación de fotones con energías entre 1 y 10 eV aproximadamente.

En definitiva, podríamos imaginar que cuando se aumentan los electrones, el átomo aumenta el número de capas internas, acercándolas cada vez más entre sí, mientras que su diámetro total apenas aumenta. Asimismo, la energía varía mucho más rápidamente con el número de electrones a valores pequeños de n que a valores altos.

23.5. CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA. TABLA PERIÓDICA

La teoría de Hartree que acabamos de estudiar no tiene en cuenta la estructura de acoplos, por lo que los números cuánticos que caracterizarán a cada subcapa serán solamente el n y el ℓ . En el proceso de añadir electrones a los átomos más ligeros para obtener los más pesados, los electrones añadidos irán llenando las diferentes subcapas respetando el principio de exclusión de Pauli en su formulación débil. En cada subcapa n , ℓ el número máximo de electrones será $2(2\ell + 1)$ y las diferentes subcapas se llenarán progresivamente en orden de energías crecientes. La especificación de los electrones de cada subcapa se conoce como «configuración electrónica» del elemento de que se trata y se escribe con una notación como la del siguiente ejemplo, que corresponde al átomo de neón (10 electrones):



El orden de energías crecientes de las subcapas es el indicado en la figura 23.3. En ella se observa que con frecuencia predomina en la última capa el efecto de menor ℓ sobre el valor de n , mientras que cuanto más interna es la capa más predominante es la dependencia de la energía con n .

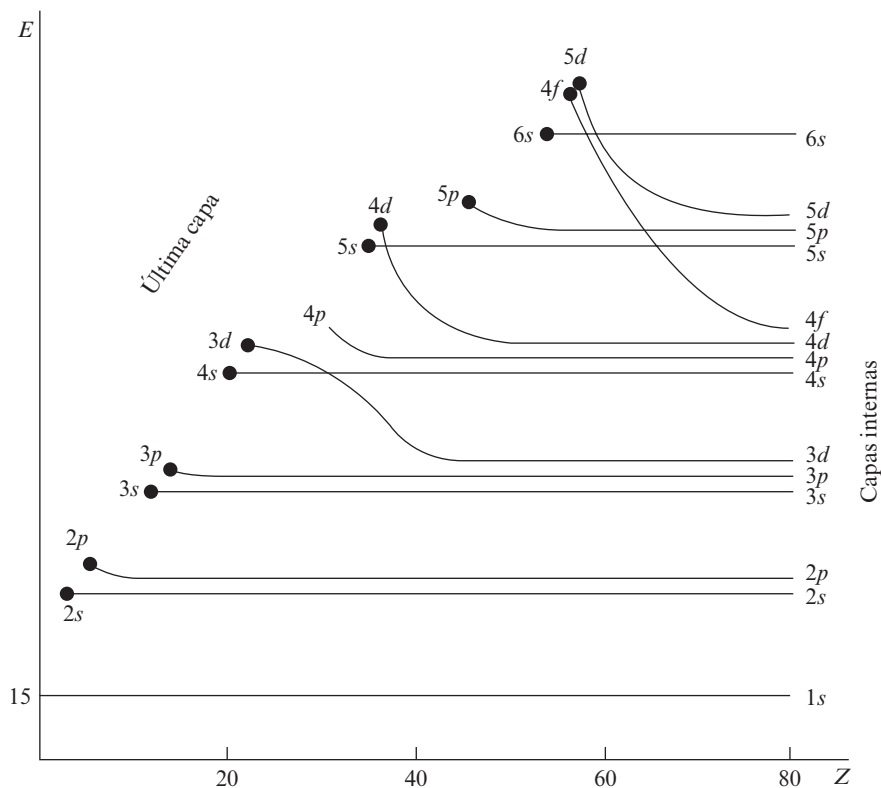


Figura 23.3. Orden de energía de las subcapas atómicas.

Las configuraciones electrónicas se reflejan en la tabla periódica de los elementos (véase tabla 26.1), en la que se puede observar que la ordenación realizada por números atómicos Z y por propiedades químicas coincide con el relleno sucesivo de subcapas electrónicas en orden de energías crecientes, regla que, sin embargo, presenta algunas excepciones en aquellos casos en los que las energías de dos subcapas son tan parecidas que pueden aparecer intercambiadas en algunos casos particulares. El caso contrario ocurre en los gases nobles (salvo el helio), en los que se termina de llenar una capa p muy alejada energéticamente de la siguiente capa s , lo que explica que sean tan difíciles de excitar.

En las tierras raras las capas f se están llenando debajo del máximo radial de la respectiva capa s que se acaba de llenar, por lo que las propiedades químicas de estos elementos son muy parecidas.

La explicación de la tabla periódica de los elementos es una confirmación de la validez de la teoría de Hartree, como lo es también la explicación de los espectros de rayos X (apartado 23.10).

TABLA 23.1

Configuración electrónica de la última capa de los átomos alcalinos, con indicación de la separación energética de cada doblete

${}^3\text{Li}$ ${}^2\text{P}$	${}^{11}\text{Na}$ ${}^3\text{P}$	${}^{19}\text{K}$ ${}^4\text{P}$	${}^{37}\text{Rb}$ ${}^5\text{P}$	${}^{55}\text{Cs}$ ${}^6\text{P}$	Última capa con $L \times S$
0.42×10^{-4}	21×10^{-4}	72×10^{-4}	295×10^{-4}	687×10^{-4}	$\Delta E_{s\ell}$ (eV)
	${}^3\text{P}_{3/2}$ ${}^3\text{P}_{1/2}$				

23.6. ACOPLOS RESIDUALES

Como ya hemos visto, el tratamiento de los átomos multielectrónicos requiere el estudio progresivo de las diversas interacciones jerarquizadas en orden a su magnitud e importancia. La aproximación más elaborada que hemos utilizado ha sido la del potencial de Hartree, en la que se consideran la interacción coulombiana del núcleo y el promedio central de las interelectrónicas. Esta aproximación es adecuada para el tratamiento de los electrones más internos, pero resulta demasiado elemental para el tratamiento de los electrones ópticos, para los que hay que considerar fenómenos de menor orden si se quieren obtener resultados comparables a los experimentales, en concreto en lo que se refiere a la explicación de los espectros de absorción y emisión ópticos, de los que son responsables los electrones más externos. En este estudio, los electrones de las capas internas forman un «corazón» con estructura de gas noble y, por tanto, inerte. Apantallados por el corazón se encuentran los electrones de la última capa, cuyo comportamiento pretendemos estudiar.

El caso más sencillo de tratar es el de los átomos alcalinos y la plata, que poseen un único electrón en la última capa que, en aproximación de Hartree, vendrá descrito por los números cuánticos n y ℓ . En la figura 23.4 se representan los niveles de Hartree del hidrógeno y de los dos primeros átomos alcalinos (Li y Na) tomando el origen de energías cuando el electrón óptico está en el infinito. Puede verse en esta figura que los niveles muy excitados tienden a coincidir para los tres átomos; lógico, pues estos orbitales están suficientemente alejados del centro como para que la única carga no apantallada del núcleo sea la $+e$, como en el caso del H.

La primera corrección que vamos a considerar a la aproximación de Hartree va a ser la relativista: de acuerdo con la teoría de Bohr, la velocidad del electrón en la órbita n es:

$$v = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 n\hbar}$$

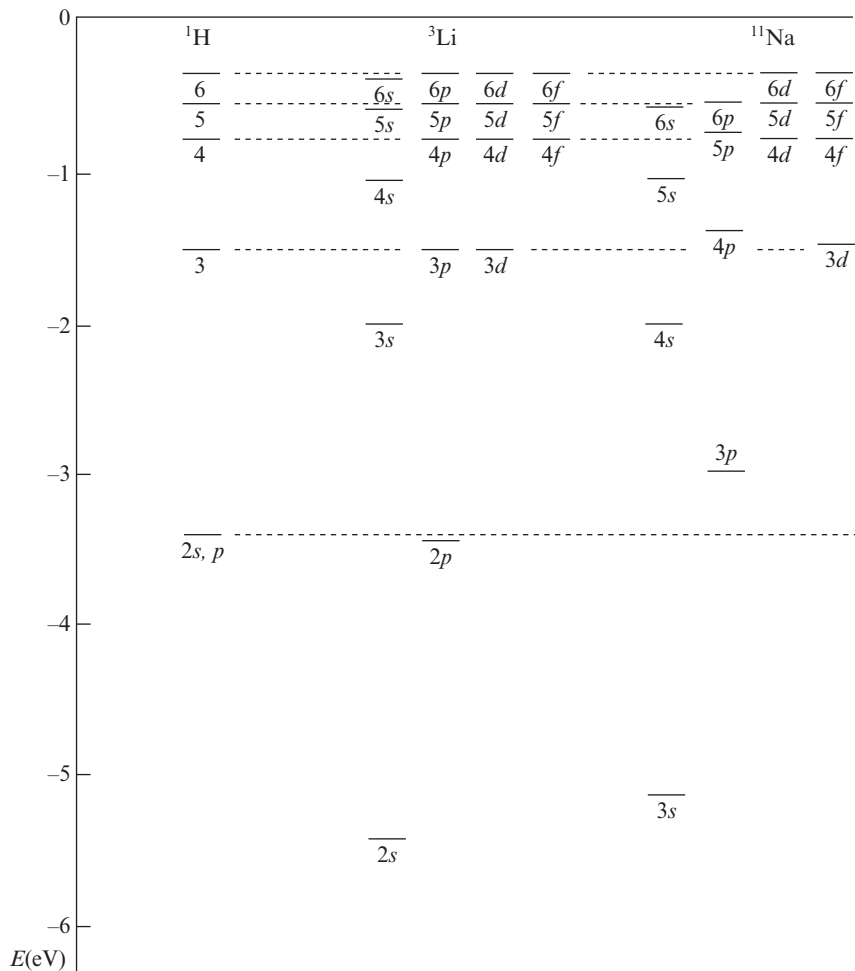


Figura 23.4. Niveles de energía de Hartree para el hidrógeno, el litio y el sodio.

en aproximación del número atómico efectivo, para el electrón de la última capa, $Z_n \approx n$:

$$v \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} = \alpha c \approx 10^{-2} c$$

que es la misma que para el H; por tanto, la misma para todos los átomos.

En segundo lugar deberemos tener en cuenta el acoplamiento espín-órbita, con lo que los números cuánticos que describirán ahora a este último electrón serán: n, ℓ, m_ℓ, m_s o n, ℓ, j, m_j . En notación espectroscópica, el estado resultante suele expresarse en la forma:

$$n^{2S+1}(\ell)_j$$

de manera que en aquellos átomos con un electrón óptico cada nivel n, ℓ se transforma en un doblete por la interacción espín-órbita, salvo si $\ell = 0$, en cuyo caso:

$$\left. \begin{array}{l} \ell = 0 \\ s = \frac{1}{2} \end{array} \right\} j = \frac{1}{2} \quad {}^2S_{1/2} \quad \begin{array}{l} \rightarrow m_j = \frac{1}{2} \\ \rightarrow m_j = -\frac{1}{2} \end{array}$$

La separación energética entre los dos niveles del doblete es por [19.5.6]:

$$\Delta E_{SL} = E_{n, \ell, \ell+1/2} - E_{n, \ell, \ell-1/2} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} (2\ell + 1) \int_0^\infty r^2 R_{n\ell}^2 \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) dr \quad [23.6.1]$$

En la tabla 23.1 se dan los valores de esta separación calculados con [23.6.1] para los átomos alcalinos.

Las transiciones ópticas entre estos niveles siguen las mismas reglas de selección que en los átomos hidrogenoides:

$$\Delta \ell = \pm 1 \quad \Delta j = \pm 1$$

Como la corrección relativista es del orden de la del hidrógeno en todos los casos, podremos prescindir de ella en prácticamente todos los cálculos, y ya no hay más interacciones débiles a considerar en este tipo de átomos, ya que su único electrón está en el campo esféricamente simétrico que producen el núcleo y la estructura de gas noble de las capas internas.

Vamos ahora a estudiar el caso más complejo de aquellos átomos que contienen en la última capa más de un electrón, en la cual todos los electrones son ópticamente activos y se acoplan entre sí mediante diferentes interacciones, que ahora describiremos, actuando como un único sistema físico dotado de unos números cuánticos propios del conjunto.

En la aproximación de Hartree el orbital de cada electrón independiente corresponde a una energía caracterizada por los números cuánticos n y ℓ . A éstos hay que añadir, para aplicar el principio de exclusión de Pauli, los números cuánticos m_ℓ y m_s . Es decir, en cada subcapa n, ℓ hay $2(2\ell + 1)$ estados degenerados en la aproximación de un electrón de Hartree.

Para los electrones de la última capa o electrones ópticos esta degeneración se verá removida al tener en cuenta otras interacciones más débiles que la aproximación de Hartree no considera.

El primero de estos efectos de orden superior procede del hecho de que el potencial real a que está sometido el electrón de una capa semillena o semivacia no es esféricamente simétrico, sino que tiene simetría cilíndrica. Este potencial se aparta, por tanto, ligeramente del potencial esféricamente simétrico y autoconsistente de Hartree.

Las distribuciones de carga electrónica que tienen simetría cilíndrica ejercen entre sí pares de fuerza de origen coulombiano que tienden a orientar las distribuciones de for-

ma que coincidan los ejes de simetría. Como en un armónico esférico el momento angular tiene la dirección del eje de simetría, esta interacción tiende a poner los momentos angulares de los electrones de la última capa paralelos. El efecto puede entenderse en una imagen clásica en el caso de dos electrones (véase figura 23.1). Sus órbitas clásicas tendrán su orientación más estable si están en el mismo plano y los electrones giran en fase en los extremos opuestos del mismo diámetro. Es decir, que la situación de menor energía corresponderá al caso en que los dos electrones estén lo más alejados posible entre sí. En este caso, los momentos angulares orbitales serán paralelos y tendrán el mismo sentido.

Esta interacción acopla, por tanto, los momentos angulares entre sí para dar un momento angular orbital total L :

$$L = L_1 + L_2 + \dots + L_i + \dots$$

Por otra parte, ya hemos visto que en el átomo de He, como consecuencia de la antisimetrización de la función de onda del conjunto de los dos electrones, por efecto de la interacción coulombiana mutua, poseían distinta energía los estados con la parte espacial simétrica (espines antiparalelos) que los de la parte espacial antisimétrica (espines paralelos). Esta energía, por tanto, equivale a un acoplo de los momentos de espín de los electrones entre sí, correspondiendo la menor energía al estado en que es menos probable encontrar juntos a los electrones, o sea, cuando la función de ondas espacial es antisimétrica y, por tanto, los espines son paralelos. Tenemos así un espín total S que es:

$$S = S_1 + S_2 + \dots + S_i + \dots$$

Los dos efectos descritos se dice que son consecuencia de acopios residuales de Coulomb.

El otro efecto ya lo hemos tratado en el átomo de hidrógeno y considerado en los átomos alcalinos. Es el acoplo espín-órbita de origen magnético debido a la interacción de los momentos magnéticos asociados a los momentos angulares orbitales y de espín.

23.7. ACOPLLO RUSSELL-SAUNDERS

En los átomos ligeros ($Z < 30$), como se vio en el caso de los metales alcalinos, la energía de acoplo espín-órbita es pequeña y predominan las energías asociadas a los acoplos residuales de Coulomb. Dentro de éstos, a su vez, el más fuerte es el que acopla a los espines y después el que acopla a los momentos orbitales. Podemos entonces considerar en primer lugar acoplados los espines de todos los electrones para dar el momento total de espín S . Después se acoplan los momentos orbitales, resultando el momento total orbital L .

En estos acoplos S^2 conmuta con todas las componentes S_i , con L^2 y con el hamiltoniano total. También L^2 conmuta con todas las componentes L_i , con los operadores de espín y con el hamiltoniano. Por tanto, los operadores L^2 y S^2 formarán parte del conjun-

aproximación de un electrón. Sólo en esta aproximación cada electrón ocupa individualmente un estado, y se pueden excluir los estados del conjunto en que dos o más electrones ocupen el mismo estado.

Para fijar ideas sobre los posibles términos espectrales de un acoplo Russell-Saunders cuando no hay posibilidad de violar el principio de exclusión de Pauli, vamos a considerar el caso de dos electrones ópticos, uno en la última capa y otro en la siguiente excitada de manera que tengan distinto, al menos, el número cuántico n .

Así, en la configuración Hartree $3d^1 4p^1$ resultan los niveles de la figura 23.5, puesto que:

$$s = s_1 + s_2, \dots, |s_1 - s_2|$$

$$\ell = \ell_1 + \ell_2, \dots, |\ell_1 - \ell_2|$$

$$j = \ell + s, \dots, |\ell - s|$$

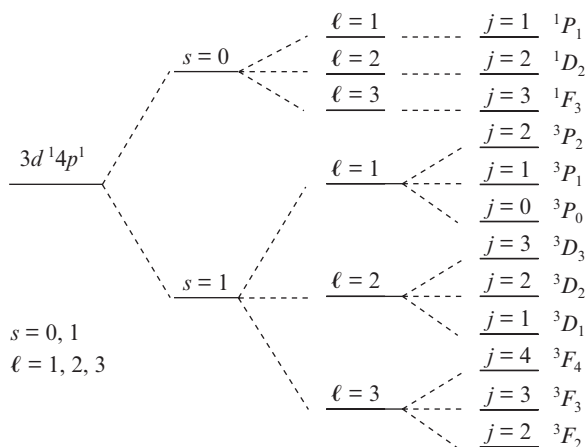


Figura 23.5. Descomposición de la configuración $3d^1 4p^1$ hasta considerar el acoplo Russell-Saunders.

El estado de menor energía en los acoplos residuales es, como hemos razonado, el de mayor valor de s y de ℓ . En el acoplo magnético, la menor energía se tiene cuando los momentos magnéticos son antiparalelos y, por tanto, corresponde al menor valor de j .

En el ejemplo precedente estas circunstancias concurren en el estado o término espectral 3F_2 .

Empleando la fórmula de la energía de los estados de la base estándar calculada para el acoplo espín-órbita en el hidrógeno, se ve fácilmente que entre los estados del acoplo Russell-Saunders del mismo multiplete caracterizado por los valores de n , ℓ y s se cumple, por la ecuación [19.5.6]:

$$E_{n, \ell, s, j+1} - E_{n, \ell, s, j} = 2k(j+1) \quad ; \quad k \neq k(j) \quad [23.7.1]$$

Es decir, que el intervalo energético entre dos niveles contiguos es proporcional al valor de j en el más energético. Ésta es la llamada regla del intervalo de Landé, y se utiliza para saber cuándo un multiplete es del tipo Russell-Saunders.

Ahora veremos que de todos los posibles estados o términos espectrales de un acoplo Russell-Saunders en que los electrones están en la misma capa y subcapa Hartree hay algunos que violan el principio de exclusión.

Consideremos, a título de ejemplo, una configuración Hartree np^2 ; en ella los números cuánticos individuales n, ℓ, s de los dos electrones coinciden, es decir:

$$\begin{aligned} n_1 &= n_2 = n \\ \ell_1 &= \ell_2 = \ell \\ s_1 &= s_2 = 1/2 \end{aligned}$$

por tanto, para cumplir el principio de exclusión en la aproximación de un electrón deberán diferir en los valores de los números cuánticos magnéticos m_ℓ y m_s . Para hallar las combinaciones que cumplen esta condición podemos construir la tabla 23.2. En ella los 15 estados caracterizados por las combinaciones de $m_{\ell_1}, m_{\ell_2}, m_{s_1}, m_{s_2}$, que corresponden a las casillas a la derecha de la diagonal, son todos los que se pueden construir sin que los dos electrones tengan coincidencias totales en estos cuatro números cuánticos magnéticos. Las casillas de la izquierda tienen las mismas combinaciones que las de la derecha y las de la diagonal violan el principio de exclusión, ya que en los estados que representan, evidentemente, los cuatro números cuánticos magnéticos son iguales. Ahora tenemos las combinaciones de los números cuánticos magnéticos m_ℓ, m_s y m_j del acoplo Russell-Saunders que no violan el principio de exclusión; a partir de ellas se pueden saber los términos espectrales a que pertenecen. Así, observamos que el mayor valor de m_ℓ es 2, lo que supone un término D que aparece asociado a $m_s = 0$ y $m_j = 2$; por tanto, el término sólo puede ser el 1D_2 . Este término contiene cinco de las combinaciones de la tabla con los valores $m_j = 2, 1, 0, -1, -2$. Por otra parte, el mayor valor de m_s es 1 y aparece asociado como mucho al valor $m_\ell = 1$, lo cual supone un término 3P , y como en esta combinación $m_j = 2$, el término será $^3P_2, ^3P_1$ o 3P_0 , ya que con los mismos valores de ℓ y s, j puede tomar los valores:

$$j = \ell + s, \dots, |\ell - s|$$

que en este caso serían:

$$j = 2, 1, 0$$

Tenemos, pues, nueve estados más identificados de los 15 permitidos; queda sólo un estado, que podrá ser solamente un término con $\ell = 0, s = 0$ y $j = 0$, ya que es único, el 1S_0 . De esta manera el diagrama de niveles o términos espectrales permitidos será el de la figura 23.6.

Como vemos, los niveles permitidos son muchos menos que los que podría haber si no se considerase el principio de exclusión. Cuando, como en el ejemplo anterior, hay dos electrones en la misma subcapa, sólo son posibles los términos espectrales en que se cumpla:

$$s + \ell = \text{par}$$

TABLA 23.2
Diferentes estados de un acoplo Russell-Saunders

	m_{ℓ_1}	1		0		-1	
m_{ℓ_2}	m_{s_1} m_{s_2}	1/2	-1/2	1/2	-1/2	1/2	-1/2
1	1/2	m_s 0	2	1	0	1	0
	-1/2	m_{ℓ} 2	2	1	1	0	0
0	1/2	m_j 2	2	1	1	1	0
	-1/2			0	-1	0	-1
-1	1/2			1	0	0	-1
	-1/2			1	1	0	0
0	1/2				0	1	0
	-1/2				0	-1	-1
-1	1/2				0	0	-1
	-1/2					-1	-1
-1	1/2					-1	-2
	-1/2						0

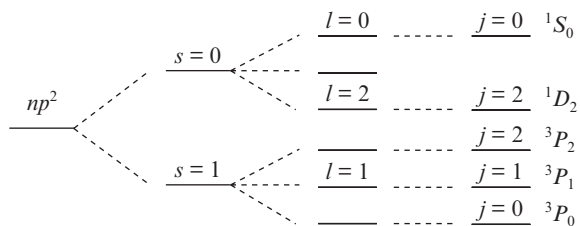


Figura 23.6. Términos espectrales permitidos de la configuración p^2 .

El análisis de los estados que respetan el principio de exclusión puede ser bastante complicado cuando el número de electrones en la subcapa es mayor de 2; no obstante, se simplifica el problema considerablemente si se tiene en cuenta que, a partir de que la sub-

capa está más llena de la mitad, los estados permitidos del acoplo se pueden obtener acoplando los huecos que faltan para llenar la subcapa, dotados de los mismos números cuánticos que los electrones de la subcapa.

En cualquier caso, en la tabla 23.3 se han detallado los términos espectrales permitidos en todas las configuraciones Hartree que se pueden dar en la práctica.

TABLA 23.3

ns^0	1S				
ns^1		2S			
ns^2	1S				
np^0	1S				
np^1		2P			
np^2	$^1S, ^1D$		3P		
np^3		$^2P, ^2D$		4S	
np^4	$^1S, ^1D$		3P		
np^5		2P			
np^6	1S				
nd^0	1S,				
nd^1		2D			
nd^2	$^1S, ^1D, ^1G$			$^3P, ^3F$	
nd^3		$^2D, ^2P, ^2D, ^2F, ^2G, ^2H$			$^4P, ^3F$
nd^4	$^1S, ^1D, ^1G, ^1S, ^1D, ^1G, ^1H, ^1I$			$^3P, ^3F, ^3P, ^3D, ^3F, ^3G, ^3H$	5D
nd^5		$^2D, ^2P, ^2D, ^2F, ^2G, ^2H, ^2S, ^2D, ^2F, ^2G, ^2I$		$^4P, ^2F, ^4D, ^4G$	6S
nd^6	$^1S, ^1D, ^1G, ^1S, ^1D, ^1G, ^1H, ^1I$			$^3P, ^3F, ^3P, ^3D, ^3F, ^3G, ^3H$	5D
nd^7		$^2D, ^2P, ^2D, ^2F, ^2G, ^2H$		$^4P, ^4F$	
nd^8	$^1S, ^1D, ^1G$			$^3P, ^3F$	
nd^9		2D			
nd^{10}	1S				

Tomando el diagrama de niveles o términos espectrales permitidos del acoplo Russell-Saunders se pueden analizar las transiciones ópticas entre ellos. Las reglas de selección en estas transiciones se refieren, por un lado, a los cambios en los números cuánticos individuales en la aproximación de un electrón, y, por otro, a los cambios en los números cuánticos del acoplo. Se tienen así las siguientes reglas:

1. Sólo son posibles las transiciones que en la aproximación de un electrón suponen la transición de un único electrón cuando se efectúa de una subcapa a otra.

2. En el cambio de subcapa sólo puede cambiar el número cuántico individual de Hartree ℓ_i en una unidad:

$$\Delta\ell = \pm 1$$

3. Sólo son posibles las transiciones en que cambien los números cuánticos del acoplo en:

$$\Delta s = 0$$

$$\Delta\ell = 0, \pm 1$$

$$\Delta j = 0, \pm 1 \text{ (excepto de } j = 0 \text{ a } j = 0)$$

Si los átomos están en presencia de un campo magnético, se produce el efecto Zeeman en la misma forma que en los átomos hidrogenoides empleando los números cuánticos del acoplo Russell-Saunders en lugar de los del espín-órbita.

Así, la energía magnética que se añade a la electrónica del nivel es como entonces:

$$E_n = \frac{heB}{4\pi m} m_j g$$

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

utilizando en las transiciones entre estos niveles la regla de selección:

$$\Delta m_j = 0, \pm 1$$

Es interesante apuntar que aunque en el estado fundamental de la aproximación de un electrón de Hartree el acoplo Russell-Saunders sólo se produce en los átomos ligeros, también el acoplo en las configuraciones Hartree excitadas es, a veces, éste, aunque los átomos no sean ligeros.

23.8. ACOPLLO JJ

Como ya hemos dicho, a partir de $Z = 30$ resulta dudosa la interpretación de los multipletes sobre la base del acoplo Russell-Saunders; claramente, a partir de $Z = 50$ puede interpretarse el acoplo de los electrones ópticos en una filosofía en que predomina el acoplo magnético de los momentos orbital y de espín de cada electrón sobre las interacciones residuales y de canje. En este caso cada electrón actúa con un momento total J_i ; suma del orbital y el de espín en el estado Hartree:

$$J_i = L_i + S_i$$

Los operadores J_i^2 conmutan con el hamiltoniano de Hartree y entre sí sustituyendo a los operadores L^2 y S^2 del acoplo Russell-Saunders, con los autovalores:

$$J_i^2 = j_i(j_i + 1)\hbar^2$$

A través de las interacciones residuales resultan a su vez acoplados los momentos J_i , sumándose para dar el momento J total del conjunto de los electrones ópticos:

$$J = J_1 + J_2 + \dots + J_i + \dots$$

Como es usual en la interacción magnética, la energía es menor cuando los momentos magnéticos asociados a los momentos angulares L_i y S_i se acoplan en sentido antiparalelo, es decir, para el menor valor de j_i . En el acoplo residual la energía depende del autovalor j de J , pero no es posible predecir a priori cuándo será menor.

Los operadores J^2 y J_z conmutan con el hamiltoniano de Hartree y con los momentos angulares J_i^2 , constituyendo entre todos un conjunto completo de observables que conmutan. Como los números cuánticos que caracterizan a los estados de la base común son los j_i , j y m_j , la notación que designa a estos estados o términos espectrales es:

$$(j_1, j_2, \dots, j_i, \dots)_j$$

y a este tipo de acoplamiento se le conoce como acoplo JJ.

Como en el caso del acoplo Russell-Saunders, el número de estados obtenidos en el acoplo JJ es el mismo que tiene la base producto de la aproximación de un electrón de Hartree, de forma que a cada multiplete Russell-Saunders le corresponde en átomos más pesados con la misma estructura Hartree, un multiplete JJ con el mismo número de estados. En la figura 23.7 está representado el cambio de una a la otra clase de multipletes al cambiar el número atómico Z con una configuración Hartree excitada p^1s^1 , es decir, en la que:

$$\begin{aligned} \ell_1 &= 1 & \ell_2 &= 0 \\ s_1 &= 1/2 & s_2 &= 1/2 \end{aligned}$$

El primer átomo de esta configuración excitada es el ${}^6\text{C}$ y el último el ${}^{82}\text{Pb}$. Los valores de j_1 y de j_2 serán:

$$\begin{aligned} j_1 &= 3/2, 1/2 \\ j_2 &= 1/2 \end{aligned}$$

y tenemos así los cuatro términos espectrales Russell-Saunders:

$${}^1\text{P}_1 \quad {}^3\text{P}_2 \quad {}^3\text{P}_1 \quad {}^3\text{P}_0$$

y los cuatro del acoplo JJ:

$$(3/2, 1/2)_1 \quad (3/2, 1/2)_2 \quad (1/2, 1/2)_1 \quad (1/2, 1/2)_0$$

Puede observarse en la figura 23.7 que la energía depende de j en ambos acoplos de manera diferente.

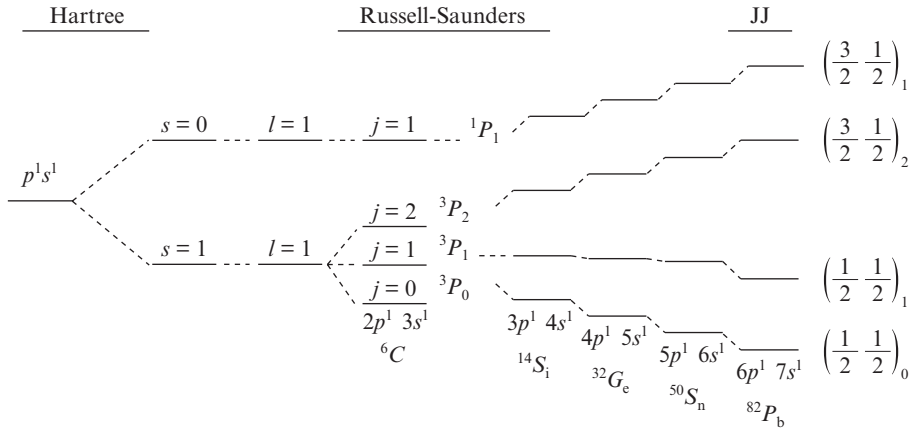


Figura 23.7. Comparación entre los niveles obtenidos en un acople Russell-Saunders y en el JJ de la misma configuración.

Si los electrones están en la misma subcapa de Hartree, hay que eliminar los términos espectrales que no cumplan el principio de exclusión de una forma análoga a como se hizo en el acople Russell-Saunders. Para ello, en las tablas se han de buscar las combinaciones permitidas de los números cuánticos $m_{j_1} \dots m_{j_i}$ y m_j y, a partir de ellas, obtener los términos espectrales $(j_1, \dots, j_i)_j$ permitidos. Lo más sencillo es partir del multiplete equivalente Russell-Saunders (figura 23.7).

Las reglas de selección para los números cuánticos y la estructura Hartree son las mismas que en las transiciones entre niveles del acople Russell-Saunders. En lo que se refiere a las variaciones de los números cuánticos propios del acople JJ, tendremos que serán permitidas las transiciones en que:

$$\Delta j_i = 0, \pm 1$$

si se realizan entre subcapas pertenecientes al mismo valor n del número cuántico principal, y:

$$\Delta j_i = 0$$

para las demás transiciones, siendo la regla de selección para j la usual.

23.9. ESTRUCTURA HIPERFINA

Como hemos visto, los electrones ópticos se acoplan para dar un momento angular total J al que va asociado un momento magnético de una magnitud comparable al magnetón de Bohr electrónico:

$$M_{Be} = \frac{he}{4\pi m}$$

Éstos son en muchos átomos los momentos totales atómicos, pues las capas internas cerradas tienen sus momentos nulos. En estos casos, al momento total J se le llama espín atómico.

Ahora bien, además de los electrones, en el átomo se encuentra el núcleo, que se comporta como una partícula masiva dotada de carga positiva $|Ze|$ y con frecuencia de un momento angular no nulo o espín nuclear I .

Lo mismo que J , el espín nuclear lleva asociado un momento magnético cuya magnitud es comparable al magnetón nuclear:

$$M_{\text{Bn}} = \frac{he}{4\pi M}$$

donde $M \approx 1836 m$ es la masa del protón y m la del electrón. Vemos entonces que los momentos magnéticos nucleares son muy pequeños comparados con los electrónicos. A pesar de su pequeña magnitud, el espín nuclear se acopla con el momento total J de los electrones ópticos en un acoplo que es básicamente análogo al acoplo espín-órbita para dar lugar al espín atómico F :

$$F = J + I$$

De esta forma, los niveles caracterizados por el valor del número cuántico j se excinden en multipletes hiperfinos cuyos estados estarán representados por los números cuánticos j, i, f , constituyendo una base de tipo estándar. Estos niveles, por tanto, verificarán, en principio, la regla del intervalo de Landé para los términos con los mismos valores de j e i .

Con frecuencia se observan en los multipletes hiperfinos discrepancias con la regla del intervalo, lo cual es indicio de que la interacción de acoplo no es sólo la dipolar magnética del tipo espín-órbita, sino que hay contribuciones apreciables de estructuras multipolares eléctricas o magnéticas. Estudiando las anomalías hiperfinas se puede, pues, obtener información de los momentos multipolares nucleares.

Como la energía de acoplo hiperfino es tan pequeña, su estudio experimental requiere el empleo de espectroscopios con muy alta resolución.

Por otra parte, la separación entre los niveles hiperfinos viene dada por las mismas fórmulas que la separación entre niveles de la estructura fina de los átomos hidrogenoides y alcalinos. Así, en los casos en que tenemos dos niveles hiperfinos en los que $m_j = 0$, la separación entre ambos es independiente del campo magnético externo (por ejemplo, el terrestre). Esto significa que la diferencia de energía entre los dos niveles hiperfinos mencionados es invariable frente a interacciones exteriores y, por tanto, los fotones producidos en la transición electromagnética entre estos niveles será de una frecuencia inalterable que puede ser utilizada como patrón. La pequeña separación energética de los dos niveles hiperfinos corresponde a frecuencias de microondas, es decir, a longitudes de onda del orden de los centímetros. Por tanto, la realización de un reloj patrón con este sistema requiere poner en resonancia el generador de microondas con los dos niveles hiperfinos de $f = 0$ de un átomo (usualmente el Cs) y medir la frecuencia de resonancia, cosa que puede realizarse con gran precisión.

Éste es el principio en que están basados los relojes atómicos. Con ellos se han realizado medidas suficientemente precisas como para saber los cambios de periodo en las órbitas planetarias o experimentos de dilatación relativista del tiempo en satélites artificiales en órbita alrededor de la Tierra.

23.10. COMPLEMENTO 1: ESPECTROS DE RAYOS X. LEY DE MOSELEY

La teoría de Hartree que hemos estudiado en este capítulo para explicar el comportamiento de los átomos multielectrónicos es capaz de predecir otros comportamientos, en concreto las transiciones de capas internas de átomos que dan lugar a los espectros de rayos X.

Los rayos X son ondas electromagnéticas de corta longitud de onda que emergen de la materia cuando ésta recibe los impactos de electrones dotados de energías cinéticas del orden de los 10^5 eV. El espectro de la radiación emitida posee una componente de radiación de frenado (bremsstrahlung) que es básicamente función de la energía de los electrones incidentes, así como un espectro de líneas característico del material emisor; este último es el que nos interesa estudiar ahora (véase figura 23.8).

Con frecuencia, cuando un electrón incidente llega al átomo, consigue extraer de éste un electrón de una subcapa profunda; en este caso el átomo queda fuertemente excitado, ya que los electrones de las capas superiores tendrán una elevada probabilidad de pasar a ocupar el hueco dejado por el electrón extraído. Cuando un electrón ocupa dicho hueco,

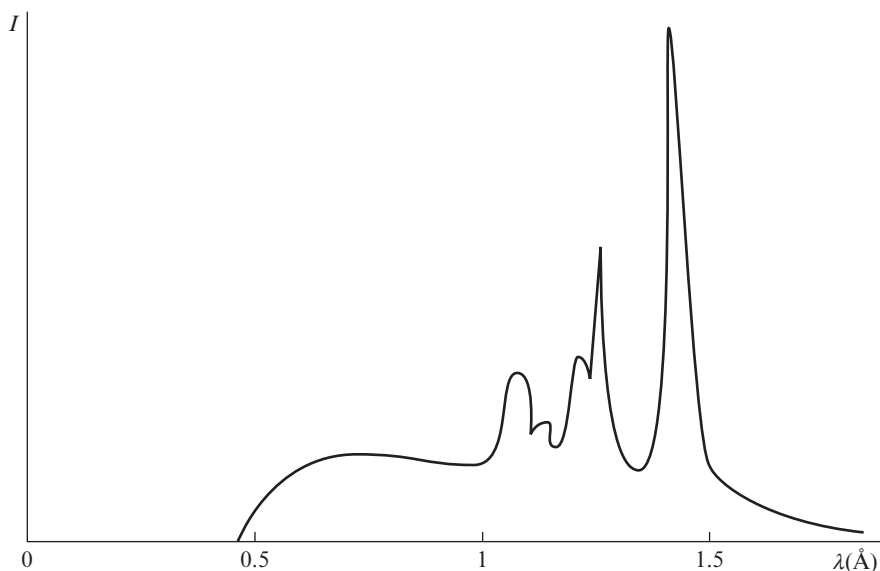


Figura 23.8. Típico espectro de rayos X.

deja, a su vez, otro en el orbital en el que se encontraba; el nuevo hueco es, a su vez, ocupado, y así sucesivamente. En definitiva, se produce una cascada de saldos electrónicos y en cada uno de ellos se produce la emisión de un fotón con una energía igual a la diferencia de energías entre los dos orbitales implicados.

De esta manera, la aparición de las líneas en el espectro de emisión de rayos X es la confirmación experimental de los orbitales internos previstos por la teoría de Hartree.

Es interesante señalar que en los orbitales internos calculados teniendo en cuenta el espín, en cada electrón se produce un fuerte acoplo espín-órbita debido al elevado valor que en ellos alcanza el coeficiente $(1/r)(dV/dr)$ del acoplo, al ser muy rápida la variación del potencial efectivo en las aproximaciones del núcleo. Esto significa que los números cuánticos que caracterizan a los niveles internos son los del conjunto estándar.

Todas las transiciones que terminan en un mismo nivel se denominan series, y se designan con la notación alfabética asociada a los valores de n , como se puede apreciar en el esquema de la figura 23.9.

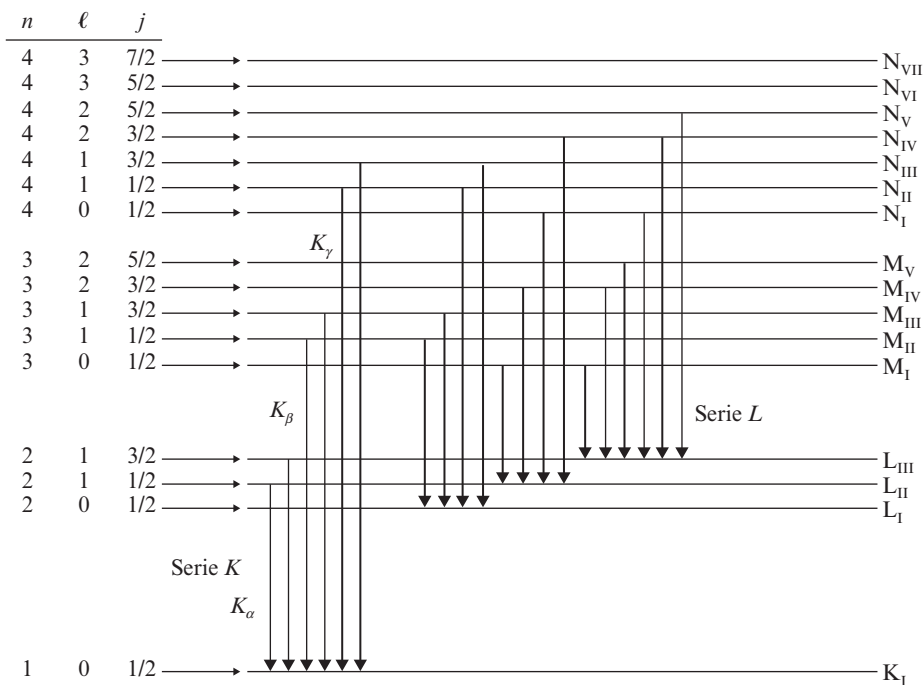


Figura 23.9. Algunas series de rayos X.

Es importante señalar que las reglas de selección de estas transiciones son estrictamente las de las transiciones dipolares eléctricas en átomos de un electrón:

$$\Delta \ell = \pm 1$$

$$\Delta j = 0, \pm 1$$

lo cual no es de extrañar dado que, como se ha visto, la aproximación de un electrón da buenos resultados en estas capas.

Mientras que hay una gran variedad de espectros ópticos y su comportamiento es muy dispar de unos átomos a otros, las transiciones de rayos X son muy semejantes en todos los elementos y las longitudes de onda cambian de una forma casi continua. Moseley estableció en 1913 la ley empírica:

$$\frac{1}{\lambda} = C(Z - a)^2 \quad [23.10.1]$$

estudiando la emisión K_α de diversos elementos. En esta ley, C es una constante prácticamente igual a la de Rydberg en el espectro del hidrógeno y a toma un valor comprendido entre 1 y 2.

La explicación de [23.10.1] se puede obtener con el modelo de Hartree si se tiene en cuenta que la energía de los fotones de rayos X para la transición de la capa L a la K será:

$$h\nu = E_L - E_K$$

Para estimar esta energía se puede hacer uso de la definición del número atómico efectivo:

$$E_n = (E_1) \left(\frac{Z(r_n)}{n} \right)^2$$

$$E_1 = 13.6 \text{ eV}$$

Además, como ya hemos indicado anteriormente (apartado 23.4), en la capa K , que es la más profunda, $Z(r_1) = Z - 2$, es decir:

$$E_L - E_K \simeq E_L - E_1(Z - 2)^2$$

Por otra parte, en la capa L el $Z(r_2)$ es bastante menor que $Z(r_1)$, por lo que en valor absoluto:

$$|E_L| \ll |E_K|$$

y en primera aproximación se puede despreciar, quedando:

$$h\nu \simeq -E_1(Z - 2)^2$$

o, lo que es lo mismo:

$$\frac{1}{\lambda} = -\frac{E_{1w}}{hc} (Z - 2)^2 = R(Z - 2)^2 \quad [23.10.2]$$

siendo R la constante de Rydberg.

[23.10.2] es la ley de Moseley (véase figura 23.10) cuya importancia histórica radica en que permitió predecir que en la tabla periódica faltaban elementos que posteriormente fueron descubiertos.

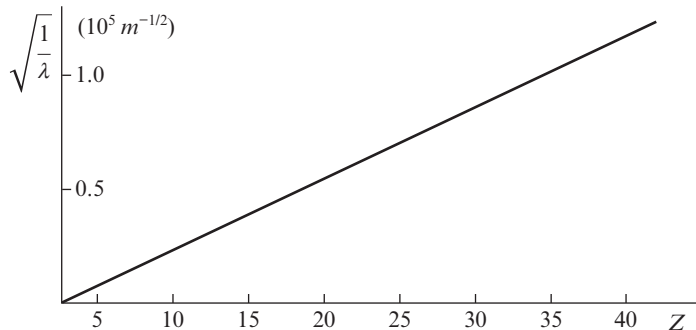


Figura 23.10. Representación de la ley de Moseley.

EJERCICIOS

23.1. Escribir el término espectral fundamental de un acoplo Russell-Saunders en una configuración Hartree s^1p^1 .

23.2. Encontrar los términos espectrales permitidos de un acoplo Russell-Saunders en una configuración Hartree d^8 .

23.3. Calcular la separación entre los niveles Zeeman del estado fundamental:

$${}^2S_{1/2}$$

del átomo de sodio para un campo magnético B arbitrario.

23.4. El estado fundamental de un átomo alcalino es:

$${}^2S_{1/2}$$

y su espín nuclear $I = \hbar/2$. Dibujar el diagrama de niveles del acoplo hiperfino. Señalar en este diagrama la transición que serviría para realizar un reloj atómico.

23.5. Demostrar que verifican la regla del intervalo de Landé los dobletes de acoplo espín-órbita de los metales alcalinos.

Soluciones a los ejercicios (capítulos 19 a 23)

- 19.1.** Desarrollar el potencial $V(r)$ en serie de potencias de las desviaciones de la posición media y tener en cuenta que éstas son al azar, por lo que el término correctivo lineal es nulo. El cuadrático da lugar al término de Darwin [19.4.15].
- 19.2.** a) 0.78 Å; b) 0.53 Å; c) Sólo en estados de $\ell = 0$; en los demás, la función de ondas es nula en el origen.
- 19.3.** $\langle E \rangle = -8.5$ eV; $\langle V \rangle = -10.2$ eV; $\langle T \rangle = 1.7$ eV.
- 19.4.** Como la representación que se conoce es la de la posición-espín, hay que hallar las ecuaciones de cambio de base mediante los coeficientes de Clebsch-Gordan. Se tiene en cuenta que estos coeficientes son reales y que los armónicos esféricos son ortonormales, y se sustituye $V(r)$ por el potencial de Coulomb, haciendo uso de las propiedades de las funciones radiales:

$$(Z/a_0)^3 \times [n^3 \ell(\ell + 1)(\ell + 1/2)]^{-1}$$

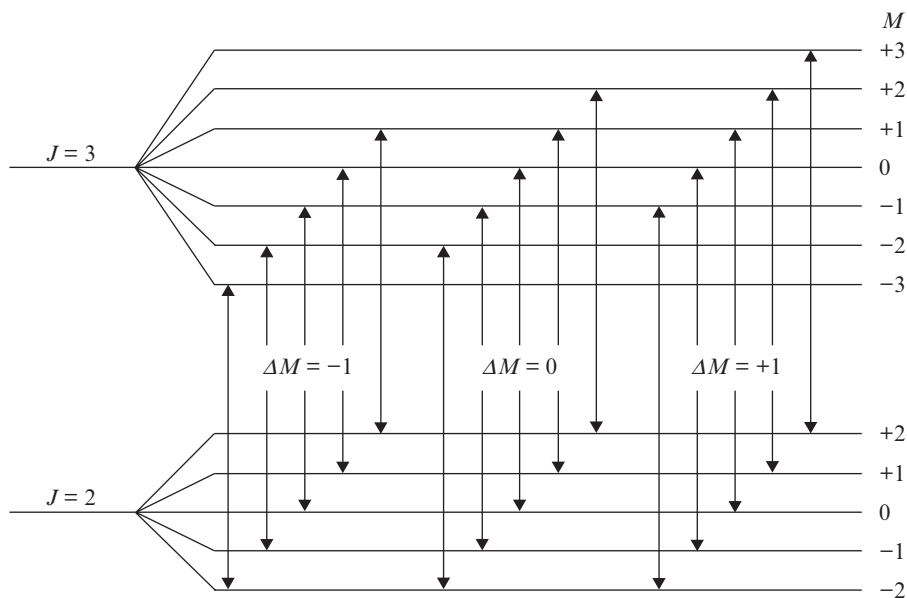
- 19.5.** Efectivamente se obtienen los términos:

$$-\frac{(E - V)p^2}{4m^2c^2} \quad \text{y} \quad -\frac{i\hbar}{4m^2c^2} \nabla V \times p$$

que no son hermíticos, aunque se puede comprobar que su suma sí lo es al eliminarse los términos que estorban. Nótese que en el procedimiento usado en el texto se ha evitado este problema.

- 20.1.** Hacer uso del teorema de Wigner-Eckart para relacionar los elementos de matriz de A con los de J . La constante que aparece se calcula por medio de los elementos diagonales teniendo en cuenta que J_z es diagonal en la base $|jm\rangle$.
- 20.2.** Se obtiene inmediatamente haciendo uso de los argumentos que se encuentran al final del apartado 20.2.

- 20.3. Aplicar la expresión obtenida en el ejercicio 20.1 tomando como operador A_z, S_z .
- 20.4. Solución: realmente son 6 niveles, pero 2 de ellos están degenerados.
- 20.5. $A\bar{\nu} = 4.67 \times 10^{-5} \times H \text{ cm}^{-1}$ (H en gauss).



- 21.1. El movimiento de rotación de la carga se puede descomponer en dos oscilatorios armónicos perpendiculares entre sí en el plano del movimiento, por ejemplo, sobre los ejes x e y . Los campos emitidos por cada uno de estos osciladores están en el texto y con ellos se puede calcular el vector de Poynting y la energía emitida integrando a una esfera:

$$\frac{e^2 \omega^4}{6\pi\epsilon_0 c^3} s_0^2$$

que, como cabía esperar, es el doble de la emitida por un oscilador armónico.

La polarización es lineal en el plano del rotador, circular en dirección perpendicular al mismo y elíptica en cualquier otro caso.

- 21.2. Descomponer el movimiento del oscilador en la dirección del campo magnético y en un plano perpendicular a él. Se encontrarán otro oscilador y dos rotadores de amplitudes adecuadas. Considerando el efecto del campo magnético sobre cada uno de estos elementos se encuentra inmediatamente la explicación del efecto Zeeman.

21.3. $6,25 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$.

21.4. $N = N(0) \times e^{-Pt} \quad \tau = 1/P$.

21.5. Plantear las ecuaciones fenomenológicas de Einstein y resolverlas con las condiciones iniciales de que el nivel inferior esté lleno y el superior vacío dadas por la temperatura de la experiencia. $A = 10^8 \text{ s}^{-1}$ y B se calcula a partir de A mediante [21.3.26]. Tener en cuenta que la probabilidad de emisión estimulada viene dada por [21.3.21]:

a) Nivel superior: $2 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$
 Nivel inferior: $8 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$

b) Nivel superior: $3.3 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$
 Nivel inferior: $6.6 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$

22.1. Téngase en cuenta que al arrancar un electrón a un átomo de He se convierte en un átomo hidrogenoide de $Z = 2$; por tanto, es conocida la energía del ion. Por otro lado, de [22.4.7] se tiene la energía aproximada del He:

$$E_{T, 1, 1} + \Delta E$$

y, por tanto:

$$V_{\text{ionización}} = E_{T, 1, 1} + \Delta E - E_{\text{ion}} = \frac{3}{4} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}$$

22.2. Por razonamientos geométricos, es fácil obtener:

$$r_{12} = r_1(x^2 + 1 - 2x \cos \alpha)^{1/2}$$

siendo α el ángulo formado por r_1 y r_2 . Escribiendo la inversa de esa expresión, igualándola a la que se da en el enunciado, elevando al cuadrado e integrando la expresión resultante entre -1 y $+1$, y haciendo uso de las propiedades de los polinomios de Legendre, se obtiene la expresión buscada sin más que desarrollar en serie un logaritmo neperiano.

22.3. Si se hace uso del resultado del problema anterior y de las propiedades de los polinomios de Legendre, se obtiene en unidades atómicas:

$$\langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | 1/r_{12} | \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) \rangle = 5/4$$

22.4. Al escribir la energía de repulsión de los dos electrones se encuentra el desarrollo del problema anterior, y es inmediato que en unidades atómicas:

$$V(r) = (2/r_1)[1 - (1 + 2r_1) \exp(-4r_1)]$$

22.5. El potencial efectivo anterior se puede escribir en unidades atómicas en la forma:

$$V(r) = -(2 \times Z_{\text{ef}})/r_1$$

donde Z_{ef} es un número atómico efectivo que vale:

$$Z_{\text{ef}} = 2 + 2r_1 \exp(-4r_1)$$

cuando $r_1 = 0$, $Z_{\text{ef}} = 2$, es decir, no hay apantallamiento.

cuando r_1 es grande, $Z_{\text{ef}} = 1$, es decir, apantallamiento completo.

23.1. El estado fundamental será, de todos los términos permitidos, uno de los que tengan mayor valor de s , y dentro de éstos, uno de los que tengan el mayor valor de ℓ . Entre estos últimos será el que tenga menor valor de j , por lo cual en nuestro caso es el 3P_0 .

23.2. En la capa d caben 10 electrones; por tanto, en nuestro caso acoplaremos 2 huecos en subcapa d , es decir:

$$n_1 = n_2 \left\{ \begin{array}{l} \ell_1 = \ell_2 = 2 \quad m_{\ell_i} = 2, 1, 0, -1, -2 \\ s_1 = s_2 = \frac{1}{2} \quad m_{s_i} = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \end{array} \right.$$

Si se dibuja un diagrama con todos los términos espectrales y de éstos se seleccionan aquellos en que:

$$s + \ell = 0, \text{ par}$$

se obtienen los que pide el enunciado.

23.3.

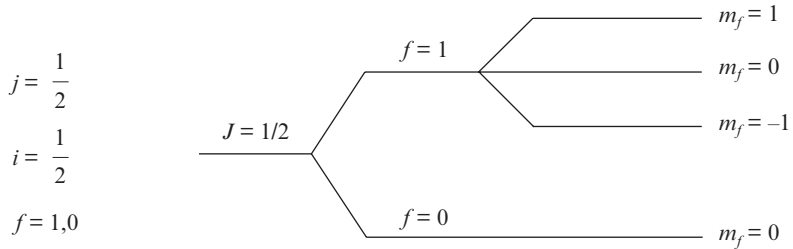
$$^2S_{1/2} \left\{ \begin{array}{l} \ell = 0 \\ s = \frac{1}{2} \\ j = \frac{1}{2} \end{array} \right.$$

$$g = 1 + \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)}{2 \times \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)} = 2$$

$$E_n = m_j g \frac{he}{4\pi m} B = \begin{cases} \frac{1}{2} \times 2 \frac{he}{4\pi m} B = E_M \left(\frac{1}{2} \right) \\ -\frac{1}{2} \times 2 \frac{he}{4\pi m} B = E_M \left(-\frac{1}{2} \right) \end{cases}$$

$$\Delta E_n = 2 \frac{he}{4\pi m} B = 2M_B B$$

23.4.



La transición entre los niveles en que $m_f = 0$ es independiente del campo magnético.

23.5. La separación del doblete es:

$$\Delta E_{SL} = E_{n, \ell, +1/2} - E_{n, \ell, -1/2} = \frac{\hbar}{4c^2 m^2} (2\ell + 1) \int_0^\infty r^2 R_{ne}^2 \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) dr = k(2\ell + 1)$$

$$\ell - \frac{1}{2} = j \rightarrow \ell + \frac{1}{2} = j + 1 \rightarrow 2\ell + 1 = 2(j + 1)$$

$$E_{n\ell j+1} - E_{n\ell j} = 2k(j + 1)$$

PARTE CUARTA

Moléculas

- Niveles electrónicos de las moléculas diatómicas.
- Términos moleculares.
- Interpretación física del enlace químico.
- El movimiento de los núcleos.
- Espectroscopía molecular.

BIBLIOGRAFÍA

- Galindo, A., Pascual, P., Sancho, J., Guerra, J. M. y Escudero, J. L. (1985). *Mecánica Cuántica (Física Cuántica)*. Madrid: UNED.
La parte de Física Atómica y Molecular, aunque de un nivel más elemental que la de este libro, puede servir al alumno para iniciarse en el estudio de estos temas.
- Gasiorowicz, S. (1974). *Quantum Physics*. Nueva York: John Wiley & Sons.
Libro de nivel similar a éste que puede complementarlo en algunos temas.
- Finkelburg, W. (1964). *Structure of matter*, Nueva York: Academic Press.
Es un libro clásico en el estudio de la estructura de la materia. En el tratamiento de todos los temas que aborda parte de hechos experimentales y describe los instrumentos adecuados para su comprobación.
- Sánchez del Río, C. (1977). *Introducción a la teoría del átomo*. Madrid: Alhambra.
Libro específico de Física Atómica de nivel superior a lo exigible a un alumno que aborda por primera vez el estudio de la Física Cuántica. Sin embargo, trata los temas de manera muy didáctica, lo que permite que sea adecuado para consulta en algunos casos.
- Holden, A. (1971). *Bonds Between atoms*. Oxford: Clarendon Press.
Es un libro breve adecuado para el lector que quiera introducirse en el estudio de la Física Molecular a partir de la consideración de las interacciones interatómicas. Son interesantes los ejemplos y las discusiones que presenta para reflexionar sobre diferentes aspectos de los temas que trata.

24 Niveles electrónicos de las moléculas diatómicas

José Luis Escudero
José Manuel Guerra

24.1. INTRODUCCIÓN

Comenzamos con este capítulo un bloque dedicado al estudio de la Física Molecular, ciencia que analiza por métodos físicos la estructura y propiedades de las moléculas. Consideradas las moléculas como agregados de átomos, la Física Molecular es una continuación lógica de la Física Atómica (capítulos 19 a 24), y su extensión natural es la Física del Estado Sólido (capítulos 29 a 33).

Como veremos en éste y en los próximos capítulos, la Física Molecular se ocupa, entre otros problemas, de determinar la configuración espacial de equilibrio que adoptan los átomos formadores de las moléculas, así como la distancia entre ellos, sus posibilidades de rotación, sus modos de vibración y las energías necesarias para disociar una molécula diatómica o separar un átomo o un grupo de átomos de una molécula poliatómica. Asimismo, y en analogía a lo ya visto en los átomos, calcula los niveles de energía moleculares y estudia las posibles transiciones entre ellos, así como las posibilidades de la ionización molecular.

No es difícil de entender la íntima relación que existe entre la Física Molecular y la Química si se tiene en cuenta que los métodos de esta última, en definitiva, conducen a la obtención de comportamientos moleculares o magnitudes características de las moléculas que intervienen en la formación de los diversos compuestos químicos, ya sea, por ejemplo, determinando la fórmula del mismo o su calor de formación. De hecho, se puede afirmar que, sin duda, la Física Molecular aporta los fundamentos teóricos que permiten abordar muchos de los problemas que se plantean en Química.

Por otro lado, la Física Molecular se fundamenta en la Física Atómica y, como ella, precisa del uso de los métodos de la Mecánica Cuántica para comprender el comportamiento de las moléculas. Asimismo, al igual que en el estudio de los átomos, son precisos procedimientos experimentales tales como la espectroscopía, la difracción de rayos X, de neutrones o de electrones, etc., u otros específicos, como la resonancia magnética nuclear.

24.2. ESTRUCTURA MOLECULAR

Las dimensiones lineales de las moléculas simples son del orden de algunos amstrongs (típicamente 3 o 4) y tienen formas geométricas variadas dependiendo de su estructura particular: elipsoides, tetraedros, etc. La determinación experimental de las dimensiones

moleculares se efectúa por procedimientos que hacen uso de la ecuación de van der Waals, de la densidad y de la viscosidad.

Las distancias internucleares y, por tanto, la estructura de la molécula, así como las distribuciones de densidad electrónica y a partir de ellas la naturaleza e intensidad de las fuerzas intramoleculares, se han determinado experimentalmente mediante métodos basados en la difracción de electrones, neutrones o rayos X. En la figura 24.1 se presenta la reconstrucción de la molécula de hexametil benceno, $C_6(CH_3)C_6$, a partir de una imagen de difracción de rayos X. La difracción de neutrones por átomos, al contrario que la difracción de rayos X, es prácticamente independiente de la masa atómica, y, por ello, se utiliza para la determinación de estructuras moleculares en las que intervienen átomos de hidrógeno, además de átomos pesados.

En algunas moléculas (H_2 , O_2 , etc.) la distribución geométrica de las cargas es tal que coinciden los centros de las cargas positivas y negativas y, por tanto, no poseen momento dipolar permanente, pero habitualmente ambos centros de carga no coinciden. Así, por ejemplo, en la molécula de $ClNa$ el electrón de valencia del sodio es atraído por el átomo de cloro, con lo que realmente la molécula está formada por iones y no por átomos (Cl^-Na^+); por ello, aparece en este tipo de moléculas (moléculas iónicas) un momento dipolar permanente. Mediante la determinación del momento dipolar se puede calcular la distancia entre los centros de carga. Para muchas moléculas se ha determinado el momento dipolar permanente a partir de medidas de la constante dieléctrica del gas o vapor molecular. En la tabla 24.1 se presentan algunos de estos valores.

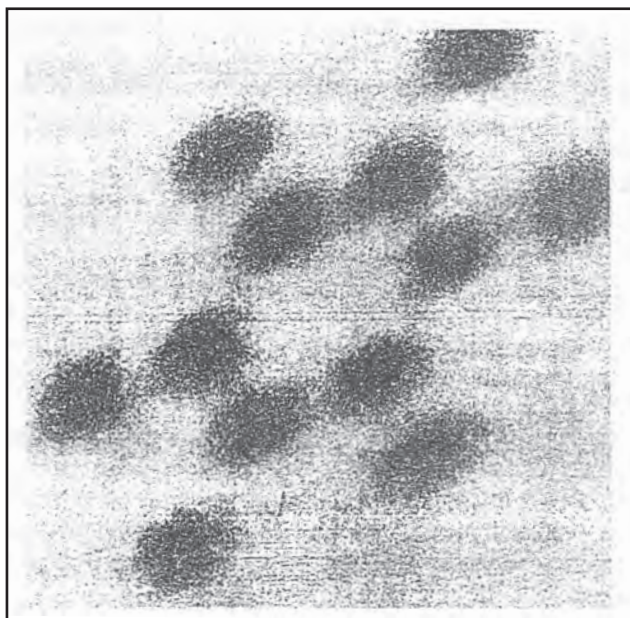


Figura 24.1. Reconstrucción por difracción de rayos X de la forma de una molécula.

Niveles electrónicos de las moléculas diatómicas

Cuando las moléculas se sitúan en un campo eléctrico, además de orientarse sus momentos dipolares permanentes (si los tienen), se puede inducir en ellas un momento dipolar adicional debido al desplazamiento de las cargas positivas y negativas por efecto del campo eléctrico. Se define la polarizabilidad de la molécula como la constante de proporcionalidad entre el momento dipolar inducido y el campo eléctrico aplicado. La polarizabilidad se suele determinar experimentalmente a partir de medidas de índice de refracción. En la tabla 24.2 se dan algunos valores típicos de la polarizabilidad para algunas moléculas, y en ella puede observarse que en la mayor parte de los casos se asignan dos valores de polarizabilidad a la molécula. La razón se encuentra en que, salvo para aquellas moléculas perfectamente simétricas, como el tetracloruro de carbono (CCl_4), la polarizabilidad es anisótropa en el sentido de que la capacidad del campo para inducir momento dipolar en la molécula depende de la dirección en la que se aplique. La investigación de la anisotropía de polarizabilidad permite llegar a conclusiones sobre la forma de la molécula. En general, la anisotropía puede medirse directamente si las moléculas están orientadas en un cristal molecular, en cuyo caso la constante dieléctrica es tensorial.

TABLA 24.1

*Valores del momento dipolar permanente de algunas moléculas polares
(esu = unidades electrostáticas)*

CO	0.1×10^{-18} esu	KCl	6.3×10^{-18} esu	CHCl_3	0.95×10^{-18} esu
NO	0.13×10^{-18} esu	CsI	10.2×10^{-18} esu	NH_3	1.46×10^{-18} esu
HI	0.38×10^{-18} esu	N_2O	0.14×10^{-18} esu	SO_2	1.61×10^{-18} esu
NBr	0.78×10^{-18} esu	PH_3	0.55×10^{-18} esu	H_2O	1.79×10^{-18} esu
HCl	1.03×10^{-18} esu	AsH_3	0.15×10^{-18} esu	CH_3Cl	1.97×10^{-18} esu
NaI	4.9×10^{-18} esu	H_2S	0.93×10^{-18} esu		

TABLA 24.2

*Valores de la polarizabilidad de algunas moléculas en unidades de 10^{-24} cm³.
Obsérvese que la mayor parte son anisótropas*

CCl_4	H_2	Cl_2	NO	CS_2	NH_3	C_6H_6
10.5	0.61 0.85	3.2 6.6	1.8 5.3	5.5 15.1	2.2 2.4	6.7 12.8

Existen diferentes efectos electro y magnetoópticos que permiten investigar la anisotropía de polarizabilidad de las capas electrónica de las moléculas. Por ejemplo, el efecto

Kerr, que consiste en que algunos líquidos y gases moleculares presentan birrefringencia al paso de la luz cuando se les somete a fuertes campos eléctricos.

Otro fenómeno interesante es el efecto Raman, que estudiaremos con detalle más adelante, que consiste en que cuando las moléculas se irradian con luz monocromática de frecuencia ν , en el espectro de la luz dispersada aparecen dos líneas de frecuencias $\nu \pm \nu'$, donde ν' coincide con alguna frecuencia de rotación o de vibración de la molécula. Evidentemente, la espectroscopía Raman es muy útil para la determinación de frecuencias de rotación o vibración moleculares (véase figura 24.2).

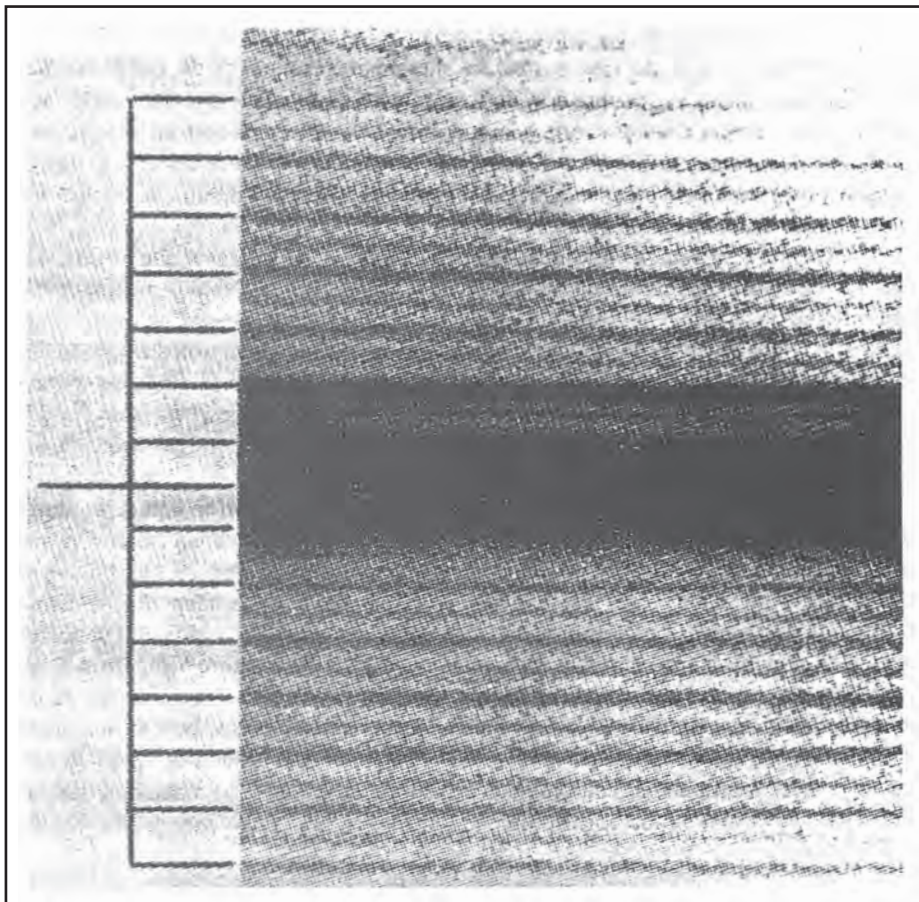


Figura 24.2. Espectro Raman de la molécula N_2 . A cada lado de la línea central (saturada en la fotografía, ya que es muy intensa) se observan las de frecuencias $\nu \pm \nu'$ para las diferentes vibraciones.

Además de la espectroscopía Raman, también la espectroscopía convencional, infrarroja (IR), visible y ultravioleta (UV), permiten acceder al conocimiento de propiedades

estructurales de las moléculas. Aunque en el capítulo 28 profundizaremos en el análisis de los espectros moleculares, en este apartado vamos a describir las características generales de los mismos.

Si se observan los espectros de absorción y emisión de cualquier molécula, obtenidos por procedimientos y equipos experimentales similares a los utilizados para los espectros atómicos, se distinguen, con mayor o menor claridad, tres grupos de espectros diferentes que pueden diferir tanto en su localización en el rango espectral como en su complejidad:

- a) Una serie de líneas equidistantes en el infrarrojo lejano que se conoce como espectro de rotación, por razones que luego veremos.
- b) Espectros de rotación-vibración, constituidos por un cierto número de líneas repartidas de una manera regular que se extienden desde el rojo hasta el infrarrojo cercano.
- c) En una amplia zona (visible, UV) se observan grupos de líneas, a veces muy complicadas, llamadas bandas, y también frecuentemente espectros continuos. Estas secuencias de líneas se llaman bandas debido a que, si se observan con un espectroscopio de baja resolución, pierden su estructura. Cada espectro de bandas, sin embargo, presenta una estructura triple, que consiste en un cierto número de grupos de bandas (sistemas de bandas) con cada banda formada por unas cuantas líneas.

La estructura triple de los espectros de bandas es debida a que la energía total de la molécula consta de tres partes: la energía de excitación de los electrones (energía electrónica), la de vibración de los átomos, iones o núcleos que componen la molécula (energía de vibración) y la energía cinética de rotación de la molécula alrededor de sus ejes principales de inercia (energía de rotación). Estas tres partes pueden variar de forma independiente en emisión o absorción, dando así lugar a los complicados espectros moleculares.

La teoría que veremos en lo que sigue muestra que las energías que corresponden a la emisión o absorción de radiación en el IR lejano son debidas únicamente a cambios en la energía de rotación de la molécula, mientras que el que hemos denotado como espectro de rotación-vibración corresponde a cambios de vibración y rotación de la molécula; la superposición de estos dos tipos de cambios de energía produce las numerosas líneas que antes hemos comentado. Los espectros de bandas en las regiones visible y UV corresponden a cambios en la configuración de los electrones, en la vibración y en la rotación de la molécula.

Los cambios mayores en la energía total de la molécula ocurren como resultado de variaciones en la configuración electrónica (transiciones electrónicas), por lo que la posición de cada sistema de bandas está determinada por la energía de la transición electrónica; todas las bandas de cada sistema proceden de la misma transición electrónica. Los cambios de energía molecular ocasionados por variaciones en la configuración electrónica son de un orden de magnitud superior a los correspondientes a vibraciones, por lo que la posición de cada banda dentro de un sistema está determinada por la transición vibracional, es decir, por la diferencia entre la energía de vibración del estado final y el inicial. Las diferentes líneas de una banda son el resultado de cambios en la energía de rotación. Es decir, todas las líneas de una misma banda corresponden al mismo cambio en la energía electrónica y vibracional.

24.3. DESCRIPCIÓN CUÁNTICA DE LAS MOLÉCULAS

Para poder entender teóricamente la estructura, propiedades y comportamiento de las moléculas es necesario hacer uso de la teoría cuántica, entendiendo a las moléculas como sistemas de partículas. Parece entonces que deberíamos considerar a la molécula como un sistema formado por electrones y núcleos en interacción coulombiana; sin embargo, cuando se aporta suficiente energía a la molécula, ésta se disocia comúnmente en átomos, lo cual nos induce a pensar en una descripción alternativa de las moléculas como estados ligados de sistemas de átomos en interacción. El primero de los planteamientos, aparte de ser impracticable en moléculas que no sean extremadamente simples, no está claro que sea equivalente en moléculas complejas a la segunda alternativa.

La descripción que vamos a adoptar participa de alguna manera de ambos puntos de vista. Para ello, supondremos que en el proceso de formación de una molécula por interacción entre los átomos componentes, ésta afectará fundamentalmente a los electrones corticales, mientras que los correspondientes a capas internas cerradas, al estar sometidos a campos eléctricos muy intensos, no participan en el proceso de interacción más que a través de perturbaciones poco importantes. Desde este punto de vista, son los campos eléctricos a los que están sometidos los electrones corticales los responsables de las interacciones entre los átomos componentes de la molécula, y el corazón atómico, formado por los núcleos y las capas electrónicas cerradas, permanece inalterado en la formación de la molécula, con lo que en este sentido los átomos conservan en parte su individualidad.

En definitiva, en este tratamiento el corazón atómico es esencialmente un ion positivo que produce un potencial eléctrico, en general no coulombiano, al cual están sometidos los electrones corticales de todos los átomos que forman la molécula. De esta forma el sistema cuántico de varios cuerpos que componen los iones o corazones atómicos y los electrones corticales que consideraremos en los estudios *ab initio* de estructuras moleculares posee un número de partículas muy inferior al que habría considerando sólo los núcleos y electrones, y, por ello, el problema se resuelve con mayor facilidad.

24.4. MOLÉCULAS DIATÓMICAS. APROXIMACIÓN DE BORN-OPPENHEIMER

Las moléculas más sencillas son aquellas que poseen dos núcleos atómicos, las moléculas diatómicas, pero a pesar de su simplicidad constituyen sistemas mucho más complejos que los átomos que estudiamos en los capítulos anteriores. En una molécula, incluso diatómica, los núcleos tienen la posibilidad de moverse, con lo que los grados de libertad aumentan considerablemente. Así, si consideramos lo que se entiende por la molécula más simple, el ion molecular H_2^+ (molécula de hidrógeno a la que se le ha arrancado un electrón), constituido por dos protones y un electrón, hay seis grados de libertad, tres para el movimiento del electrón y otros tres para el movimiento relativo de los núcleos. Por ello, aunque sea teóricamente posible abordar el problema del estudio cuántico de las moléculas a través de soluciones numéricas de la ecuación de Schrödinger, es más ilustrativo en

nuestro caso llevar a cabo algunas simplificaciones que nos darán una visión más física del problema.

En lo que sigue vamos a estudiar con detalle las moléculas diatómicas, no sólo por su sencillez, sino también porque en el análisis de este tipo de moléculas aparecerán las aproximaciones y las técnicas básicas que deberán ser empleadas en moléculas más complejas.

El hamiltoniano correspondiente a una molécula formada por dos iones positivos A y B y una serie de electrones (véase figura 24.3) es:

$$\begin{aligned}
 H_T = & -\frac{\hbar^2}{2m_A} \nabla_A^2 - \frac{\hbar^2}{2m_B} \nabla_B^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 + \frac{Z_A Z_B e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|} - \sum_i \frac{Z_A e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_A|} - \\
 & - \sum_i \frac{Z_B e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_B|} + \sum_i \sum_{i < j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|}
 \end{aligned}
 \tag{24.4.1}$$

en donde los tres primeros términos corresponden a las energías cinéticas de los iones positivos y los electrones; el cuarto es la energía de repulsión coulombiana entre ambos iones; el quinto y el sexto, la de atracción de cada ion con todos y cada uno de los electrones, y el último la de repulsión de todos los electrones entre sí.

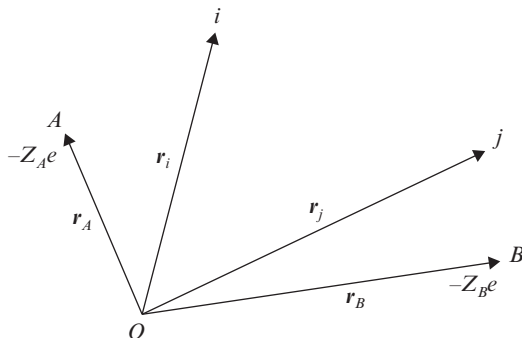


Figura 24.3. Vectores de posición en la molécula diatómica.

Si genéricamente denotamos por \mathbf{r}_n a las posiciones de los núcleos y por \mathbf{r}_e a las de los electrones:

$$\mathbf{r}_n \rightarrow \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B$$

$$\mathbf{r}_e \rightarrow \mathbf{r}_i$$

La ecuación de Schrödinger de la molécula diatómica podrá escribirse en la forma:

$$H_T \phi_T(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_e) = E \phi_T(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_e)
 \tag{24.4.2}$$

Es de resaltar que aunque la ecuación [24.4.2] la hemos escrito con referencia a un sistema de coordenadas, el hamiltoniano H_T sólo depende de las distancias:

$$R = |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A| \quad \mathbf{r}_{Ai} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_A \quad \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j \quad \mathbf{r}_{Bi} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_B \quad [24.4.3]$$

En una imagen clásica de la molécula, tanto los electrones como los corazones atómicos están sometidos a potenciales de origen coulombiano del mismo orden de magnitud, pero sus masas son muy diferentes, por ello, el movimiento de los núcleos es mucho más lento que el de los electrones¹, de manera que aquéllos no pueden seguir el movimiento de las pequeñas masas electrónicas y, como consecuencia de ello, los núcleos sólo sufren el efecto de la fuerza media del electrón en una órbita. Por el contrario, el electrón se mueve en órbitas distintas según las posiciones que en cada instante ocupen los núcleos.

De acuerdo con lo anterior, es razonable factorizar la función de ondas total en la siguiente forma:

$$\phi_T = \phi_n(\mathbf{r}_n) \times \phi_e(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_e) \quad [24.4.4]$$

y también el hamiltoniano:

$$H_T = H_n + H_e \quad [24.4.5]$$

siendo, para moléculas diatómicas:

$$H_n = \frac{\hbar^2}{2m_A} \nabla_A^2 - \frac{\hbar^2}{2m_B} \nabla_B^2 \quad [24.4.6]$$

La función de ondas de los electrones depende, además de las coordenadas de los electrones, de las coordenadas nucleares, pero como consecuencia de los razonamientos anteriores, será una dependencia lenta en el sentido:

$$\left. \begin{array}{l} \nabla_n \phi_n \times \nabla_n \phi_e \\ \phi_n \times \nabla_n^2 \phi_e \end{array} \right\} \ll \phi_e \times \nabla_n^2 \phi_n \quad [24.4.7]$$

¹ Situando los orígenes de coordenadas en el centro de los respectivos pozos de potencial armónicos de la molécula, las fuerzas eléctricas que actuarán sobre los electrones y los núcleos en sus órbitas serán del orden de:

$$F_e \approx m_e \omega_e^2 r_e \quad F_n \approx M_n \omega_n^2 r_n$$

y como en la molécula:

$$\left. \begin{array}{l} F_e \approx F_n \\ r_e \approx r_n \end{array} \right\} \frac{\omega_e}{\omega_n} \approx \left(\frac{M_n}{m_e} \right)^{1/2} \approx 10^2$$

es decir, que en el tiempo que invierte el núcleo en recorrer una vez su órbita, el electrón recorre del orden de 100.

Esta factorización sugiere estudiar primero el problema electrónico con los núcleos en posiciones fijas, en cuyo caso las distancias r_n actúan como parámetros para el problema electrónico. Para cada conjunto de valores de los parámetros obtenemos así otro de autovalores y autofunciones del hamiltoniano resultante (H_e):

$$H_e \phi_e^i = E_e^i(\mathbf{r}_n) \phi_e^i$$

Los autovalores $E_e^i(\mathbf{r}_n)$ constituyen, como veremos después, los potenciales en que se mueven los núcleos. Para $r_n \rightarrow \infty$, los $E_e^i(\mathbf{r}_n)$ deben tender a los niveles de energía de los átomos separados (véase figura 24.4).

A continuación se introduce el movimiento de los núcleos en el potencial creado por los electrones $E_e^i(\mathbf{r}_n)$. Como ya hemos indicado, el movimiento de los núcleos es muy lento comparado con el de los electrones, por ello producen una perturbación muy lenta al estado electrónico que sigue siendo autofunción de H_e durante el movimiento nuclear. Este proceso es «adiabático» en el sentido de que supone que, en una órbita electrónica, los núcleos prácticamente no se mueven, y por ello se conoce como aproximación adiabática.

Para desarrollar esta aproximación vamos a sustituir la factorización [24.4.4] de la función de ondas en la ecuación de Schrödinger [24.4.2], con lo que, si tenemos en cuenta [24.4.7]:

$$\begin{aligned} \nabla_A^2(\phi_n \phi_e) &= \phi_e \nabla_A^2 \phi_n + \phi_n \nabla_A^2 \phi_e + 2(\nabla_A \phi_n)(\nabla_A \phi_e) \approx \phi_e \nabla_A^2 \phi_n \\ \nabla_B^2(\phi_n \phi_e) &= \phi_e \nabla_B^2 \phi_n + \phi_n \nabla_B^2 \phi_e + 2(\nabla_B \phi_n)(\nabla_B \phi_e) \approx \phi_e \nabla_B^2 \phi_n \end{aligned} \quad [24.4.8]$$

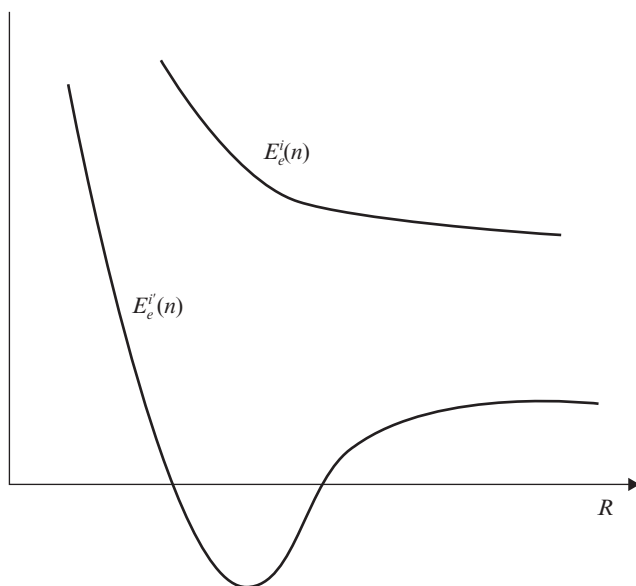


Figura 24.4. Curvas de potencial del problema molecular.

la ecuación [24.4.2] puede escribirse con [24.4.5]:

$$H_T(\phi_n \phi_e) = (H_n + H_e)(\phi_n \phi_e) = H_n(\phi_n \phi_e) + H_e(\phi_n \phi_e)$$

y, haciendo uso de [24.4.8]:

$$H_T(\phi_n \phi_e) \simeq \phi_e H_n \phi_n + \phi_n H_e \phi_e = E \phi_n \phi_e \quad [24.4.9]$$

ya que $\phi_n(\mathbf{r}_n)$ no depende de las coordenadas electrónicas. En la ecuación [24.4.9] se pueden agrupar los términos que sólo dependen de las variables de posición nucleares dividiendo entre $\phi_n \times \phi_e$:

$$\frac{1}{\phi_n} H_n \phi_n - E = -\frac{1}{\phi_e} H_e \phi_e \quad [24.4.10]$$

Ahora el primer término de [24.4.10] es evidente que es una función sólo de las coordenadas nucleares ($E_e(\mathbf{r}_n)$), con lo que [24.4.10] se convierte en las siguientes dos ecuaciones:

$$H_e \phi_e = E_e(\mathbf{r}_n) \phi_e \quad [24.4.11]$$

$$H_n \phi_n + E_e(\mathbf{r}_n) \phi_n = E \phi_n \quad [24.4.12]$$

Las ecuaciones [24.4.11] y [24.4.12] son nuevas ecuaciones de Schrödinger. La primera de ellas ha de ser resuelta en las variables electrónicas \mathbf{r}_e para cada posición \mathbf{r}_n de los núcleos; en ella, las posiciones de los núcleos actúan como parámetros constantes durante la integración (parámetros adiabáticos). Se puede observar que los diferentes valores de la función $E_e(\mathbf{r}_n)$ son los autovalores de esta ecuación y, asimismo, la función $E_e(\mathbf{r}_n)$ es la energía potencial en que se mueven los núcleos en la ecuación [24.4.12]. Estos autovalores se denominan términos electrónicos.

Por tanto, en la aproximación de Born-Oppenheimer, o aproximación adiabática, el problema de encontrar la función de ondas de la molécula diatómica se convierte en la resolución de las ecuaciones [24.4.11] y [24.4.12]. El procedimiento a seguir es obtener los términos electrónicos mediante la resolución de la ecuación [24.4.11] y, posteriormente, obtener el movimiento de los núcleos para cada uno de los términos electrónicos resolviendo la ecuación [24.4.12]. Es decir, físicamente, hemos separado los movimientos nucleares y electrónicos y así obtendremos las diferentes energías electrónicas para cada posición fija de los núcleos; luego, veremos cómo estas energías determinan el movimiento nuclear.

En la molécula diatómica, la posición nuclear físicamente significativa es la de un núcleo respecto al otro, siendo la recta que une ambos núcleos el eje de simetría de la molécula, o sea:

$$E_e(\mathbf{r}_n) = E_e(R) \quad R = |\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B| \quad [24.4.13]$$

Continuaremos nuestro estudio analizando la resolución de la ecuación electrónica [24.4.11] para el caso de la molécula más simple, el ion molecular H_2^+ .

24.5. TÉRMINOS ELECTRÓNICOS DE LA MOLÉCULA H_2^+

Como ya hemos indicado, vamos ahora a ocuparnos del ion molecular H_2^+ , formado por dos protones y un electrón, es decir, un problema de tres cuerpos. La ecuación electrónica [24.4.11] para este sistema toma la forma:

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right\} \phi_e = E_e(R) \phi_e \quad [24.5.1]$$

Aunque esta ecuación puede resolverse exactamente en coordenadas elípticas definiendo:

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R} \quad \eta = \frac{r_2 - r_1}{R}$$

(φ = ángulo de rotación alrededor del eje molecular.)

se puede obtener mayor información intuitiva acerca de la física de la molécula aplicando el método variacional con una función de prueba razonable.

En analogía con los átomos hidrogenoides, podría haberse intentado resolver la ecuación [24.5.1] puesta en coordenadas elípticas factorizando la solución:

$$\phi_e(\xi, \eta, \varphi) = X(\xi) Y(\eta) e^{i\Lambda\varphi} \quad [24.5.2]$$

Al sustituir la expresión [24.5.2] en la ecuación [24.5.1] se obtendrían tres ecuaciones diferenciales de autovalores resolubles, dando lugar a la obtención de tres números cuánticos, n_ξ , n_η y Λ , que determinarían el número de ceros de las funciones $X(\xi)$ e $Y(\eta)$. Como consecuencia, cada término electrónico $E_e(R)$ estará caracterizado por esos tres números cuánticos:

$$E_e(R) = E(R)_{n_\xi n_\eta \Lambda} \quad [24.5.3]$$

de tal manera que para cada valor de la separación R entre los dos núcleos se obtiene un espectro discreto de valores de energía electrónica.

Tal y como indicábamos anteriormente, vamos a hacer uso del método variacional para determinar la energía y la función de ondas del estado fundamental del ion molecular H_2^+ . Una función de prueba razonable será una combinación lineal de orbitales atómicos, es decir, una combinación de las funciones correspondientes a considerar el electrón ligado a uno y otro protones, respectivamente.

Si en la ecuación electrónica [24.5.1] situamos al electrón en las proximidades de uno de los protones, por ejemplo el A:

$$\frac{e^2}{r_1} \gg \frac{e^2}{r_2} - \frac{e^2}{R}$$

con lo que la ecuación [24.5.1] se puede escribir aproximadamente:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right\} \phi_e \approx E_e \phi_e \quad [24.5.4]$$

que es la ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno, de manera que en las proximidades de los núcleos, la función del electrón coincidirá aproximadamente con la del átomo de hidrógeno.

La función de ondas del estado fundamental del átomo de hidrógeno es:

$$\varphi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r_e/a_0} \quad [24.5.5]$$

y si llamamos:

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r_1/a_0} & r_1 &= |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_A| \\ \varphi_2 &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r_2/a_0} & r_2 &= |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_B| \end{aligned} \quad [24.5.6]$$

una función de prueba razonable será:

$$\varphi = C_1 \varphi_1 + C_2 \varphi_2 \quad [24.5.7]$$

De acuerdo con el principio variacional, debemos minimizar:

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \varphi | H | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} = E(C_1, C_2) \quad [24.5.8]$$

lo cual permitirá obtener los parámetros C_1 y C_2 adecuados. Teniendo en cuenta [24.5.7], al imponer en [24.5.8] las condiciones:

$$\frac{\partial E}{\partial C_1} = \frac{\partial E}{\partial C_2} = 0$$

se obtiene:

$$\begin{aligned}(H_{11} - ES_{11})C_1 + (H_{12} - ES_{12})C_2 &= 0 \\ (H_{21} - ES_{21})C_1 + (H_{22} - ES_{22})C_2 &= 0\end{aligned}\quad [24.5.9]$$

siendo:

$$S_{ij} = \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle \quad H_{ij} = \langle \varphi_i | H_e | \varphi_j \rangle$$

Como las funciones [24.5.6] están normalizadas, llamando:

$$S_{12} = S_{21} = S \quad [24.5.10]$$

y teniendo en cuenta la expresión de H_e de [24.5.1], se obtiene:

$$H_{12} = H_{21} = \left(-E_0 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right) S - A \quad [24.5.11]$$

$$H_{11} - H_{22} = -E_0 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} - C \quad [24.5.12]$$

siendo:

$$d\mathbf{r}_e = dx dy dz = d\tau$$

$$A = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle \varphi_1 | \frac{1}{r_1} | \varphi_2 \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\pi a_0^3} \int e^{-r_1/a_0} \left(\frac{1}{r_1} \right) e^{-r_2/a_0} d\mathbf{r}_e \quad [24.5.13]$$

$$C = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle \varphi_1 | \frac{1}{r_2} | \varphi_1 \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\pi a_0^3} \int e^{-r_1/a_0} \left(\frac{1}{r_2} \right) e^{-r_1/a_0} d\mathbf{r}_e \quad [24.5.14]$$

$$S = \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle = \frac{1}{\pi a_0^3} \int e^{-r_1/a_0} e^{-r_1/a_0} d\mathbf{r}_e \quad [24.5.15]$$

y E_0 la energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno ($-13,6$ eV).

La integral S que aparece en estas expresiones se conoce como integral de solapamiento de las funciones de onda atómicas. La integral C da cuenta de la modificación que sufre la energía de repulsión entre los núcleos debido a la presencia de la carga electrónica. Por último, la integral A , integral de resonancia, influye en la posibilidad de que la función del electrón oscile entre ambos núcleos.

El sistema de ecuaciones [24.5.9] es homogéneo, por lo que para que tenga solución distinta de la trivial es necesario que:

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} - ES \\ H_{21} - ES & H_{11} - E \end{vmatrix} = 0$$

ecuación de segundo grado en E cuyas soluciones son :

$$E_p = \frac{H_{11} + H_{12}}{1 + S} \quad [24.5.16]$$

$$E_i = \frac{H_{11} - H_{12}}{1 - S} \quad [24.5.17]$$

Sustituyendo estas soluciones en [24.5.9] obtenemos los valores de los parámetros C_1 y C_2 . Sustituyendo [24.5.16] en [24.5.9] se obtiene:

$$C_1 = C_2$$

y obligando a que la función de ondas electrónica [24.5.7] esté normalizada, se calcula el valor común de ambos parámetros, con lo que:

$$\varphi_p = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} (\varphi_1 + \varphi_2) \quad [24.5.18]$$

Esta solución es par respecto a una reflexión en el plano perpendicular al eje de la molécula trazado a igual distancia de ambos núcleos (véase figura 24.5).

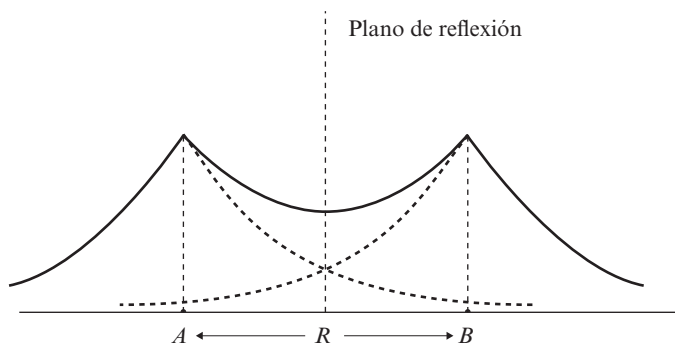


Figura 24.5. Simetría de la solución par del ion molecular H_2^+ .

Si en lugar de la solución [24.5.16] se usa la [24.5.17], se llega a :

$$C_1 = -C_2$$

$$\varphi_i = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} (\varphi_1 - \varphi_2) \quad [24.5.19]$$

función impar en la misma reflexión anterior (véase figura 24.6).

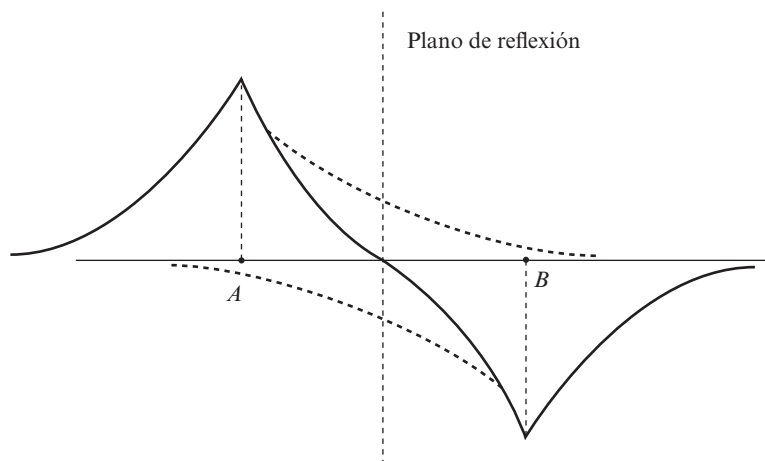


Figura 24.6. Simetría de la solución impar del ion molecular H_2^+ .

En la figura 24.5 puede observarse que la función par [24.5.18] da una elevada probabilidad de encontrar al electrón entre los dos núcleos, por lo que en este término electrónico la «carga negativa» se «sitúa» entre las positivas de los protones y, por tanto, efectúa el «enlace» entre ellos. Por el contrario, en la función impar [24.5.9] la probabilidad de encontrar al electrón entre los núcleos es muy pequeña (véase figura 24.6) y, por tanto, no liga a las positivas.

Este resultado se puede confirmar calculando las energías de ambos términos electrónicos E_p y E_i haciendo uso de [24.5.16] y [24.5.17], para lo cual es necesario evaluar las integrales A , C y S . Si el resultado se representa en función de R (véase figura 24.7), se observa que mientras $E_i(R)$ disminuye monótonamente con R , $E_p(R)$ presenta un mínimo para un cierto valor de R . Haciendo uso de los valores de las constantes se puede obtener que este mínimo corresponde en el ion molecular H_2^+ a una distancia internuclear de 1.32 \AA y a un valor de $(E_p)_{\min}$ de -1.77 eV (véase ejercicio 24.2). Si tenemos en cuenta que en la ecuación [24.4.12] $E_e(\mathbf{r})$ es la energía potencial en la que se mueven los núcleos, está claro que al ser $E_p(\mathbf{r})$ un pozo de potencial en él estarán los niveles ligados; en cambio, $E_i(\mathbf{r})$ es una barrera de potencial que impide a los núcleos acercarse y, por tanto, no hay ligadura.

La separación entre los núcleos obtenida experimentalmente es de 1.06 \AA y la energía de enlace -2.80 eV , que son diferentes a los que se han obtenido en los cálculos. La razón se encuentra en que se ha utilizado una función de prueba que no tiende a las funciones de ondas del ion He^+ cuando $R \rightarrow 0$, como debería ser. Sin embargo, si modificamos las funciones de prueba introduciendo una carga efectiva para el núcleo, se obtienen valores más próximos a los experimentales. Así, si la carga nuclear es de $-1228 e$, se obtiene para la posición de equilibrio de los núcleos $(R)_{\text{min}} = 1.06 \text{ \AA}$ y una energía de ligadura $(E_p)_{\text{min}} = -2.25 \text{ eV}$. A pesar de todo, la descripción cualitativa obtenida por el método variacional es esencialmente correcta.

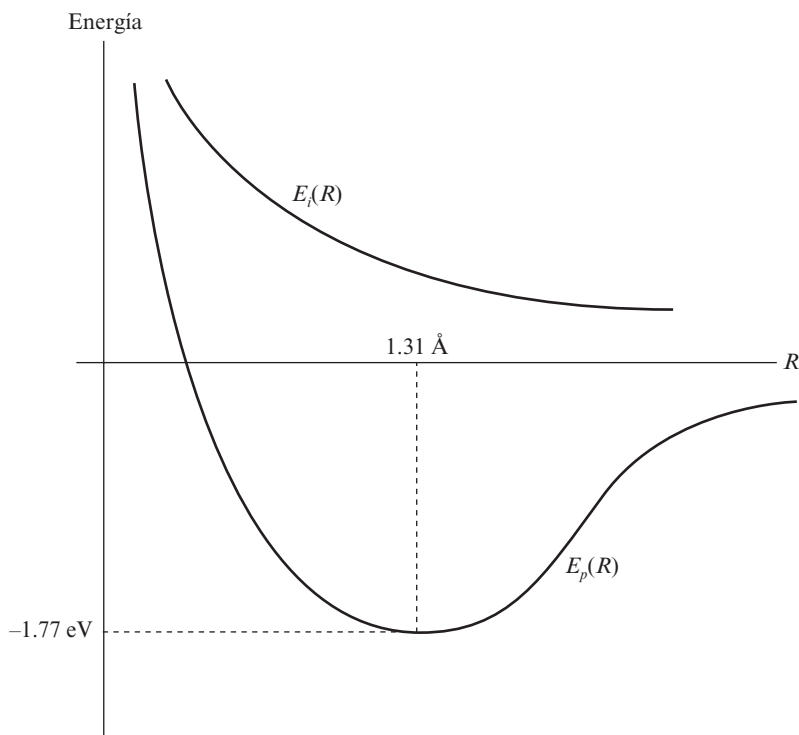


Figura 24.7. Energía de las soluciones de la molécula H_2^+ . Obsérvese cómo $E_p(R)$ tiene forma de un pozo de potencial.

La técnica que se ha empleado de tomar como funciones de orden cero para el método variacional una combinación lineal de orbitales atómicos se denomina de hibridación o LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals). Con este procedimiento, para cada conjunto de orbitales atómicos (uno por cada átomo que compone la molécula) aparece igual número de orbitales moleculares. Así, en el caso del ion molecular H_2^+ que se ha estudiado, con los orbitales $1s$ de los átomos de partida aparecen los orbitales φ_p y φ_i .

EJERCICIOS

24.1. Las integrales que aparecen en [24.5.13], [24.5.14] y [24.5.15] responden a la forma:

$$S = \frac{1}{n} \int e^{-(r_A+r_B)} d\tau$$

Evaluar estas dos integrales usando coordenadas elípticas.

24.2. Haciendo uso del resultado del problema anterior, evaluar E_p y E_i de la figura 24.7.

24.3. Un procedimiento experimental de medida del momento dipolar permanente de las moléculas que componen un gas molecular consiste en introducir éste en el interior de un condensador y, a través de la medida de su capacidad, determinar el valor de la constante dieléctrica del gas y a partir de ella determinar dicho momento dipolar. Encontrar la expresión que permite realizar dicha medida.

24.4. La molécula de NO viene bien descrita por un potencial de Morse:

$$u = D\{[1 - e^{-\beta(r-r_0)}]^2 - 1\}$$

donde $D = 5.29$ eV, $r_0 = 1.06$ Å y $\beta = 2 \times 10^{10}$ m⁻¹. Dibujar este potencial e interpretar físicamente las constantes que intervienen en él.

24.5. En el ion molecular H₂⁺ encontrar la función de ondas y la energía del electrón cuando $R \rightarrow 0$ y cuando $R \rightarrow \infty$.

25

Términos moleculares

José Luis Escudero
José Manuel Guerra

25.1. INTRODUCCIÓN

En el capítulo anterior hemos visto cómo la aproximación adiabática permitía la separación del movimiento electrónico del de los núcleos. En el caso de la molécula más simple (H_2^+), formada por dos protones y un electrón, mediante el método variacional, pudimos construir soluciones de la ecuación electrónica a partir de orbitales atómicos; estas soluciones se llaman términos moleculares. Esta molécula H_2^+ desempeña en la física molecular, en cierto modo, un papel semejante al que en la física atómica representa el átomo de hidrógeno, que era el único que se podía resolver exactamente.

Si la molécula tiene más de un electrón, aparecen problemas añadidos, análogos a los de los átomos multielectrónicos, tales como el de la identidad de las partículas. También en este caso la ecuación electrónica puede ser resuelta en aproximación de un electrón mediante el método de Hartree, en cuyo caso el principio de exclusión de Pauli se materializa permitiendo que en cada orbital o término electrónico molecular se puedan alojar hasta dos electrones con espines opuestos.

En este capítulo vamos a investigar el comportamiento de los electrones en moléculas diatómicas, es decir, sometidos al campo eléctrico de dos núcleos positivos mantenidos a una distancia fija. En capítulos sucesivos se estudiará el efecto que tienen los cambios que puedan producirse en la distancia internuclear.

Aunque el problema de resolver la ecuación electrónica de las moléculas se complica enormemente, incluso en moléculas diatómicas, al crecer el número de electrones, se puede predecir, para las moléculas diatómicas, el comportamiento de los electrones en algunos casos límites; así, si la distancia internuclear se redujera hasta que los dos núcleos coincidieran, los estados electrónicos de la molécula se convertirían en los de un átomo cuya carga nuclear fuera la suma de las de los núcleos de la molécula. Si, por el contrario, se aumenta la distancia internuclear hasta infinito, los niveles electrónicos de la molécula deben tender hacia los de los dos átomos resultantes de la disociación de la molécula. Entre estos dos casos extremos está el real de la molécula diatómica, en la que la configuración electrónica está influenciada por el campo eléctrico debido a ambos núcleos. El efecto de este campo sobre los estados electrónicos no debe diferir grandemente del efecto de un campo eléctrico exterior sobre la configuración electrónica del átomo obtenido en el caso límite de fusionar ambos núcleos, siempre que el enlace molecular sea suficientemente fuerte como para que la distancia internuclear sea pequeña, es decir, en este caso

los términos electrónicos de la molécula deben ser similares a los correspondientes al efecto Stark del átomo equivalente. Si, por el contrario, la molécula posee un enlace débil y, por tanto, gran distancia internuclear (por ejemplo, moléculas de van der Waals), la situación molecular podrá ser descrita mejor comparándola con la correspondiente a los átomos completamente separados. Este procedimiento, debido a Hund, permite predecir con buena aproximación el diagrama de los términos moleculares de las moléculas diatómicas. En cualquier caso, el comportamiento de los electrones moleculares, lo mismo que los de los átomos, se podrá describir cuantitativamente por sus funciones de ondas, o por los correspondientes números cuánticos, como veremos a lo largo de este capítulo.

25.2. CLASIFICACIÓN DE LOS TÉRMINOS MOLECULARES EN APROXIMACIÓN DE UN ELECTRÓN

Para proceder a la clasificación de los términos moleculares, actuaremos de forma similar a lo que hicimos en el caso de los orbitales de los átomos multielectrónicos en aproximación de un electrón, considerando a cada electrón sometido al correspondiente potencial de Hartree¹; la diferencia fundamental estriba en que en el caso molecular el potencial al que está sometido el electrón deja de ser central debido a la presencia de dos centros de carga positiva (en las moléculas diatómicas).

Como hemos visto en el caso del ion molecular H_2^+ (ecuación [24.5.2]), los términos moleculares de una molécula diatómica homonuclear se caracterizan por tres números cuánticos orbitales, a los que habría que añadir, al igual que en los átomos, la tercera componente de espín.

En el caso de una molécula diatómica, el potencial de Hartree en aproximación de un electrón, debido a la presencia de dos centros de carga positiva, no es un potencial central, sino de simetría cilíndrica alrededor del eje molecular que une ambos núcleos; por tanto, L^2 no es un observable que commute con el hamiltoniano y por eso ℓ no es un buen número cuántico de la molécula, de manera similar a lo que hemos visto en el caso de los efectos Zeeman y Stark atómicos, en donde las direcciones del campo eléctrico o magnético hacen el mismo efecto que el campo axial de la molécula y:

$$\frac{dL_z}{dt} = 0 \quad L_z = \text{cte} \quad [25.2.1]$$

L_z es, clásicamente, una constante del movimiento del electrón y, por tanto, cuánticamente los autovalores, m_ℓ del operador L_z son buenos números cuánticos.

Así pues, los términos electrónicos se caracterizarán por los valores del número cuántico m_ℓ :

$$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2 \quad [25.2.2]$$

¹ Promediando el efecto de los demás electrones.

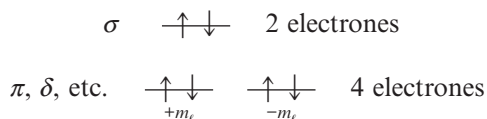
Ahora bien, la energía no depende del sentido de giro del electrón en la órbita y, por tanto, los términos correspondientes a los valores de m_ℓ positivos y negativos corresponderán a estados degenerados de la misma energía.

Mientras que la degeneración no sea levantada por alguna perturbación, como puede ser, por ejemplo, la rotación de la molécula, designaremos el término electrónico por el valor:

$$\lambda = |m_\ell| = 0, 1, 2, \dots \quad [25.2.3]$$

De la misma manera que en el caso de los átomos se usaban las letras s, p, d, ... en lugar de los números 0, 1, 2, ... para designar el valor de ℓ , en las moléculas para λ se usan las letras griegas σ , π , δ , etc.

El cuarto número cuántico, s , designa la dirección del espín, que se orienta de nuevo respecto al campo axial y puede tomar los valores $\pm 1/2$. Por tanto, en cada término electrónico σ caben dos electrones y en los demás cuatro:



Por otra parte, y como hemos visto en el capítulo anterior, en las moléculas homonucleares, al existir un plano de simetría ortogonal al eje molecular, las combinaciones de orbitales atómicos se pueden efectuar de forma par o impar. Si la combinación es par, se designa con la letra g (gerade) y si es impar con la u (ungerade). Además, en la aproximación de un electrón, como también ya hemos visto, los términos electrónicos se pueden formar dando lugar a un pozo de potencial en la ecuación de los núcleos (términos ligantes), o bien antiligantes. Si el término resultante no es ligante, se indica con un asterisco. Finalmente, en esta aproximación el orbital molecular se obtiene a partir de orbitales atómicos, por lo que su caracterización se complementa indicando el orbital atómico Hartree del que procede:

$$\lambda_{\text{paridad}}^{\text{ligadura}} \times \text{Orbital atómico}$$

La especificación del orbital atómico suministra los otros dos números cuánticos. Así, por ejemplo, los términos que hemos estudiado en el capítulo 24 del ion molecular H_2^+ serían:



ya que al ser $\ell = 0$ los orbitales atómicos de partida ($1s$), las terceras componentes son $m_A = m_B = 0$, y son términos σ .

25.3. TÉRMINOS MOLECULARES Y ATÓMICOS. ACOPLAMIENTO DE MOMENTOS

Cuando dos átomos se unen para formar una molécula diatómica, la situación en la que se encuentra cada electrón de valencia se parece a la de los electrones de un átomo en presencia de un campo externo, debido al campo axial que aparece en la molécula en la dirección que une ambos núcleos. Cuando los átomos están separados, los momentos orbitales de cada electrón se acoplan para dar un momento orbital total L , y lo mismo los espines para dar un espín total S . Al formarse la molécula, cada electrón atómico sufre el efecto del campo axial y, según la intensidad de este campo, la situación puede parecerse a la de un efecto Zeemann o a la de un efecto Paschen-Back.

Cuando los átomos que se unen para formar la molécula, son ligeros; la situación es como la primera que hemos descrito, de forma que si se unen dos átomos con momentos orbitales L_1 y L_2 y espines S_1 y S_2 con $L_1 > L_2$, por ejemplo, las proyecciones de los momentos orbitales sobre la dirección del eje molecular en el acoplamiento de cada uno de ellos con el campo axial son:

$$\begin{aligned} M_1 &= -L_1, -L_1 + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, L_1 - 1, L_1 \\ M_2 &= -L_2, -L_2 + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, L_2 - 1, L_2 \end{aligned} \quad [25.3.1]$$

La tercera componente total podrá tomar cualquier valor resultante de la suma por parejas de los distintos M_1 y M_2 . Su valor absoluto Λ se utiliza para caracterizar el estado o término electrónico total de la molécula:

$$\Lambda = |M_1 + M_2| \quad [25.3.2]$$

El máximo valor que puede tomar Λ será $\Lambda_{\text{máx}} = L_1 + L_2$, y el mínimo $\Lambda_{\text{mín}} = 0$ y los intermedios:

$$\Lambda = L_1 + L_2, L_1 + L_2 - 1, \dots, 0$$

Cada uno de estos valores puede obtenerse sumando uno de M_1 y otro de M_2 de maneras diferentes; en la tabla 25.1 se puede ver cómo se obtienen diferentes términos en un acoplamiento. Por cada forma de sumarlos se obtiene un estado; aquellos estados que sólo se diferencian en el signo de M_1 y M_2 corresponden al mismo término.

En total el número de términos moleculares que se obtienen con todos los valores de Λ será, por tanto:

$$\sum_{i=0}^{2L_2} (i+1) + (L_1 - L_2)(2L_2 + 1) = (L_1 + 1)(2L_2 + 1) \quad [25.3.3]$$

El espín total se obtiene por composición de los espines atómicos en la forma habitual:

$$S = S_1 + S_2, S_1 + S_2 - 1, \dots, |S_1 - S_2| \quad [25.3.4]$$

TABLA 25.1
Obtención de los diferentes términos moleculares

Λ	M_1	M_2	Número de estados	Número de términos
$L_1 + L_2$	$\pm L_1$	$\pm L_2$	$2 = 2(0 + 1)$	1
$L_1 + L_2 - 1$	$\pm L_1$ $\pm(L_1 - 1)$	$\pm(L_2 - 1)$ $\pm L_2$	$1 = 2(1 + 1)$	2
$L_1 + L_2 - 2$	$\pm L_1$ $\pm(L_1 - 1)$ $\pm(L_1 - 2)$	$\pm(L_2 - 2)$ $\pm(L_2 - 1)$ $\pm L_2$	$6 = 2(2 + 1)$	3
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
$L_1 + L_2 - i$	$\pm L_1$ $\pm(L_1 - 1)$ \vdots	$\pm(L_2 - i)$ $\pm(L_2 - i + 1)$ \vdots	$2(i + 1)$	$i + 1$
$L_1 - L_2 =$ $= L_1 + L_2 -$ $- 2L_2$	$\pm L_1$ \vdots $\pm(L_1 - 2L_2)$	$\pm(L_2 - 2L_2)$ \vdots $\pm L_2$	$2(2L_2 + 1)$	$(2L_2 + 1)$
$L_1 - L_2 - 1 =$ $= L_1 + L_2 -$ $- 1 - 2L_2$	$\pm(L_1 - 1)$ \vdots $\pm(L_1 - 2L_2 - 1)$	$\pm(L_2 - 2L_2)$ \vdots $\pm L_2$	$2(2L_2 + 1)$	$(2L_2 + 1)$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
$0 = L_1 + L_2 -$ $- (L_1 - L_2) -$ $- 2L_2$	$L_1 - L_1 + L_2$ \vdots $L_1 - L_1 - L_2$	$L_2 - 2L_2$ \vdots L_2	$2L_2 + 1$	$2L_2 + 1$

Para designar los términos según el valor de Λ se utilizan letras griegas mayúsculas según el siguiente código:

$$\Lambda = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad \dots$$

$$\Sigma \quad \Pi \quad \Delta \quad \Phi \quad \dots$$
[25.3.5]

La notación de los términos moleculares, en analogía con los atómicos, es:

$$^{2S+1}(\Lambda)$$
[25.3.6]

En las moléculas de las que nos ocuparemos, en general no se alcanzarán valores de Λ superiores a 2, es decir, términos Δ . Los orbitales atómicos en los acoplamientos mole-

culares ya son de partida compatibles con el principio de exclusión de Pauli, por lo que los términos moleculares obtenidos a partir de ellos no presentan incompatibilidades de este tipo.

25.4. TÉRMINOS DEGENERADOS

Por otra parte, al tener el potencial molecular como eje de simetría el de la molécula, debe ser invariante respecto a la reflexión en cualquier plano que contenga a este eje; en términos cuánticos, esto significa que el hamiltoniano molecular conmuta con estos operadores de reflexión, por ello, en una reflexión de este tipo la energía no debe cambiar. Sin embargo, en las reflexiones los giros cambian de sentido (véase figura 25.1) y, por tanto, los momentos angulares cambian de signo. Al aplicar la reflexión a una función de ondas correspondiente a una tercera componente $M\hbar$ del momento angular se transforma en la que corresponde a la $-M\hbar$; en esta transformación la energía y Λ no cambian, así los estados correspondientes a cada valor de Λ están degenerados.

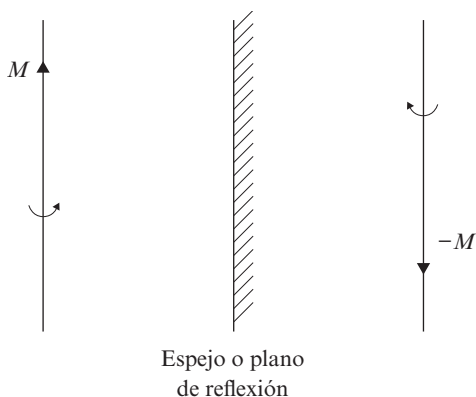


Figura 25.1. Cambio de sentido de los giros en las reflexiones.

En el caso de los términos con $\Lambda = 0$ (Σ) el estado no cambia en la reflexión ($M = -M = 0$), de manera que no se produce la degeneración que hemos descrito. Estos estados, por tanto, son autoestados del operador reflexión:

$$R_e \Sigma = r_e \Sigma \quad [25.4.1]$$

como, por otro lado, el cuadrado del operador reflexión debe ser la identidad:

$$\Sigma = R_e^2 \Sigma = R_e(R_e \Sigma) = r_e R_e \Sigma = r_e^2 \Sigma \quad [25.4.2]$$

es decir:

$$r_e^2 = 1 \quad r_e = \pm 1 \quad [25.4.3]$$

con lo que habrá términos Σ cuya función de ondas cambie de signo en la reflexión en un plano que contenga al eje molecular y otros en los que no cambie:

$$\begin{aligned} R_e \Sigma^+ &= \Sigma^+ \\ R_e \Sigma^- &= \Sigma^- \end{aligned} \quad [25.4.4]$$

Ya hemos indicado que si se separasen los átomos que forman la molécula hasta una distancia infinita, el comportamiento de cada electrón vendría descrito por su función de ondas atómica correspondiente, con lo que la función de ondas de la molécula se podría entonces escribir en forma de productos de las funciones de ondas de ambos átomos.

En esta situación límite, las funciones de ondas para el caso $\Lambda = 0$ se pueden poner:

$$\begin{aligned} \text{Si } \Lambda = 0 &\Rightarrow M_1 = -M_2 = M \\ \phi^+ &= \phi_M^{(1)}\phi_{-M}^{(2)} + \phi_{-M}^{(1)}\phi_M^{(2)} \\ \phi^- &= \phi_M^{(1)}\phi_{-M}^{(2)} - \phi_{-M}^{(1)}\phi_M^{(2)} \end{aligned} \quad [25.4.5]$$

Es evidente que en la reflexión:

$$\begin{aligned} R_e \phi^+ &= \phi^+ \\ R_e \phi^- &= \phi^- \end{aligned} \quad [25.4.6]$$

con lo que es razonable usar las funciones de ondas ϕ^+ y ϕ^- como funciones de partida para obtener los correspondientes términos moleculares por el procedimiento LCAO².

En el caso de que $M_1 = M_2 = 0$ el procedimiento anterior no es válido y no pueden construirse las funciones anteriores, con lo que este caso debe de ser tratado aparte. En este caso se puede formar el producto:

$$\phi = \phi_0^{(1)}\phi_0^{(2)} \quad [25.4.7]$$

Antes de analizar el efecto que sobre esta función de ondas produce la operación de reflexión, recordemos que (véase figura 25.2) una reflexión se puede poner como el producto de una inversión y una rotación de 180° alrededor de un eje perpendicular al plano del espejo.

Recordemos, además, que las funciones atómicas que estamos empleando proceden de las funciones de Hartree en aproximación de un electrón. En la operación de inversión, estas funciones atómicas se comportan dependiendo de su paridad, siendo la paridad total

² Siempre que M sea distinto de cero en un orbital Σ , es decir, si $L_1 > L_2$, cuando M valga:

$$M = L_2, L_2 - 1, \dots, 2, 1$$

se obtendrán L_2 orbitales Σ^+ y otros tantos Σ^- .

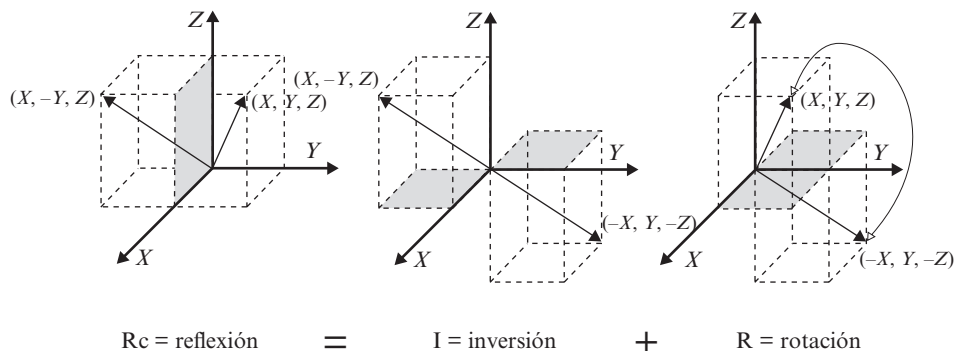


Figura 25.2. Operación de reflexión como producto de una inversión por una rotación de 180°.

del término molecular el producto de las paridades de las funciones de Hartree que lo componen. Si denominamos por i la paridad del conjunto, el efecto de la inversión será:

$$i = \begin{cases} 1 \rightarrow \text{par} \\ -1 \rightarrow \text{impar} \end{cases} ; \quad I\phi_0 = i\phi_0 \quad [25.4.8]$$

con lo que en [25.4.7]:

$$I\phi = i_1 i_2 \phi \quad [25.4.9]$$

En la rotación de 180° antes citada, si ϑ es la coordenada esférica angular sobre el eje Z (véase figura 25.1), se produce la transformación:

$$\cos \vartheta \rightarrow -\cos \vartheta$$

Cuando $m = 0$ las partes angulares de las funciones atómicas son proporcionales a $P_\ell(\cos \vartheta)$, cuya paridad es $(-1)^\ell$. Los productos de estas funciones se transforman en la rotación de 180° con el L total al cambiar $\cos \vartheta$ en $-\cos \vartheta$:

$$R_{180}\phi_0 = (-1)^L \phi_0 \quad [25.4.10]$$

y como consecuencia:

$$R_{180}\phi_0 = (-1)^{L_1 + L_2} \phi_0 \quad [25.4.11]$$

Haciendo uso de [25.4.9] y [25.4.11], el resultado de la reflexión será:

$$R_c \phi = i_1 i_2 (-1)^{L_1 + L_2} \phi \quad [25.4.12]$$

con lo que ya podemos afirmar que el término Σ en el que $M_1 = M_2 = 0$ será Σ^+ o Σ^- según que:

$$\begin{aligned} i_1 i_2 (-1)^{L_1 + L_2} &\rightarrow +1(\Sigma^+) \\ &\rightarrow -1(\Sigma^-) \end{aligned} \quad [25.4.13]$$

Los términos Σ^+ y Σ^- de la misma configuración tienen energías, en general, diferentes.

Veamos, por último, la influencia en la degeneración de los términos moleculares del hecho de que la molécula esté formada por dos núcleos iguales (moléculas homonucleares), en cuyo caso el potencial molecular tiene una simetría adicional: el potencial también es simétrico respecto a un plano perpendicular al eje molecular equidistante de ambos núcleos (véase figura 25.3). Como consecuencia, el hamiltoniano es invariante respecto a una reflexión en este plano y, por tanto, conmuta con el correspondiente operador reflexión.

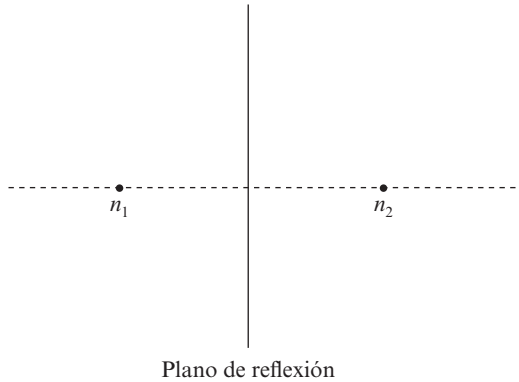


Figura 25.3. Simetría de reflexión en moléculas diatómicas homonucleares.

Si, al igual que antes, consideramos a los dos átomos a distancia infinita, otra vez las funciones de ondas moleculares serán combinaciones lineales de productos de las funciones de ondas de ambos átomos. Al aplicar a este tipo de funciones de onda la reflexión reseñada, se cambia un átomo en otro (z en $-z$ en la figura 25.2), es decir se intercambian las funciones de un átomo con las del otro. Si llamamos Φ_α y Φ_β a las funciones correspondientes a cada átomo, se pueden efectuar las dos combinaciones siguientes:

$$\begin{aligned} \phi_g &= \phi_\alpha^{(1)} \phi_\beta^{(2)} + \phi_\alpha^{(2)} \phi_\beta^{(1)} \\ \phi_u &= \phi_\alpha^{(1)} \phi_\beta^{(2)} - \phi_\alpha^{(2)} \phi_\beta^{(1)} \end{aligned} \quad [25.4.14]$$

Evidentemente, la primera es par con respecto a esta reflexión, y la segunda es impar. Esta combinación se puede realizar para cada una de las funciones atómicas que genera

cada término molecular (caracterizado por Λ y S), con lo que se obtiene en este caso homonuclear doble número de términos que en el caso heteronuclear. Esta última degeneración se simboliza con las letras g o u :

$${}^1\Sigma_g^+ , {}^3\Pi_u , {}^1\Delta_g , \text{ etc.}$$

Las combinaciones precedentes [25.4.13] no podrían haberse realizado si los dos átomos estuvieran en el mismo estado ($\alpha = \beta$), por lo que, en este caso, el número de términos obtenidos sería igual al correspondiente al caso de átomos diferentes. En analogía a la molécula H_2^+ que ya hemos estudiado, los métodos de cálculo generan en estas moléculas también términos pares e impares. Resumiendo, llamando N_g y N_u al número de términos pares e impares, respectivamente, se tienen las siguientes reglas de paridad:

$$\Lambda \neq 0$$

$$\Lambda \text{ impar (1, 3, 5, ...)} \quad N_g = N_u$$

$$s \text{ par (0, 2, 4, ...)} \quad N_g = N_u + 1$$

$$\Lambda \text{ par (2, 4, ...)} \quad s \text{ impar (1, 3, 5, ...)} \quad N_u = N_g + 1$$

$$\Lambda = 0 \text{ términos } \Sigma$$

$$S \text{ par (0, 2, 4, ...)} \quad N_g^+ = N_u^- + 1 = L + 1$$

$$S \text{ impar (1, 3, 5, ...)} \quad N_u^+ = N_g^- + 1 = L + 1$$

donde $L = L_1 = L_2$ y la paridad es:

$$2S + 1 \Sigma^+ \rightarrow (-1)^S$$

$$2S + 1 \Sigma^- \rightarrow (-1)^{S+1}$$

25.5. EJEMPLOS

Vamos ahora a aplicar las reglas estudiadas anteriormente para escribir los términos moleculares de algunas moléculas significativas.

Comenzaremos por la molécula heteronuclear CO:

$$C \dots \text{ núm. atómico: 6} \quad \text{config. electrónica: } 1s^2 2s^2 p^2$$

$$O \dots \text{ núm. atómico: 8} \quad \text{config. electrónica: } 1s^2 2s^2 p^4$$

denotando por (1) el átomo de carbono y por (2) el de oxígeno, los términos atómicos fundamentales son:

$$\begin{aligned}
 \text{C} \rightarrow 2p^2 \rightarrow {}^3P & \begin{cases} L_1 = 1 \\ i_1 = (-1)^2 = 1 \\ S_1 = 1 \end{cases} & M_1 = 1, 0, -1 \\
 \text{O} \rightarrow 2p^4 \rightarrow {}^3P & \begin{cases} L_2 = 1 \\ i_2 = (-1)^4 = 1 \\ S_2 = 1 \end{cases} & M_2 = 1, 0, -1
 \end{aligned}$$

Los términos moleculares serán:

$$\begin{array}{ll}
 \Lambda = 2, 1, 0 & 1, 3, 5\Sigma \\
 S = 2, 1, 0 & 1, 3, 5\Pi \\
 & 1, 3, 5\Delta
 \end{array}$$

Veamos, de acuerdo con las consideraciones anteriores, el número de términos que hay de cada clase. Los términos Σ^+ y Σ^- dependen del signo de la expresión [25.4.13]:

$$i_1 i_2 (-1)^{L_1 + L_2} = 1 \times 1 \times (-1)^{1+1} = 1$$

es decir, el término Σ que procede de $M_1 = M_2 = 0$ es par (Σ^+). Con $M_1 = -M_2$, pero ambos diferentes de cero ($M_1 = 1, M_2 = -1$), se pueden realizar las combinaciones ϕ^+ y ϕ^- de [25.4.5], una par y la otra impar. Con $M_1 = -1$ y $M_2 = 1$ se obtienen las mismas ϕ^+ y ϕ^- salvo factores numéricos. En definitiva, se obtienen:

$$\begin{array}{l}
 2 \text{ términos } \Sigma^+ \\
 1 \text{ término } \Sigma^-
 \end{array}$$

para cada valor del espín total.

Además para cada valor de S habrá dos términos Π ($M_1 = 1, M_2 = 0$ y $M_1 = 0, M_2 = 1$) y solamente uno Δ : $M_1 = 1, M_2 = 1$.

En definitiva

$$\begin{array}{ll}
 2 \times 1, 3, 5\Sigma^+ & 1 \times 1, 3, 5\Sigma^- \\
 2 \times 1, 3, 5\Pi & 1 \times 1, 3, 5\Delta
 \end{array}$$

Como ejemplo de molécula homonuclear vamos a ver el caso sencillo del hidrógeno H_2 , cuyos átomos (iguales) tienen como estado fundamental:

$$1s^1 \rightarrow {}^2S \begin{cases} L_1 = 0 \\ L_2 = 0 \end{cases} \begin{array}{l} S_1 = \frac{1}{2} \\ S_2 = \frac{1}{2} \end{array}$$

La única posibilidad es:

$$M_1 = M_2 = 0$$

y, por tanto, los términos moleculares posibles son:

$$\left. \begin{array}{l} \Lambda = 0 \\ S = 1, 0 \end{array} \right\} {}^1\Sigma, {}^3\Sigma$$

$$\text{si: } S = 0 \Rightarrow \text{par} \left\{ \begin{array}{l} N_g^+ = N_u^- + 1 = L + 1 = 1 \\ N_u^- = 0 \\ (-1)^s = (-1)^0 = 1 \end{array} \right.$$

Sólo existe entonces el término ${}^1\Sigma_g^+$.

$$\text{si: } S = 1 \Rightarrow \text{impar: } N_u^+ = N_g^- + 1 = L + 1 = 1$$

$$N_g^- = 0$$

$$(-1)^s = (-1)^1 = -1$$

y el término es, por tanto: ${}^3\Sigma_u^+$.

EJERCICIOS

25.1. Rehacer la tabla 25.1 en el caso particular $L_2 = 4$, $L_1 = 1$ y comprobar que se verifica la ecuación [25.3.3].

Encontrar los posibles términos moleculares que se obtienen combinando en el estado fundamental los dos átomos que componen las siguientes moléculas homonucleares:

25.2. N_2 .

25.3. Cl_2 .

Repetir la misma operación para las moléculas heteronucleares:

25.4. LiH .

25.5. HBr .

26 Interpretación física del enlace químico

José Luis Escudero
José Manuel Guerra

26.1. INTRODUCCIÓN

Ya hemos indicado anteriormente que una buena parte de fenómenos químicos encuentra su explicación teórica en la física molecular, sobre todo en la interpretación de la estructura y propiedades de las moléculas haciendo uso de los métodos de la mecánica cuántica. Realmente la interpretación microscópica de los fenómenos químicos comienza con la explicación teórica de la tabla periódica (capítulo 23) y se completa en 1927 con la explicación cuántica del enlace químico en moléculas homopolares.

Cuando dos átomos se aproximan uno al otro, se producen ciertos fenómenos que afectan a ambos. Así, si los átomos pertenecen a diferentes especies atómicas, puede ocurrir que uno de ellos sea capaz de acomodar en su nube electrónica nuevos electrones con mayor facilidad que el otro, con lo que se puede producir un flujo de carga entre ambos átomos que los deje, al menos parcialmente, ionizados, uno positivamente y el otro negativamente, con lo que aparecen entre ellos fuerzas electrostáticas que los unen. Por otro lado, si los átomos que se acercan son iguales, en principio, no hay ninguna razón para que aparezca ese flujo de carga entre ellos, pero es evidente que hay moléculas en las que dos átomos iguales se atraen entre ellos de alguna manera que da como resultado una configuración estable. Este tipo de enlace (covalente) encuentra su explicación suponiendo que ciertos electrones se comparten entre ambos átomos, con lo que, en promedio, la carga neta de los dos es nula, pero existen momentos en que tienen cargas opuestas. Además, en el movimiento de los electrones hay instantes en que están entre ambos átomos produciendo una nube de carga negativa que los atrae, ya que al haber cada uno de ellos contribuido a dicha nube con un electrón, en ese instante están ambos positivamente cargados.

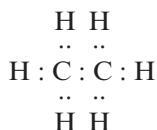
Estas ideas suministran las bases esenciales que permiten la explicación del enlace químico: en las teorías precuánticas, mediante fuerzas de atracción entre átomos, con su correspondencia en la teoría cuántica mediante la aparición de funciones de ondas de simetría adecuada, que conducen a situaciones en las que los átomos ligados presenten estados de menor energía que cuando están separados.

26.2. TEORÍAS PRECUÁNTICAS DEL ENLACE QUÍMICO

Aunque la verdadera explicación del enlace químico ha de ser cuántica, es posible encontrar algunas explicaciones parciales haciendo uso de ciertas teorías precuánticas. Así, Kessel, en 1916, pudo explicar el enlace en moléculas heteropolaras (iónicas), tales como el ClNa, como un efecto de fuerzas electrostáticas, considerando que los alcalinos, al tener un único electrón en la última capa, actúan como electropositivos, ya que al perder ese electrón alcanzan la configuración de gas noble (capa cerrada) químicamente inactivos, mientras que los halógenos son electronegativos, puesto que al aceptar un electrón adicional también alcanzan configuración de gas noble. Sobre esta base, la explicación del enlace del ClNa es muy sencilla: el átomo de Na cede su último electrón al átomo de Cl, con lo que ambos se convierten en iones (Na^+ y Cl^-); ambos tienen configuraciones electrónicas de capas cerradas y se atraen electrostáticamente.

De acuerdo con este principio, al lado izquierdo de la tabla periódica (véase tabla 26.1) se encuentran los átomos electropositivos, mientras que el penúltimo grupo a la derecha incluye a los más electronegativos. Los átomos de los grupos centrales actúan de una u otra manera según que el elemento con el que combinen esté más a la derecha o más a la izquierda que él en la tabla. Así, en la molécula de PH_3 el fósforo actúa como electronegativo, aceptando tres electrones de los hidrógenos y alcanzando la configuración del argón; sin embargo, en la molécula de PCl_5 cede cinco electrones, uno a cada átomo de cloro, y su configuración final es la del gas noble neón, actuando en este caso de forma electropositiva. Este caso constituye un claro ejemplo de la regla establecida por Abegg en 1906, según la cual la suma de las valencias positiva y negativa mayores con las que puede actuar un átomo es en todo caso 8 (número de electrones de una capa completa).

A pesar de que esta explicación del enlace iónico parece tan evidente, presenta ciertas dificultades que sólo se resuelven en el marco de la teoría cuántica de la valencia. Aparte de estas dificultades, la teoría está restringida a aquellas moléculas formadas por átomos de diferente electronegatividad, y es incapaz de explicar moléculas tales como las de H_2 , N_2 , O_2 , etc. La teoría de los octetes de Lewis (1916) es un intento de explicación no cuántica de este tipo de moléculas; esta teoría también está basada en suponer que cada capa electrónica tiene tendencia a alcanzar configuración de capa completa, es decir, ocho electrones (formar octetes). Así, Lewis representa una molécula como la de C_2H_6 (etano) en la forma:



Cada átomo de carbono (cuatro electrones en la última capa) completa el octete haciendo uso de los electrones de los átomos de hidrógeno, pero cada par de electrones es de esta manera compartido por dos átomos a la vez, que es precisamente la causa de que *liguen* entre ellos. A pesar de esto, hay moléculas, de cuya existencia no se puede dudar, en las cuales no es posible completar octetes, lo cual, sin embargo, explica Lewis en función de la actividad química de las mismas.

Aunque estas teorías precuánticas no alcanzaron un completo éxito en la explicación del enlace molecular, las ideas en las que se basan son asumidas de alguna manera por la teoría cuántica del enlace químico que desarrollaremos a continuación.

26.3. EL ESTADO FUNDAMENTAL Y LA VALENCIA

Una de las preguntas cruciales en química es por qué existen ciertas moléculas como H_2 , O_2 , NO_2 , CO , CO_2 , etc., y no se encuentran otras tales como C_5O , H_3 y NO_3 , por ejemplo. La contestación ha de buscarse en la teoría cuántica del enlace químico.

Realmente las bases cuánticas del enlace homopolar entre átomos iguales ya las hemos establecido cuando nos referimos a las fuerzas de canje en el capítulo 22. Al acoplarse dos átomos, como consecuencia del solapamiento de sus funciones de ondas, se obtendrá un sistema estable cuando su energía sea menor que la correspondiente a los átomos desacoplados. Cuando discutimos (capítulo 24) el ion molecular H_2^+ quedó claro que esta condición de mínimo de energía está fuertemente condicionada por la simetría de la función de ondas. En ese caso, cuando la función de ondas era par, el electrón tenía tendencia a situarse entre los dos protones ligándolos; en la función impar, por el contrario, la probabilidad de encontrar al electrón entre los núcleos es pequeña y no es capaz de compensar la repulsión electrostática entre ellos. En definitiva, según la mecánica cuántica, el enlace químico es el resultado de la acción de fuerzas electrostáticas, precisamente como consecuencia de la compensación de la repulsión de las cargas positivas por la densidad de carga negativa que existe entre los núcleos cuando la función de ondas es par.

Si se complica la molécula de forma que sean dos los electrones que participan en el enlace, como es el caso de la molécula de hidrógeno, la situación es similar, aunque algo más compleja, ya que, además de las consideraciones anteriores, ahora hay que hacer intervenir al principio de Pauli. Como hemos visto en el capítulo anterior, al unirse dos átomos de hidrógeno que se encuentran en el estado fundamental se forman los términos moleculares:

$${}^1\Sigma_g^+ \quad \text{y} \quad {}^3\Sigma_u^+$$

En el término singlete, la función de ondas es par y simétrica en su parte orbital, ya que, como sabemos, la de espín es antisimétrica. Así, en este caso los dos electrones tienen alta probabilidad de encontrarse juntos y entre los núcleos, con lo que, al igual que en la molécula H_2^+ , este estado es ligante. Se trata del estado de menor energía o estado fundamental.

Por el contrario, el término triplete tiene la parte espacial impar y antisimétrica, y, por tanto, se anula cuando se igualan las posiciones r_1 y r_2 de los dos electrones. Esto, junto con la naturaleza impar en la reflexión en un plano ortogonal al eje de la molécula, da una probabilidad nula de encontrar a los electrones entre los núcleos. El estado carece de mínimo de energía y es antiligante (véase figura 26.1).

Como consecuencia, el espín total del estado fundamental de la molécula H_2 es $S = 0$, y es un término singlete de carácter par. Puede decirse que esto es lo que ocurre con los

estados fundamentales de casi todas las moléculas estables. Constituyen una excepción las moléculas diatómicas O_2 y NO . En la de O_2 el estado fundamental es un término ${}^3\Sigma$, y en la de NO es un término ${}^2\Pi$. También en las moléculas triatómicas NO_2 y ClO_2 el espín total es $S = 1/2$. Con los elementos de transición del sistema periódico se producen algunas excepciones más.

Así pues, los átomos se combinan de forma que se compensen los espines de sus electrones para generar términos singletes. De forma similar a lo que indicábamos en la teoría de los octetes del apartado anterior, la tendencia de los electrones a compensar sus espines por parejas permite considerar a cada pareja como un enlace; al número de enlaces que puede formar un átomo en un determinado estado se le denomina valencia. Como cada electrón tiene un espín $1/2$, la valencia será el doble del espín total del estado atómico. Con frecuencia, cada átomo puede formar moléculas en varios estados de Hartree distintos, de forma que un mismo átomo puede presentar diferentes valencias.

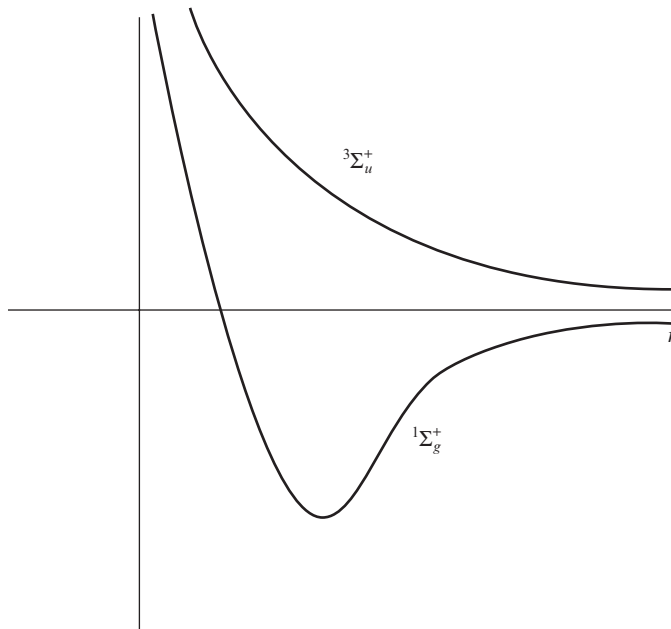


Figura 26.1. Energías de los estados singlete y triplete.

Veamos algunos ejemplos:

Helio. Configuración electrónica $1s^2$.

Los dos electrones tienen $\ell = 0$ y, por tanto, en cada átomo los dos están apareados con espines opuestos $S = 0$. Este átomo no está entonces capacitado para formar enlaces: 1S_0 .

Nitrógeno. Configuración electrónica: $1s^2 2s^2 p^3$.

Los tres electrones ópticos tienen $\ell = 1$ y difieren en m_ℓ :

$$m_\ell = 1, 0, -1$$

Al diferir en m_ℓ , los tres espines pueden estar alineados dando como resultado un espín total $S = 3/2$. Este átomo puede entonces realizar:

$$2 \times 3/2 = \text{enlaces} = 3$$

La $L_{\text{total}} = 1 + 0 - 1 = 0$, es decir:

$$\begin{aligned} L &= 0 \\ S &= 3/2 \dots {}^4S_{3/2} \end{aligned}$$

En cada estado habrá un electrón con espín desapareado:

$$\begin{array}{ccc} m_\ell = 1 & m_\ell = 0 & m_\ell = -1 \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow \end{array}$$

y, por tanto, caben tres electrones con $m_s = 1/2$ para unirse con otros tres de otros átomos con $m_s = -1/2$.

Oxígeno. Configuración electrónica: $1s^2 2s^2 p^4$.

Al igual que en el caso anterior, todos los electrones tienen $\ell = 1$ y, por tanto, también:

$$m_\ell = 1, 0, -1$$

de manera que de los cuatro electrones en el estado de Hartree hay dos que necesariamente han de estar apareados con espines opuestos para no oponerse al principio de exclusión de Pauli. Los otros dos, sin embargo, son libres para estar alineados dando $S = 1$ en el estado fundamental, de tal manera que el oxígeno puede formar:

$$2 \times 1 = 2 \text{ enlaces}$$

$$L_{\text{total}} = 1 + 1 + 0 - 1 = 1$$

$$S = 1 \qquad \dots {}^3P_2$$

$$\begin{array}{ccc} m_\ell = 1 & m_\ell = 0 & m_\ell = -1 \\ \uparrow \downarrow & \uparrow & \uparrow \end{array}$$

valencia 2.

De manera general, los elementos de la primera columna de la tabla periódica (metales alcalinos) tienen en el estado fundamental $s = 1/2$, y, por ello, su valencia es la unidad.

Los de la siguiente columna son los metales alcalino-térreos, con una configuración en la última capa s^2 y, por tanto, estado fundamental 1S_0 . En este estado, por tanto, no pueden formar enlaces. Sin embargo, el primer estado excitado, de configuración electrónica s^1p^1 , tiene una energía muy próxima a la del fundamental, por lo que es fácilmente alcanzable. En este primer estado excitado $S = 1$, por lo que los alcalinos-térreos en este estado pueden formar dos enlaces y son, por tanto, divalentes (valencia 2).

Los elementos de la tercera columna tienen la configuración s^2p^1 , por lo que su estado fundamental es 2P , y en este estado pueden formar un enlace ($2s = 1$). Pero de la misma forma que en los alcalinos-térreos, también próximo al fundamental, está el estado excitado s^1p^2 con espín total $S = 3/2$ en el que podrán formar tres enlaces. Así, estos elementos pueden actuar como mono y trivalentes. De hecho, en el boro (B) y en el aluminio (Al) es menor la energía del enlace trivalente que la de excitación y sólo se comportan como trivalentes.

En los elementos del grupo IV, la configuración de la última capa es s^2p^2 y el estado fundamental es 3P y $S = 1$. El primer estado excitado es el s^1p^3 con $S = 2$, y, por ello, las posibles valencias serán 2 y 4. El carbono (C) y el silicio (Si) tienen con el enlace tetravalente una energía inferior a la de excitación y sólo forman este tipo de enlace.

En los del grupo V, encabezado por el nitrógeno (N), la configuración electrónica es, como ya hemos visto, s^2p^3 y el estado fundamental 4S con $S = 3/2$. De la misma manera que en los dos grupos anteriores, también es posible formar enlaces en el estado excitado. En este caso, el estado excitado es el de configuración $ns^1p^3(n+1)s^1$ con espín $S = 5/2$, por lo que las posibles valencias son 3 y 5. Por ejemplo, el nitrógeno actúa con valencia 3 en el amoníaco y con 5 en el ácido nítrico (NO_3H).

El grupo VI, encabezado por el oxígeno (O), tiene una configuración s^2p^4 cuyo estado fundamental es el 3P con espín 1. Los estados excitados capaces de formar enlaces son el $ns^2p^3(n+1)s^1$ con espín $S = 2$ y el $ns^1p^3(n+1)s^1p^1$ con espín $S = 3$. Con todo esto, en este grupo las posibles valencias son 2, 4 y 6. El oxígeno sólo actúa con valencia 2, mientras que el azufre actúa con las tres posibles valencias.

El grupo de los halógenos (VII) tiene una configuración s^2p^5 en el estado fundamental con $S = 1/2$ y pueden formar enlaces en los estados excitados $ns^2p^4(n+1)s^1$ con $S = 3/2$, $ns^2p^3(n+1)s^1p^1$ con $S = 5/2$ y en el $ns^1p^3(n+1)s^1p^2$ con $S = 7/2$. Las posibles valencias son, pues, 1, 3, 5 y 7. De los elementos de este grupo el flúor (F) es siempre monovalente, pero ya el cloro (Cl) forma compuestos en las cuatro valencias apuntadas.

Los gases nobles tienen una configuración s^2p^6 y su estado fundamental es 1S , por lo que no pueden formar enlaces en este estado. Por otra parte, sus energías de excitación son muy grandes y, por tanto, difícilmente formarán compuestos en estado excitado, siendo así químicamente inertes.

Los elementos de los grupos de transición, así como las tierras raras, se caracterizan por tener capas internas incompletas. Los del grupo de transición del paladio (Pd) y del platino (Pt) utilizan los electrones de la capa incompleta para formar débiles enlaces en muchos compuestos, mientras que los de la 4s, también incompleta, forman fácilmente enlaces.

Los elementos del grupo de las tierras raras tienen incompletas las capas 4f, 6s y a veces también la 5d. La capa 4f está tan profunda que sus electrones no forman enlaces, sino que éstos se forman con los electrones 6s y 6p que aparecen en estados excitados, actuando como tri y tetravalentes. Los actínidos forman enlaces con los electrones 6d y 7s con muchas valencias diferentes con un máximo de 6.

En lo que hemos visto queda claro que en la formación de las moléculas, las capas internas completas no se ven prácticamente afectadas, mientras que los electrones de la última capa modifican fuertemente su distribución. El caso más extremo es el enlace heteropolar o iónico que hemos descrito en el apartado anterior, y que vamos a discutir ahora desde el punto de vista energético. Para fijar ideas, volvamos a estudiar el caso concreto del ClNa. En esta molécula la configuración electrónica de la última capa del cloro es 3p y la del sodio es 3s. Como ya hemos indicado, el sodio es monovalente y el Cl en este caso también actúa como monovalente, siendo, por tanto, los espines de ambos átomos $s = 1/2$. Al átomo de cloro le falta un único electrón para alcanzar la estructura estable $3s^2p^6$, con lo que el ion Cl^- es más estable que el átomo neutro Cl, siendo la energía del ion 3.8 eV menor que la del átomo neutro. Por otro lado, el Na posee un único electrón 3s en la última capa. Este electrón está muy apantallado por las capas internas y son precisos únicamente 5.1 eV para arrancarlo. Si se consigue arrancar el electrón 3s del Na y situarlo en la subcapa 3p del Cl, se obtendrán dos iones, Na^+ y Cl^- , a costa de un gasto energético de:

$$5.1 - 3.8 = 1.3 \text{ eV} \quad [26.3.1]$$

Si los dos iones están en el infinito y se van acercando, al ser su interacción atractiva, su energía va disminuyendo hasta que, debido al solapamiento entre las funciones de ondas electrónicas, decrezca el apantallamiento entre los núcleos y éstos tiendan a repelerse; además, al juntarse los iones pasarán a formar un sistema único al que es aplicable el principio de Pauli, de forma tal que algunos electrones es posible que deban pasar a estados excitados, con lo que disminuye todavía más el apantallamiento. Así, cuando los iones están a distancias grandes hay fuertes fuerzas de atracción que hacen que la distancia disminuya, pero cuando se acercan mucho aparecen fuerzas repulsivas que tienden a alejarlos; esto da como resultado una curva de potencial como la de la figura 26.2, en la que se observa un mínimo a una distancia de 2.4 Å con una energía de -4.9 eV. Si, por el contrario, consideramos en el infinito a los dos átomos neutros, su energía está 1.3 eV por debajo de la de los iones, de acuerdo con [26.3.1]. Al acercarse ambos átomos neutros, su energía no cambia apreciablemente hasta que al estar muy juntos aparece la energía de repulsión nuclear (véase figura 26.2). Como resultado de todo ello, existe una zona de distancias en las cuales se puede observar en la figura 26.2 que la situación energética es más favorable (energía más negativa) para los iones que para los átomos; en concreto, en el mínimo la situación es la más favorable.

Como es natural en las moléculas heteronucleares se dan todo tipo de situaciones intermedias entre el enlace iónico y el covalente.

26.4. GEOMETRÍA DE LOS ENLACES EN MOLÉCULAS POLIATÓMICAS

Cuando en el capítulo 23 se estudiaron los átomos polielectrónicos, ya se vio que las fuerzas de canje obligaban a que los estados con mayor multiplicidad de espín fuesen de menor energía. Asimismo, también hemos visto a lo largo de este capítulo que para que el estado de una molécula sea ligante es necesario que haya gran probabilidad de encontrar al par de electrones que intervienen en el enlace covalente entre los dos núcleos, o, equivalentemente, que las correspondientes funciones de ondas se encuentren fuertemente solapadas en la región internuclear. Son lo que podíamos llamar reglas de la máxima multiplicidad y el máximo solapamiento, que permiten profundizar en el estudio de los detalles más finos del enlace químico.

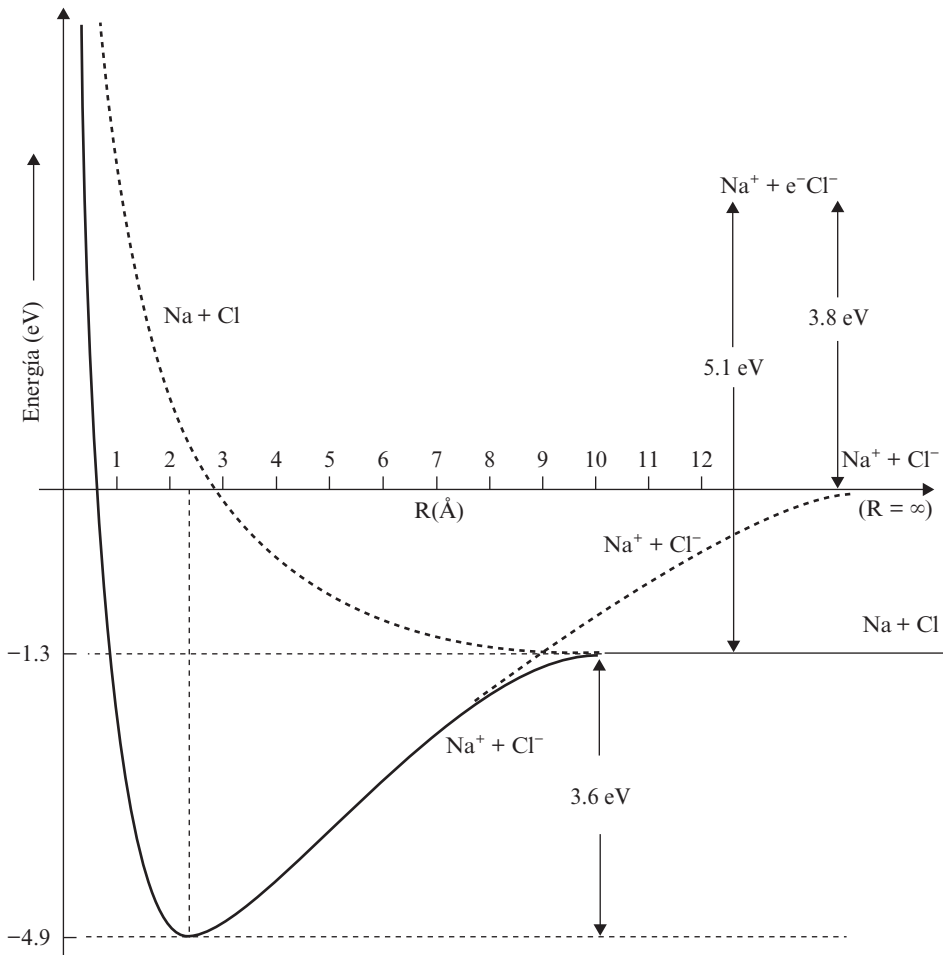


Figura 26.2. Curvas de potencial de la molécula ClNa .

Ya hemos visto que en la formación de las moléculas intervienen los electrones con espines no apareados; así, por ejemplo, en la molécula H_2O , el hidrógeno tiene un único electrón $1s$ en un orbital esféricamente simétrico y de los cuatro electrones «p» del oxígeno, en su estado fundamental, dos tendrán sus espines compensados y dos no, como consecuencia de la regla de la máxima multiplicidad. Si indicamos cada electrón por una flecha que represente la dirección del espín, el enlace se realizará en la forma que puede observarse en la figura 26.3. Algo similar ocurre con la molécula de amoníaco (NH_3) representada en la misma figura.

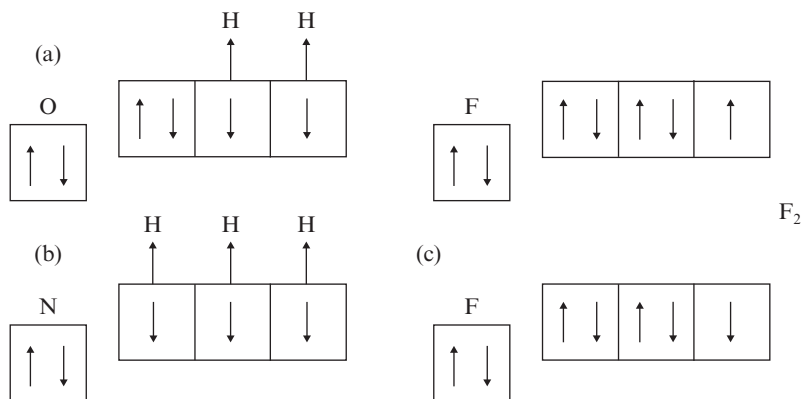


Figura 26.3. Distribución de los electrones en enlaces de algunas moléculas.

En la forma geométrica que adoptan estas moléculas tiene un papel fundamental la simetría de los orbitales (véase figura 26.4); el orbital «s» es esféricamente simétrico, pero los «p» tienen simetría axial, orientándose, por ejemplo, en el átomo de N, con sus ejes de simetría mutuamente perpendiculares (orbitales p_x, p_y, p_z). Cuando se enlazan dos átomos de nitrógeno para formar la molécula N_2 , si consideramos que el eje molecular es el eje x , por ejemplo, se solaparán fuertemente los electrones p_x pero lo harán en menor medida los p_y y los p_z (véase figura 26.5), con lo que no todos los enlaces son equivalentes.

Si estudiamos el caso de la molécula de agua y consideramos que los dos electrones capaces de formar enlace en el oxígeno están en los orbitales p_x y p_y , respectivamente, al ser esféricos los orbitales s de los dos átomos de hidrógeno, para que el solapamiento sea máximo, uno de los átomos de H deberá situarse en el eje x y el otro en el eje y (véase figura 26.6). Del análisis experimental del espectro de bandas del agua se deduce que ese ángulo debe ser de 100° en lugar de los 90° predichos, lo cual admite diversas explicaciones: que los átomos de hidrógeno situados en cada lado del ángulo recto interactúan entre sí abriendo el ángulo; que la rotación molecular estire la molécula por efecto de la fuerza centrífuga; que los enlaces no son exactamente covalentes sino parcialmente iónicos, etc. Situaciones similares ocurren en otras moléculas, como las de la tabla 26.2, cuya geométrica es fácilmente deducible. En todos los casos se observan ciertas diferencias del ángulo recto.

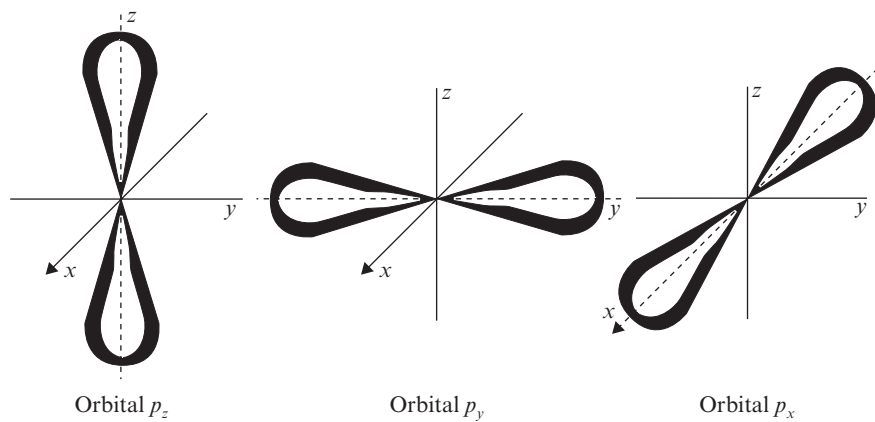


Figura 26.4. Geometría de orbitales p .

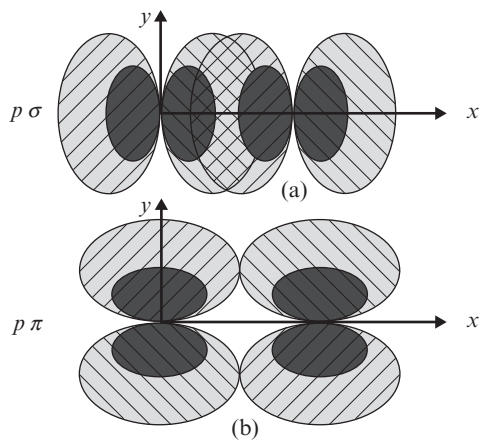


Figura 26.5. Solapamiento de orbitales p .

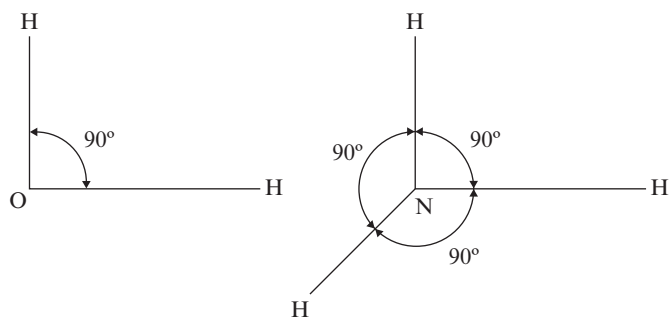


Figura 26.6. Moléculas de agua y de NH_3 .

TABLA 26.2
Geometría de algunas moléculas

	Ángulo del enlace	Momento dipolar ($Cm \times 10^{30}$)
H ₂ O	105°	6.13
H ₂ S	92°	3.10
NH ₃	109°	4.86
PH ₃	93°	1.83

26.5. MOMENTOS DIPOLARES. FUERZAS INTERMOLECULARES

El desplazamiento de la carga hacia uno de los dos átomos que participan en un enlace iónico da lugar a la aparición de un potente momento dipolar eléctrico en la molécula resultante (véase figura 26.7). Estos momentos dipolares contribuyen a los enlaces entre las moléculas que forman sólidos o líquidos, ya que tratan de orientarse de forma que las energías de interacción entre los dipolos sean mínimas. En el caso de grandes moléculas en las que intervienen varios átomos de diferentes elementos, los campos generados por los momentos dipolares de los diferentes enlaces se suman, dando lugar a la aparición de fuerzas intermoleculares cuya dependencia espacial es generalmente bastante complicada. Además, cuando hay muchos de estos dipolos la fuerza que mantiene unidas a las moléculas entre sí puede ser bastante grande.

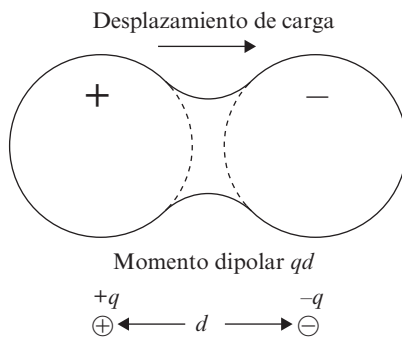


Figura 26.7. Desplazamiento de la carga en un enlace iónico.

Como consecuencia, a veces las grandes moléculas orgánicas forman cristales que funden a temperaturas moderadamente altas.

En el caso opuesto de las moléculas homonucleares que participan de enlaces covalentes, en las que los átomos sitúan a los electrones de enlace en orbitales compartidos en posición intermedia entre ellos, los átomos son en media neutros y no existe momento dipolar resultante. Sin embargo, incluso en este tipo de moléculas, éstas se atraen unas a otras. La razón para esta atracción es doble; por un lado, la concentración de carga negativa entre dos cargas positivas iguales genera en el enlace un momento cuadrupolar que permite, mediante la orientación adecuada de las mismas, una atracción entre ellas, aunque más débil que la correspondiente a los dipolos, y, además, disminuye mucho más rápidamente con la distancia. En segundo lugar, el flujo de carga de ida y vuelta entre los átomos hace que cada uno sea alternativamente positivo y negativo, con lo que aparece en el enlace un momento dipolar oscilante. Si estas oscilaciones tienen fases adecuadas en moléculas próximas, éstas pueden atraerse.

Todavía hay otro efecto electrostático que puede contribuir a la ligadura entre moléculas. Aunque una molécula o un átomo no posea un momento dipolar permanente, puede polarizarse debido a la presencia de una carga (un ion, por ejemplo), ya que al interactuar con ella se modificarán ligeramente las posiciones de sus centros de carga positiva y negativa, adquiriendo un momento dipolar que no poseía en ausencia del ion. Estos momentos dipolares inducidos pueden dar lugar a fuerzas entre ellos y también con el ion que los induce, y así producir enlaces tanto intra como intermoleculares. Colectivamente, este tipo de fuerzas se conocen como fuerzas de van der Waals, y deben distinguirse de las fuerzas que generan tanto los enlaces iónicos como los covalentes.

Vamos, por último, a hacer mención de un enlace entre grupos externos de grandes moléculas que se conoce como enlace o puente de hidrógeno. También en este tipo de enlace el efecto de la polarización es fundamental. En algunas moléculas que poseen grupos OH o NH, como puede ser, por ejemplo, la molécula de indol (véase figura 26.8), el electrón del átomo de hidrógeno es tan fuertemente atraído por el otro elemento del grupo que prácticamente se puede hablar de un protón más que de un átomo de hidrógeno. Este protón es, en definitiva, una carga positiva que puede inducir una polarización en otros grupos exteriores pertenecientes a moléculas próximas, lo que puede conducir a un enlace (atracción ion-dipolo inducido) en el cual el hidrógeno actúa como puente entre los dos grupos (véase figura 26.9). Con frecuencia, no es fácil asegurar en este tipo de enlace a cuál de las moléculas o grupo de moléculas pertenece el protón.

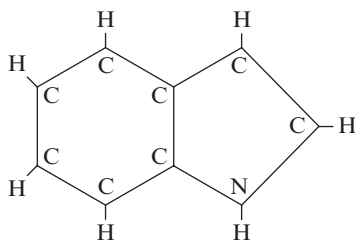


Figura 26.8. Molécula de indol.

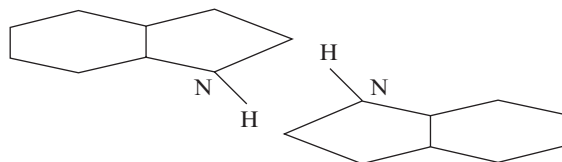


Figura 26.9. Puente de hidrógeno.

EJERCICIOS

26.1. Distribuir, de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli, los dos electrones de la molécula de H_2 entre los estados correspondientes a los términos $^1\Sigma$ y $^3\Sigma$.

26.2. Escribir las funciones de ondas adecuadas de cada uno de los estados que se obtienen de los dos términos $^1\Sigma$ y $^3\Sigma$ de la molécula de hidrógeno.

26.3. Suponer que la energía potencial del movimiento nuclear en una molécula diatómica viene dada en unidades atómicas por la expresión:

$$E(R) = \frac{1}{11} \left(\frac{1}{R^{12}} - \frac{12}{R} \right)$$

donde R es la distancia internuclear. Dibujar en la misma gráfica, para R entre 0.7 y 5.0 rydbergs, $E(R)$, el valor medio de la energía cinética y el valor medio de la energía potencial, y discutir sobre tal gráfica la causa del enlace en dicha molécula.

26.4. A partir de un orbital s y otro p_z se construyen los orbitales híbridos:

$$h = (2)^{-1/2}(s + p_z) \quad \text{y} \quad h' = (2)^{-1/2}(s - p_z)$$

Determinar el ángulo formado por las direcciones de dichos orbitales.

26.5. Hibridar adecuadamente los orbitales s , p_x y p_y para obtener tres orbitales híbridos en el plano xy que formen entre sí ángulos de 120° .

27

El movimiento de los núcleos

José Luis Escudero
José Manuel Guerra

27.1. INTRODUCCIÓN

La forma de designar a los distintos estados moleculares ha sido ya abordada en anteriores capítulos. Sin embargo, en ningún caso hemos tenido en cuenta el movimiento relativo de los núcleos que componen la molécula. Este movimiento dará lugar a una nueva estructura de niveles moleculares. De la misma manera que en el caso atómico, no tendremos en cuenta los movimientos de traslación del sistema molecular completo, ya que darán lugar a estados continuos de energía.

Las moléculas diatómicas están formadas por dos átomos que se mantienen unidos por los electrones de valencia a través de diversos tipos de enlace que hemos estudiado en el capítulo anterior. También en dicho capítulo se ha visto que para que el enlace sea ligante, la energía potencial de la molécula ha de presentar un mínimo cuando se la representa en función de la distancia internuclear. Si los núcleos se encuentran separados a la distancia a la que la energía potencial es mínima y algún agente exterior (por ejemplo, un choque con otra molécula) reduce esta distancia, aparecen fuerzas que tratan de restaurar la posición de equilibrio. Por efecto de estas fuerzas los núcleos vibran alrededor de dicha posición y son muchos e importantes los fenómenos moleculares que tienen relación con estas vibraciones moleculares.

Además de la vibración de los núcleos, también es posible que la molécula ejecute movimientos de rotación alrededor de algún eje perpendicular al eje de la molécula diatómica.

Los dos movimientos descritos están cuantificados, por lo que dan lugar a la aparición de niveles de energía a añadir a los electrónicos que hemos estudiado, lo cual es la causa de la enorme complicación de los espectros moleculares. La forma correcta de considerar los movimientos nucleares es plantear y resolver la ecuación de Schrödinger del sistema teniendo en cuenta los posibles movimientos relativos de los núcleos.

Afortunadamente, al analizar los complicados espectros moleculares puede inferirse que los niveles energéticos de las moléculas pueden distribuirse en una serie de grupos separados, cada uno de ellos correspondiente a un nivel de energía electrónica diferente. Dentro de cada uno de estos grupos hay una serie de subniveles de diferente energía que se pueden asignar a los diferentes estados vibracionales de los núcleos, subniveles que presentan una estructura fina debida a la rotación de la molécula (véase figura 27.1).

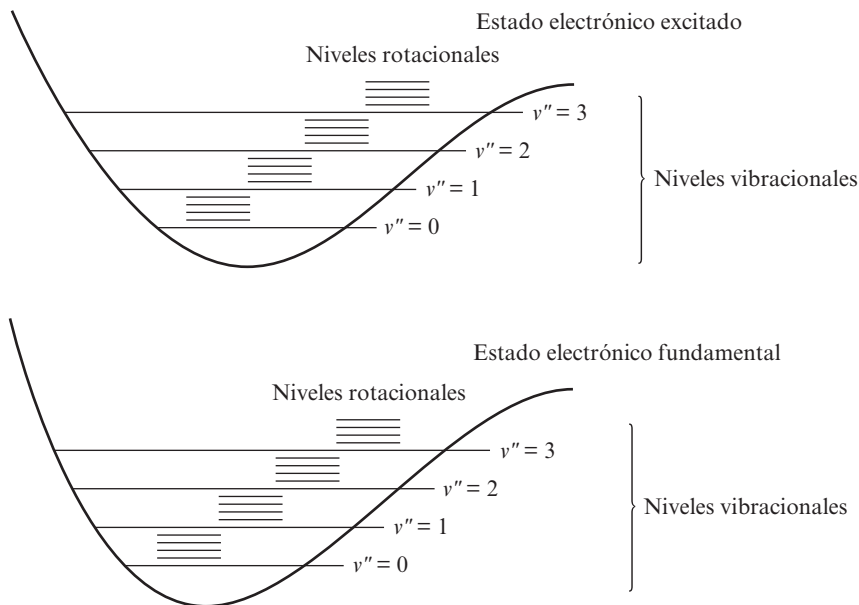


Figura 27.1. Estructura de niveles moleculares.

27.2. LAS ROTACIONES Y VIBRACIONES MOLECULARES

En este apartado vamos a considerar el movimiento más sencillo que puede realizar una molécula diatómica: el de rotación alrededor de un eje que, pasando por el centro de masas de la molécula, sea perpendicular al eje molecular (línea que une ambos núcleos). En definitiva, es un rotador con eje rígido ya discutido anteriormente, pero que recordaremos brevemente.

Si llamamos r_A y r_B a las distancias de cada núcleo al eje, el momento de inercia de la molécula para su giro alrededor de este eje es:

$$I = M_A r_A^2 + M_B r_B^2 \quad [27.2.1]$$

que se convierte en:

$$I = \mu_{AB} R_0^2 \quad [27.2.2]$$

en el sistema del centro de masas:

$$\mathbf{r}_A = \frac{M_B}{M_A + M_B} \mathbf{R}_0 \quad \mathbf{r}_B = \frac{M_A}{M_A + M_B} \mathbf{R}_0$$

(véase figura 27.2) siendo:

$$\mu_{AB} = \frac{M_A M_B}{M_A + M_B} \quad [27.2.3]$$

la masa reducida del sistema, despreciando la masa de los electrones.

Como sabemos, el movimiento se puede reducir al de una partícula de masa μ_{AB} que gira alrededor del centro de masas con energía cinética de rotación (véase figura 27.2):

$$E_r = \frac{1}{2} \mu_{AB} v^2$$

El momento angular en esta rotación relativa será:

$$\mathbf{L}_r = \mathbf{R}_0 \times \mu_{AB} \mathbf{v} \quad ; \quad L_r = \mu_{AB} v R_0 \quad ; \quad v = \frac{L_r}{\mu_{AB} R_0}$$

con lo que:

$$E_r = \frac{1}{2} \frac{L_r^2}{\mu_{AB} R_0^2} = \frac{1}{2} \frac{L_r^2}{I}$$

$$I = \mu_{AB} R_0^2 \quad [27.2.4]$$

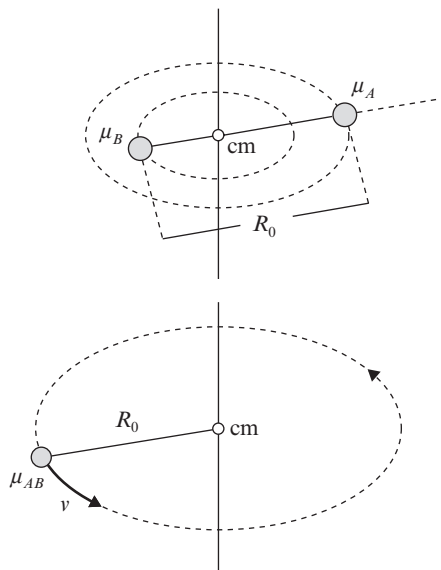


Figura 27.2. Rotador de eje rígido.

La cuantificación del movimiento de rotación se traduce en que el módulo del momento angular no puede tomar más que los valores:

$$r(r + 1)\hbar^2 \quad r = 0, 1, 2, \dots \quad [27.2.5]$$

y, por tanto, los posibles valores de la energía:

$$E_r = \frac{\hbar^2 r(r + 1)}{2\mu_{AB}R_0^2} = \frac{\hbar^2}{2I} r(r + 1) \quad [27.2.6]$$

En la tabla 27.1 se dan los valores de $\hbar^2/2I$ para algunas moléculas. Obsérvese que a temperatura ambiente la energía térmica es del orden de $kT \approx 2.5 \times 10^{-2}$ eV, siendo k la constante de Boltzmann, mientras que los valores de la tabla son mucho menores ($\approx 10^{-4}$ eV).

TABLA 27.1
Constantes de rotación-vibración de algunas moléculas

Molécula	$\hbar^2/2I$, eV	$B = \hbar/4\pi I c$, cm^{-1}	$\hbar\omega_0$, eV	$\bar{\nu}_0$, cm^{-1}
H ₂	8.00×10^{-3}	60.809	0.543	4395
Cl ₂	3.10×10^{-5}	0.244	0.0698	565
N ₂	2.48×10^{-4}	2.010	0.292	2360
Li ₂	8.30×10^{-4}	0.673	0.0434	351
O ₂	1.78×10^{-4}	1.446	0.194	1580
CO	2.38×10^{-4}	1.931	0.268	2170
HF	2.48×10^{-3}	20.94	0.510	4138
HCl	1.31×10^{-3}	10.59	0.369	2990
HBr	1.05×10^{-3}	8.47	0.326	2650
BeF	1.84×10^{-4}	1.488	0.151	1266

En el razonamiento anterior se ha considerado a la molécula como un cuerpo rígido que podía girar sin deformarse alrededor de un eje; en realidad, la molécula no es tan rígida, sino que la distancia internuclear puede variar en un movimiento de vibración de los núcleos. Si consideramos la curva de potencial electrónico de una molécula diatómica (véase figura 27.3), R_0 es la distancia internuclear de equilibrio (con los núcleos en reposo), pero si los núcleos poseen una cierta energía E en su movimiento relativo, la mecánica clásica nos indica que su movimiento se llevará a cabo entre las posiciones a y b , puesto que la energía potencial no puede superar a la total. Si la curva de potencial fuera una parábola de ecuación:

$$V = \frac{1}{2} k_e (R - R_0)^2 \quad [27.2.7]$$

este movimiento sería un movimiento armónico simple entre a y b que en mecánica cuántica poseería una energía cuantificada:

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 \quad v = 0, 1, 2, \dots \quad [27.2.8]$$

donde el número cuántico v es el vibracional. La frecuencia del movimiento sería:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k_e}{\mu_{AB}}} \quad [27.2.9]$$

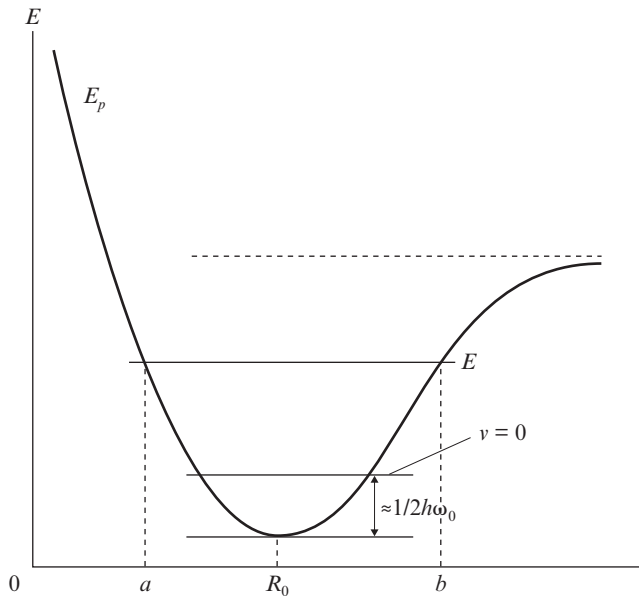


Figura 27.3. Oscilaciones nucleares.

27.3. CALOR ESPECÍFICO DE LOS GASES MOLECULARES

Aparte de la espectroscopía, una evidencia clara de la necesidad de cuantificar los niveles vibro-rotacionales de las moléculas diatómicas de acuerdo con las expresiones [27.2.6] y [27.2.8] se puede encontrar en las desviaciones de los datos experimentales frente a las previsiones de la teoría clásica en lo referente a los calores específicos de los gases moleculares.

Una molécula diatómica posee seis grados de libertad de movimiento: tres de ellos correspondientes a las tres traslaciones de su centro de gravedad; dos grados de libertad de rotación, uno por cada uno de los ángulos, que fijan en el espacio la posición del eje

molecular, y un grado de libertad de vibración de los núcleos correspondiente a la variación de la distancia internuclear, aunque este último debe contabilizarse dos veces en el cálculo del calor específico, ya que a él contribuyen tanto la energía potencial como la cinética de vibración. De acuerdo con el clásico principio de equipartición de la energía, el calor específico de una molécula es $k/2$ por cada grado de libertad, con lo que, en virtud de los anteriores razonamientos, el calor específico de las moléculas diatómicas debería ser $7k/2$ para cada una de ellas. Sin embargo, experimentalmente, en la casi totalidad de los gases moleculares se observa un calor específico de $5k/2$ por molécula a temperaturas intermedias y solamente a muy altas temperaturas de varios miles de grados el calor observado es de $7k/2$ por molécula, en consonancia con lo previsto por la teoría clásica.

Este fallo puede evitarse si se supone, de acuerdo con los resultados cuánticos, que las energías de vibración y rotación moleculares están cuantificadas, de tal manera que cualquiera de ellas sólo admite variaciones discretas correspondientes a ciertos saltos cuánticos. Consideremos, por ejemplo, el caso de la molécula de nitrógeno (N_2), cuyos parámetros vibro-rotacionales aparecen en la tabla 27.1; el cuanto de energía vibracional fundamental de esta molécula es de 0.292 eV. Para que la energía térmica media, kT , sea de este orden es necesaria una temperatura de:

$$k = 8.617 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$$

$$T = \frac{\hbar\omega_0}{k} = \frac{0.292}{8.617 \times 10^{-5}} = 3378 \text{ K}$$

A temperaturas inferiores, kT es menor que el primer salto de energía vibracional que puede efectuar la molécula; por ello, un aumento de temperatura no puede modificar la energía de vibración, con lo cual, a bajas temperaturas las vibraciones no contribuirán al calor específico y el principio de equipartición de la energía no será aplicable en su formulación clásica. El cuanto de rotación, sin embargo, es muy inferior: 2.48×10^{-4} eV, con lo que las rotaciones intervienen en el calor específico a todas aquellas temperaturas a las cuales el nitrógeno está en estado gaseoso. En definitiva, salvo a temperaturas de aproximadamente 3400 K, de los seis grados de libertad, el que hemos asignado a las vibraciones (contado dos veces) no contribuye y debe esperarse un calor específico de $5k/2$ por molécula.

Si hubiéramos considerado el caso del hidrógeno, que puede estar en forma de gas incluso a temperaturas muy bajas, la situación sería todavía más clara. En este caso el cuanto de energía rotacional es bastante mayor que en el nitrógeno debido al pequeño momento de inercia de la molécula de H_2 , con lo cual, a muy bajas temperaturas ni siquiera se han de considerar las rotaciones y, por ello, el calor específico debe ser de $3k/2$ por molécula. En efecto:

$$\text{— Rotaciones: } \frac{\hbar^2}{2I} = 8.0 \times 10^{-3} \text{ eV} \quad T \leq \frac{8.0 \times 10^{-3}}{k} = 92.8 \text{ K} \quad C_v = \frac{3k}{2}$$

— Vibraciones: $\hbar\omega_0 = 0.543 \text{ eV}$ $92.8 \text{ K} \leq T \leq \frac{0.543}{k} = 6301 \text{ K}$

$$\frac{3k}{2} < C_v < \frac{5k}{2}$$

$$T \geq 6301 \text{ K} \quad C_v = \frac{7k}{2}$$

Este comportamiento puede observarse en los datos experimentales contenidos en la figura 27.4.

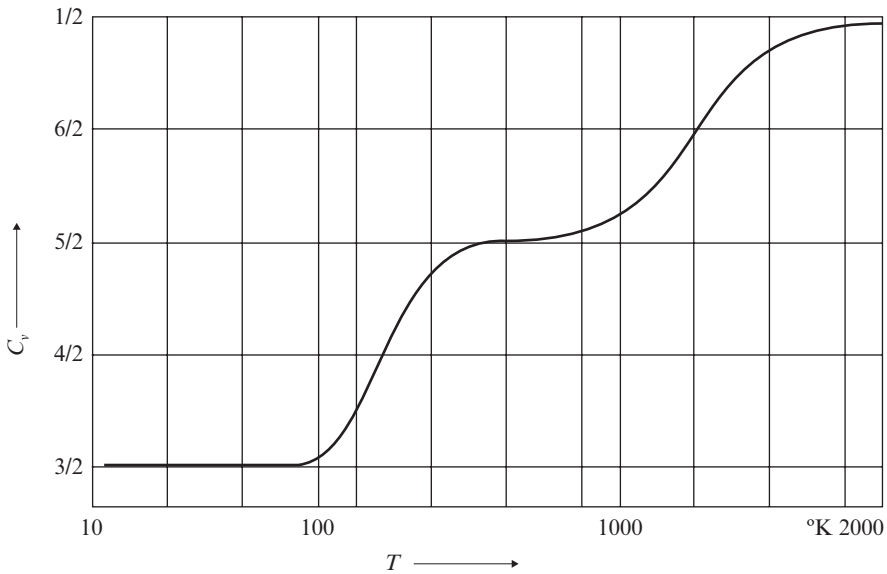


Figura 27.4. Comportamiento experimental del calor específico del hidrógeno.

27.4. LA ECUACIÓN NUCLEAR EN LAS MOLÉCULAS DIATÓMICAS

Mediante la aproximación de Born-Oppenheimer se pudo descomponer la ecuación de Schrödinger de una molécula diatómica [24.4.1] en dos, una ya estudiada, que daba cuenta del movimiento de los electrones [24.4.11], y otra, la ecuación nuclear [24.4.12]:

$$H_n\phi_n + E_n(r_n)\phi_n = E\phi_n \quad [27.4.1]$$

en la que la energía potencial en la que se mueven los núcleos $E_n(r_n)$ se obtiene al resolver la ecuación electrónica [24.4.11]. En el apartado 24.5 se ha resuelto la ecuación electrónica para el ion molecular H_2^+ por un procedimiento aproximado y se ha obtenido la función $E_e(R)$ correspondiente a este caso. Esta forma de abordar el problema se conoce como el cálculo *ab initio* de los niveles moleculares, el cual se suele llevar a cabo, en las moléculas más complicadas, haciendo uso de métodos aproximados y del cálculo numérico con ayuda de computadores, con frecuencia, de elevadas prestaciones. Si las moléculas son muy complicadas, se ha de tener en cuenta además las simetrías moleculares que permitan simplificar el problema hasta un grado que sea abordable. Ya hemos visto la importancia que los elementos de simetría tienen en el tratamiento general de la ecuación electrónica en las moléculas diatómicas para la solución de las ecuaciones. Ahora, con el fin de dar una panorámica general de este problema, vamos a considerar en este capítulo la resolución de la ecuación de movimiento de los núcleos [27.4.1] únicamente para las moléculas diatómicas, en cuyo caso la resolución es suficientemente simple y nos servirá para poner de manifiesto los aspectos más representativos de la física del problema.

Teniendo en cuenta la forma del hamiltoniano H_n [24.4.6], la ecuación nuclear [27.4.1] puede escribirse, en el caso de una molécula diatómica (véase figura 27.5):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_A} \nabla_A^2 - \frac{\hbar^2}{2M_B} \nabla_B^2 + E_e(R) \right] \phi_n = E \phi_n \quad [27.4.2]$$

En esta ecuación la energía potencial $E_e(R)$ puede haber sido obtenida por resolución de la ecuación electrónica, cuando ello sea posible, o por medio de algún modelo aproximado de potencial. E es la energía total de la molécula.

El problema que se nos plantea con la resolución de la ecuación [27.4.2] es análogo, en esencia, a otros de dos cuerpos que ya han sido tratados con anterioridad, y también en este caso se puede estudiar el problema con referencia al centro de gravedad del sistema mediante el cambio habitual (apartado 27.2):

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B \quad ; \quad \frac{M_A \mathbf{r}_A + M_B \mathbf{r}_B}{M_A + M_B} \quad [27.4.3]$$

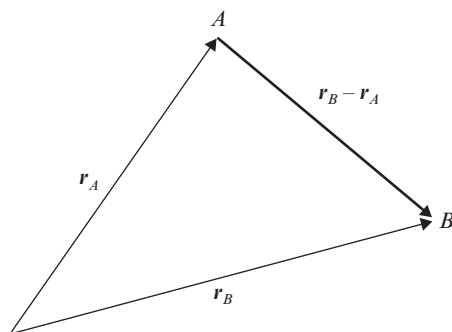


Figura 27.5. Vectores de posición de los dos núcleos de una molécula diatómica.

siendo \mathbf{R}_0 el vector de posición del centro de gravedad de la molécula y \mathbf{R} la posición relativa de los núcleos. Con este cambio, la ecuación [27.4.2] se separa en dos ecuaciones. La primera de ellas:

$$-\frac{\hbar^2}{2(M_A + M_B)} \nabla_{\mathbf{R}_0} \phi_G(\mathbf{R}_0) = E_t \phi_G(\mathbf{R}_0) \quad [27.4.4]$$

es la ecuación de Schrödinger correspondiente a una partícula libre que tuviese la masa del sistema en la posición del centro de gravedad y en ella E_t es la energía de traslación de la molécula. La segunda ecuación:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_{AB}} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + E_e(R) \right] \phi_{ei}(\mathbf{R}) = E_{ei} \phi_{ei}(\mathbf{R}) \quad [27.4.5]$$

es la de una partícula de masa μ_{AB} (masa reducida de los núcleos) que se mueve en el campo central $E_e(R)$.

La función de ondas ϕ_n se factoriza en la forma:

$$\phi_n = \phi_G \times \phi_{ei} \quad [27.4.6]$$

y

$$E_{ei} = E - E_t \quad [27.4.7]$$

es la energía interna de la molécula, diferencia entre la energía total y la energía de traslación.

La ecuación [27.4.5] es, como ya hemos indicado, la de una partícula en un potencial central, cuyas soluciones ya conocemos:

$$\phi_{ei} = \frac{u_{evr}(R)}{R} Y_r^{m_r}(\theta, \varphi) \quad [27.4.8]$$

$$r = 0, 1, 2, \dots$$

$$m_r = r, r-1, r-2, \dots, -r$$

donde $Y_r^{m_r}(\theta, \varphi)$ son los armónicos esféricos que obedecen a la ecuación de autofunciones del momento angular L_r^2 de rotación de la molécula alrededor de un eje que pasa por el centro de gravedad. Las funciones $u_{evr}(R)$ son las soluciones de la ecuación radial reducida:

$$\frac{d^2 u_{evr}}{dR^2} + \frac{2\mu_{AB}}{\hbar} \left[E_{evr} - E_e(R) - \frac{\hbar^2 r(r+1)}{2\mu_{AB} R^2} \right] u_{evr} = 0 \quad [27.4.9]$$

En esta ecuación la energía $E_e(r)$, autovalor de la ecuación electrónica que ya hemos estudiado, equivale formalmente a la energía potencial en la que se mueven los núcleos.

En los estados electrónicos ligados (tales como los que estudiamos en el caso del ion molecular H_2^+ mediante el método variacional) la energía $E_e(R)$ del estado electrónico posee un mínimo a la distancia R_{e0} a la que se encuentran los núcleos de la molécula en equilibrio en ese estado (véase figura 27.3).

En la práctica, para obtener las primeras soluciones de la ecuación radial [27.4.9] desarrollaremos la energía electrónica $E_e(R)$ en serie alrededor del punto de equilibrio R_{e0} :

$$E_e(R) = E_e(R_{e0}) + \left(\frac{\partial E_e}{\partial R}\right)_{R=R_{e0}} (R - R_{e0}) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E_e}{\partial R^2}\right)_{R=R_{e0}} (R - R_{e0})^2 + \dots \quad [27.4.10]$$

Al tener un mínimo la función $E_e(R)$ en $R = R_{e0}$,

$$\left(\frac{\partial E_e}{\partial R}\right)_{R=R_{e0}} = 0 \quad [27.4.11]$$

con lo que, llamando:

$$k_e = \left(\frac{\partial^2 E_e}{\partial R^2}\right)_{R=R_{e0}} \quad [27.4.12]$$

y quedándonos con la aproximación de segundo orden en [27.4.10], podemos escribir la energía electrónica en la forma:

$$E_e(R) \approx \frac{1}{2} k_e (R - R_{e0})^2 + E_e(R_{e0}) \quad [27.4.13]$$

siempre que los núcleos no se separen demasiado de la posición de equilibrio.

Supongamos, en primer lugar, que la molécula no está sometida a ninguna rotación, es decir: $r = 0$ en la ecuación radial [27.4.9]:

$$\frac{d^2 u_{ev0}}{dR^2} + 2 \frac{\mu_{AB}}{\hbar^2} \left[E_{ev0} - E_e(R_{e0}) - \frac{1}{2} k_e (R - R_{e0})^2 \right] u_{ev0} = 0 \quad [27.4.14]$$

ecuación que puede escribirse en la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_{AB}} \frac{d^2 u_{ev0}}{dR^2} + \frac{1}{2} k_e (R - R_{e0})^2 u_{ev0} = [E_{ev0} - E_e(R_{e0})] u_{ev0} \quad [27.4.15]$$

que es la ecuación de Schrödinger de un oscilador armónico lineal, conocido como modo normal de vibración de la molécula, que equivale al movimiento relativo en la vibración de los núcleos. Como sabemos, los autovalores de esta ecuación de oscilador armónico son:

$$E_{ev0} - E_e(R_{e0}) = \left(v + \frac{1}{2}\right) h\nu_e \quad v = 1, 2, \dots \quad [27.4.16]$$

con

$$v_e = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_e}{\mu_{AB}}}$$

De esta manera la energía de vibración aparece como la diferencia entre la energía interna E_{ev0} y la energía electrónica $E_e(R_{e0})$ mínima del autovalor $E_e(R)$ (véase figura 27.6).

Si $r \neq 0$, la molécula poseerá alguna energía cinética de rotación [27.2.6], aunque si r no es demasiado grande, esta energía centrífuga de rotación será significativamente menor que la de vibración, es decir:

$$\left\langle \frac{\hbar^2 r(r+1)}{2\mu_{AB} R^2} \right\rangle \ll \left\langle \frac{1}{2} k_e (R - R_{e0})^2 \right\rangle \quad [27.4.17]$$

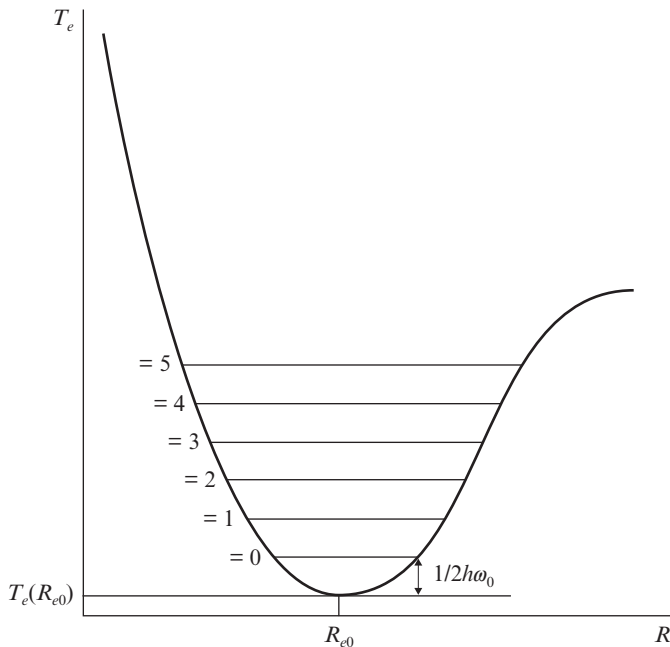


Figura 27.6. Estructura vibracional de un nivel electrónico.

En estas condiciones las funciones u_{evr} seguirán siendo aproximadamente simétricas respecto a R_{e0} y no se comete un gran error si en la ecuación radial [27.4.9] con la aproximación [27.4.13] se sustituye el potencial centrífugo por su valor en R_{e0} :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_{AB}} \frac{d^2 u_{evr}}{dR^2} + \frac{1}{2} k_e (R - R_{e0})^2 u_{evr} = \left[E_{evr} - E_e(R_{e0}) - \frac{\hbar^2 r(r+1)}{2\mu_{AB} R_{e0}^2} \right] u_{evr} \quad [27.4.18]$$

ecuación que de nuevo es análoga a la de un oscilador armónico lineal, cuyos autovalores de la energía son:

$$E_{evr} - E_e(R_{e0}) - \frac{\hbar^2(r+1)r}{2\mu_{AB}R_{e0}^2} = \left(v + \frac{1}{2}\right)h\nu_e \quad [27.4.19]$$

es decir:

$$E_{evr} = E_e(R_{e0}) + \left(v + \frac{1}{2}\right)h\nu_e + \frac{\hbar^2r(r+1)}{2\mu_{AB}R_{e0}^2} \quad [27.4.20]$$

En la expresión [27.4.20] la energía interna total de la molécula aparece separada en tres contribuciones distintas. La primera de ellas es la energía electrónica $E_e(R_{e0})$, la segunda, energía de vibración $(v + 1/2)h\nu_e$ y, finalmente, la energía centrífuga de rotación, la cual, en primera aproximación, es:

$$E_r = \frac{\hbar^2r(r+1)}{2\mu_{AB}R_{e0}^2} \quad [27.4.21]$$

y las funciones radiales $u_{evr}(R)$ son autofunciones de oscilador armónico. Todo ello en consonancia con las conclusiones cualitativas que obtuvimos en el apartado 24.2 a partir de la observación de los espectros moleculares, con lo que el cálculo cuántico de esta manera confirma esas predicciones.

Por otro lado, los resultados obtenidos coinciden con los que con un formalismo mecánico clásico obtuvimos en el apartado 27.2: [27.4.21] es análogo a [27.2.6].

Así pues, según los resultados obtenidos, los niveles rotacionales corresponden a los valores de E_r cuando:

$$r = 0, 1, 2, \dots$$

El espaciado energético entre niveles rotacionales:

$$E_r - E_{r-1} = \frac{\hbar^2}{2I} [r(r+1) - (r-1)r] = \frac{\hbar^2}{I} r$$

aumenta al crecer el número cuántico rotacional r (véase figura 27.7). La energía de los niveles rotacionales, como ya apuntábamos en el apartado 27.2, es del orden de $\hbar^2/2I$ (tabla 27.1).

En resumen, el estado de una molécula diatómica se caracteriza por los números cuánticos de su estado electrónico que dan la energía $E_e(R_{e0})$, su número cuántico de vibración v y su número cuántico de rotación r (véase figura 27.8).

Es interesante apuntar que, en el caso de las moléculas poliatómicas, la separación de la energía en partes según cuál sea su origen: electrónico, vibracional o rotacional es igualmente factible. Ahora bien, el número de modos normales de vibración es tanto más alto

cuanto mayor es el número de átomos de la molécula; en general, si la molécula posee N núcleos, éstos poseen $3N$ grados de libertad, pero se pueden eliminar tres grados de traslación del centro de masas y tres de rotación alrededor de tres ejes, con lo que quedan $3N - 6$ grados independientes, que es el número máximo de modos normales de vibración no degenerados, salvo en el caso de las moléculas lineales, en las que el modo de rotación correspondiente al eje de la molécula no existe y se transforma en un modo de vibración, con frecuencia degenerado con otro.

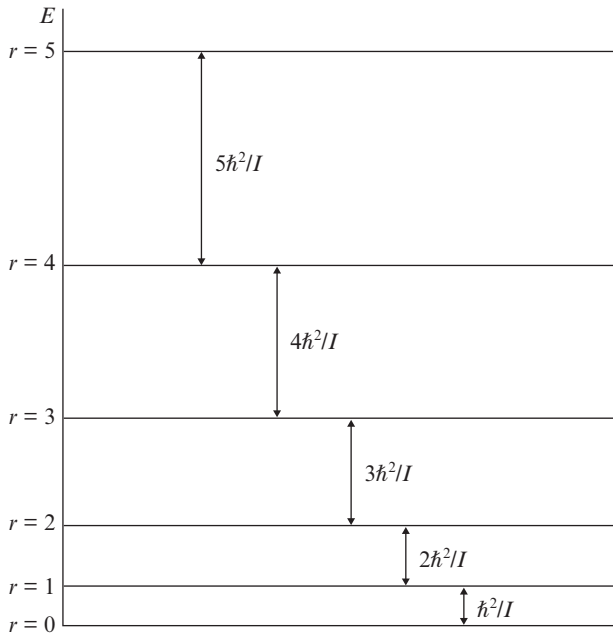


Figura 27.7. Separación entre niveles rotacionales.

27.5. LIMITACIONES AL CONCEPTO DE MOLÉCULA

En los últimos capítulos (física molecular) hemos desarrollado con una cierta amplitud el concepto de molécula, entendida ésta como el sistema formado por dos átomos o grupos de átomos en interacción de forma que la energía potencial del sistema tenga un mínimo para una cierta distancia internuclear, lo cual significa en definitiva que la interacción entre los elementos que componen el sistema (molécula) entre sí supera a la que dichos elementos tienen con su entorno. De este nuevo ente que hemos designado molécula hemos sido capaces de estudiar diferentes propiedades, tales como la redistribución de las cargas en su interior, la naturaleza de las fuerzas que dan lugar al enlace entre sus elementos, etc., y lo hemos coronado con la obtención de la expresión [27.4.20], que explicita la energía interna de la molécula como suma de tres términos que nos van a per-

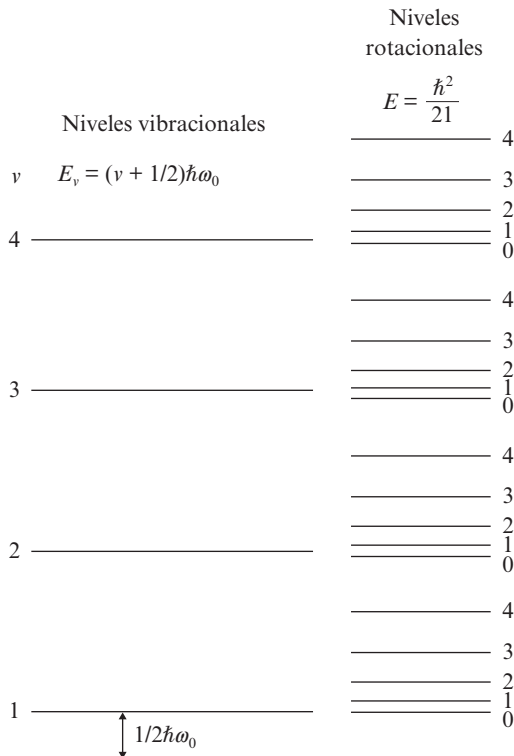


Figura 27.8. Niveles vibro-rotacionales.

mitir explicar en el próximo capítulo los espectros moleculares como resultado de la interacción entre radiación de frecuencia adecuada y sistemas moleculares. Aunque a lo largo del estudio que hemos realizado de la estructura molecular ya lo hemos indicado en diversas ocasiones, en este punto nos parece conveniente insistir, por última vez, en los tres diferentes tipos de moléculas que pueden distinguirse según la forma de su curva de potencial (véase figura 27.9).

Aquellas moléculas que poseen una curva de potencial de tipo *a* son las típicas, ligadas por fuerzas de valencia en el sentido estricto. Se caracterizan por un mínimo pronunciado en la curva de potencial a una distancia internuclear relativamente pequeña (del orden del angstrom) y una energía de disociación relativamente alta (1 a 10 eV); a este tipo de moléculas es al que hemos dedicado mayor atención en este libro.

Las moléculas que presentan una curva de potencial del tipo *b* en la figura 27.9 son las moléculas de van der Waals a las que nos hemos referido brevemente en el apartado 26.5. Se caracterizan porque la curva de potencial tiene un mínimo poco acusado a una distancia internuclear grande (3 – 5 Å) y una energía de disociación pequeña (0,01 a 0,1 eV en el estado fundamental); no son moléculas en el estricto sentido de la palabra, aunque, como ya hemos indicado, sus átomos componentes se atraen en cierta manera debido a

una redistribución de sus cargas por efecto de los campos inducidos por la presencia de las cargas vecinas. Las fuerzas de segundo orden que mantienen a estas moléculas unidas son de naturaleza similar a las responsables del diferente comportamiento de los gases reales frente a los ideales, de ahí su nombre de moléculas de van der Waals.

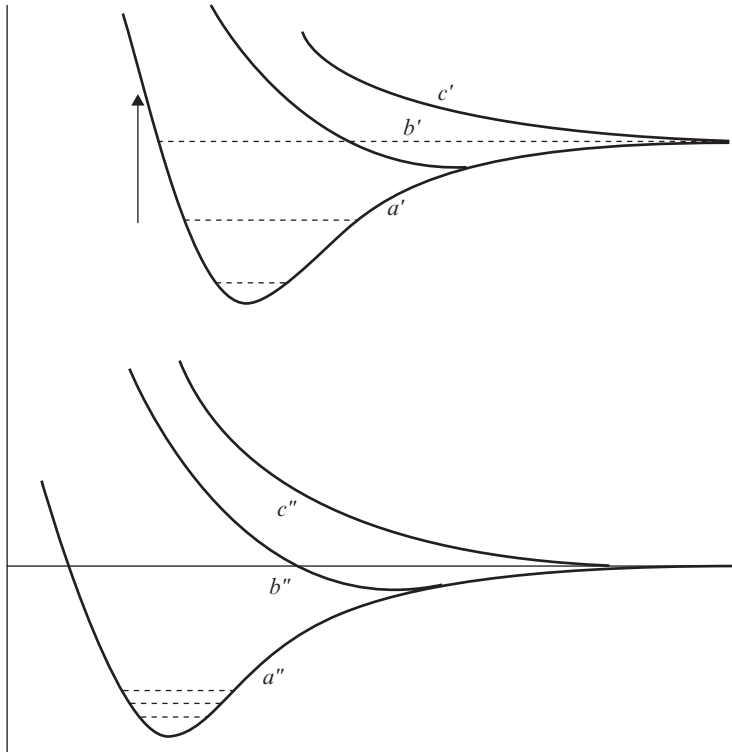


Figura 27.9. Curvas de potencial correspondientes a diferentes tipos de moléculas.

Por último, las moléculas que poseen curvas de potencial, como las del tipo *c* de la figura 27.9, no pueden tener valores negativos de energía y, por ello, solamente aparecen fuerzas repulsivas netas entre los átomos que forman el sistema; se comportan como lo haría una verdadera molécula en un estado de energía positiva. Podemos visualizar estas pseudomoléculas como dos átomos en el instante en que colisionan (si entre ellos sólo hay fuerzas repulsivas), se conocen como «pares de colisión» y son un caso límite de molécula que carece de mínimo de potencial; sin embargo, presentan espectros de absorción y emisión como las demás moléculas. Algunas moléculas ligadas en el estado fundamental presentan curvas de potencial similares a las de los pares de colisión en ciertos estados excitados. Un ejemplo típico es la molécula Hg_2 (véase figura 27.10), que de alguna manera comparte los tres conceptos de molécula que hemos mencionado si consideramos las curvas de potencial de sus diferentes estados posibles.

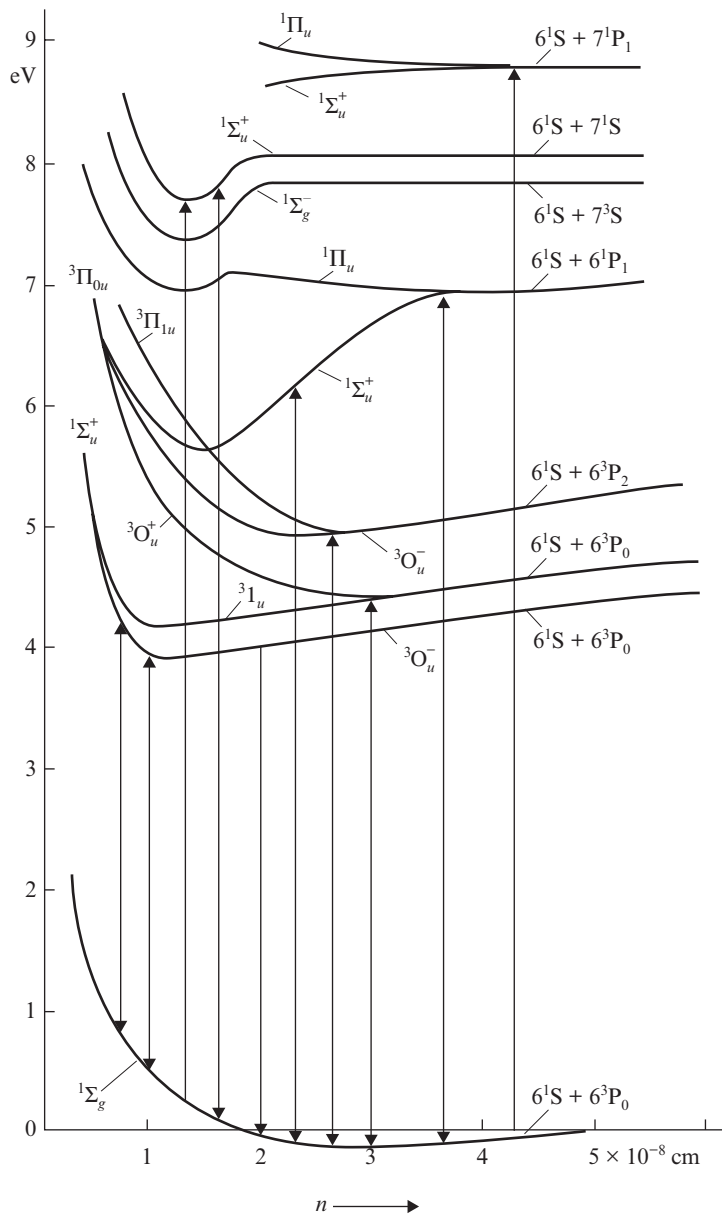


Figura 27.10. Diagrama de niveles de energía del Hg_2 .

EJERCICIOS

27.1. Considérese un conjunto de moléculas diatómicas a las temperaturas de 300 K y 1000 K. Determínese la razón entre el número de moléculas que se encuentran en dos estados consecutivos separados por un intervalo ΔE en los casos: a) $\Delta E = 3.2$ eV (niveles electrónicos); b) $\Delta E = 0.05$ eV (niveles vibracionales), y c) $\Delta E = 10^{-4}$ eV (niveles rotacionales). No considerar degeneración.

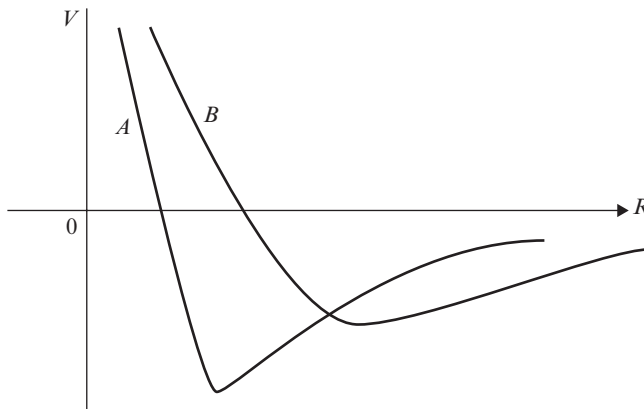
27.2. La energía vibracional de punto cero de la molécula de H_2 es 0.272 eV y su momento de inercia respecto de un eje perpendicular a la línea que une los núcleos, y que pasa por el centro de masas, satisface:

$$\frac{\hbar^2}{2I} = 8 \times 10^{-3} \text{ eV}$$

Calcular la energía vibracional de punto cero para la molécula D_2 (D deuterio). *Datos:* $m_H = 938.93 \text{ M eV}/c^2$.

27.3. Estimar el orden relativo de magnitud de las separaciones energéticas entre niveles electrónicos, vibracionales y rotacionales de una molécula diatómica.

27.4. Las energías potenciales de dos moléculas diatómicas de la misma masa reducida vienen dadas por la figura. Determínese cuál de las moléculas tiene mayor: a) distancia internuclear; b) momento de inercia; c) energía de punto cero, y d) energía de ligadura.



27.5. Una molécula diatómica homonuclear está formada por núcleos de masa 14 separados una distancia de 2 \AA . a) ¿Cuáles son las energías de los tres primeros niveles rotacionales? b) Tenemos un gas en equilibrio térmico formado por estas moléculas, ¿cuál es la relación entre el número de moléculas que ocupan el nivel rotacional $r = 2$ del estado fundamental y las que ocupan el $r = 0$?

28

Espectroscopía molecular

José Luis Escudero
José Manuel Guerra

28.1. INTRODUCCIÓN

A lo largo de los últimos capítulos, en los que hemos desarrollado la física molecular, hemos invocado con frecuencia a la espectroscopía molecular como la razón última que justificase diferentes hipótesis acerca de la estructura de las moléculas. Bien es cierto que el análisis, tanto cualitativo como cuantitativo, de los espectros moleculares ha permitido orientar a los físicos teóricos en sus hipótesis dirigidas a la elaboración de teorías acerca de la estructura de la materia y, por otro lado, servir de comprobación experimental a los resultados de muchas de estas teorías. Sin embargo, no debemos olvidar el aspecto práctico que tienen los resultados de la interpretación de los espectros moleculares en muy diversas áreas, no sólo de la ciencia, medicina, etc., sino también de la vida cotidiana. En este capítulo trataremos de proporcionar al lector una visión de la espectroscopía molecular que le permita conjugar tanto los aspectos teóricos que complementen su conocimiento de la molécula como los prácticos a los que nos acabamos de referir.

La espectroscopía molecular trata principalmente de la absorción y emisión de radiación en la región espectral que comienza alrededor de los $10^{-7} \text{ m} = 10^3 \text{ \AA}$ de longitud de onda; la irradiación con luz de menor longitud de onda (mayor energía) conduciría a la disociación molecular o a la dispersión (*scattering*) de rayos X. Más difícil es situar un límite superior a las longitudes de onda de la radiación que influye sobre las moléculas, ya que incluso las ondas de radio son absorbidas por algunas especies moleculares.

Desde el punto de vista histórico, se sabe que existen compuestos que emiten radiación visible cuando se los expone a la luz del sol, desde hace varios siglos. Desde luego, ya en 1565, un médico, Nicolás Mornades, informó de que cuando se echaba en agua un trozo de una madera, conocida popularmente como *lignum nephriticum*, emitía luz en presencia de luz solar; este fenómeno, que hoy conocemos como fluorescencia, es diferente de la fosforescencia, de la que se tiene referencia al menos desde 1603, cuando un zapatero se dio cuenta de que una piedra recogida en las proximidades de Bolonia continuaba emitiendo luz en la oscuridad después de ser retirada de una zona soleada en la que había permanecido un cierto tiempo. El mineral, que probablemente contenía sulfato de bario, se conoce en la literatura como piedra de Bolonia. Salvo estos hechos curiosos y algunas explicaciones de los mismos cercanas a la brujería, hasta mediados del siglo XIX no se comienza a tener un conocimiento científico de los procesos de absorción y emisión de luz por la materia. Concretamente fue Herschel, en 1845, quien, estudiando la luz emitida por

una solución de sulfato de quinina, apuntó su diferencia con la luz dispersada. Stokes, en 1852, mediante el análisis de la composición espectral de las mismas, se dio cuenta de que la luz emitida estaba compuesta por longitudes de onda más largas que las de la luz absorbida; este fenómeno se conoce hoy en día como salto de Stokes. A partir de entonces los avances han sido tan abundantes y continuados que se sale totalmente del ámbito de esta introducción referir incluso los más importantes o llamativos.

28.2. ESPECTROS MOLECULARES

De la misma manera que en los átomos, los espectros moleculares, tanto de absorción como de emisión, se explican en función de transiciones entre los posibles estados de energía de las moléculas. De acuerdo con la expresión [27.4.20], la energía de un estado molecular, teniendo en cuenta las diferentes contribuciones, electrónica, vibracional y rotacional, es:

$$E_{evr} = E_e(R_{e0}) + \left(v + \frac{1}{2}\right)h\nu_e + \frac{\hbar^2 r(r+1)}{2\mu_{AB}R_{e0}^2} \quad [28.2.1]$$

Las transiciones entre los niveles electrónicos se encuentran en el rango de frecuencias de la radiación visible o ultravioleta y dan lugar al espectro electrónico; las que se producen entre niveles vibracionales de un mismo estado electrónico producen radiaciones en el infrarrojo cercano, y el espectro de rotación (transiciones entre niveles rotacionales de un mismo vibracional) corresponde a la zona del infrarrojo lejano. En la figura 28.1 se representa un esquema de niveles típico de una molécula.

Los espectros rotacionales son debidos a que, por interacción con la radiación de frecuencia adecuada, se produce un giro del momento dipolar eléctrico de la molécula y, por tanto, varía su energía rotacional (tercer término de [28.2.1]); en términos cuánticos: cambio de nivel rotacional. Por tanto, solamente presentarán espectro rotacional aquellas moléculas que tengan un momento dipolar no nulo; en el caso de moléculas diatómicas, las heteronucleares. En equilibrio térmico a temperatura ambiente, la mayor parte de las moléculas se encuentran en los niveles rotacionales de menor energía (apartado 27.2).

Las reglas de selección entre niveles moleculares surgen, al igual que en los atómicos, del análisis de los elementos de matriz del momento dipolar eléctrico, teniendo en cuenta que en este caso, además del momento dipolar eléctrico del electrón, también pueden oscilar los momentos dipolares eléctricos nucleares.

Las reglas de selección para las transiciones entre estados rotacionales se han de estudiar en cada caso, pero, en general, se respetan las siguientes:

$$\Delta r = 0, \pm 1 \quad [28.2.2]$$

salvo la

$$r' = 0 \rightarrow r = 0$$

que está prohibida.

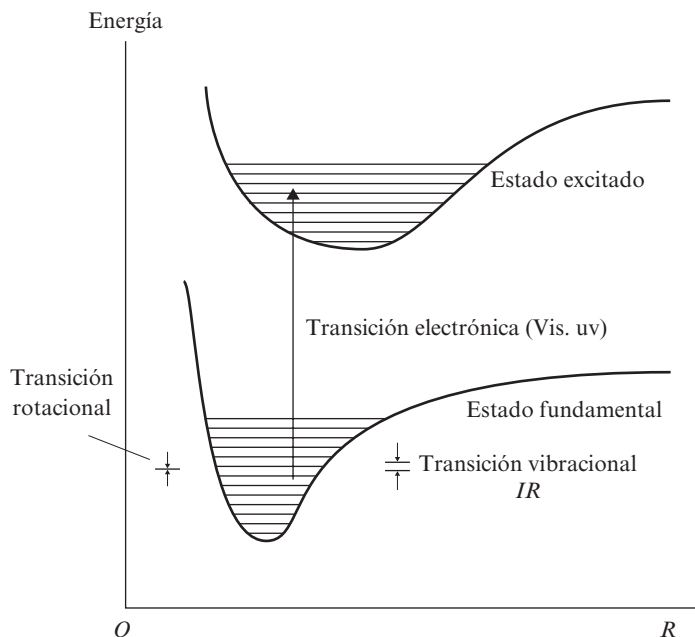


Figura 28.1. Esquema de niveles típico de una molécula diatómica mostrando los pozos de potencial correspondientes a los estados fundamental y primero excitado y las posibles clases de transiciones.

Las transiciones dipolares eléctricas entre niveles vibracionales de las moléculas diatómicas heteronucleares son debidas a que su momento dipolar eléctrico depende de la distancia entre los núcleos, y verifican, si el modo vibracional es armónico, la regla de selección:

$$\Delta v = \pm 1 \quad [28.2.3]$$

Habitualmente, salvo para las transiciones entre niveles vibracionales del mismo estado electrónico con energías próximas al mínimo de la curva, el modo vibracional no será armónico (véase figura 28.2), y suelen estar permitidas también las que verifican:

$$\Delta v = \pm 2, \pm 3, \dots$$

Las moléculas diatómicas homonucleares no presentan espectro vibracional debido a que su momento dipolar eléctrico es nulo a cualquier distancia internuclear.

Con frecuencia, el espectro vibracional de una molécula no es puro, sino que en cada transición entre niveles vibracionales suele haber también variación en el número cuántico rotacional (espectros de rotación-vibración).

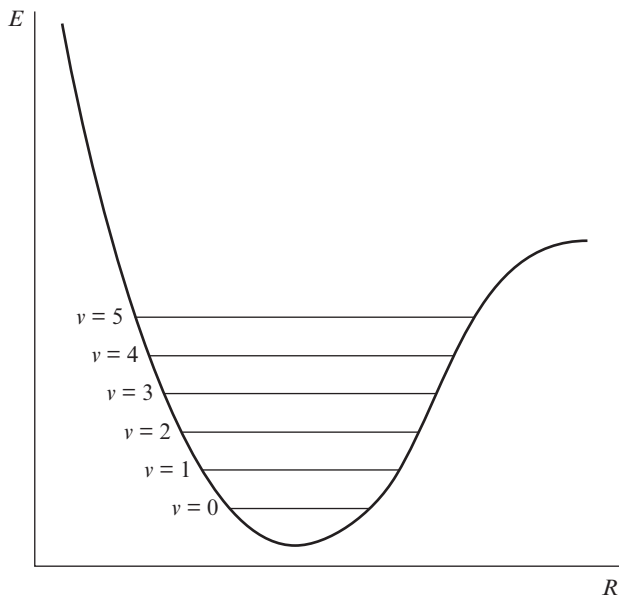


Figura 28.2. Forma típica de un pozo de potencial molecular. Solamente es aproximadamente armónico para energías próximas al fondo del mismo.

En la tabla 27.1 se pudo observar que, en general:

$$\hbar\omega_0 \gg \hbar^2/2I$$

con lo que la distancia entre niveles rotacionales es bastante menor que entre vibracionales (véase figura 28.1), de manera que por cada nivel vibracional aparecen varios rotacionales.

En el espectro de rotación-vibración aparecen, por cada transición vibracional, unas líneas con $\Delta r = +1$ (líneas *R*) y otras con $\Delta r = -1$ (líneas *P*) (véase figura 28.3).

Como la energía de vibración y la de rotación dependen de la masa de los núcleos, los espectros correspondientes a moléculas formadas por isótopos de los mismos átomos con núcleos de diferente masa serán distintos. Así, se pueden distinguir por su espectro los diferentes isótopos que forman las moléculas de un elemento (efecto isotópico). En la figura 28.3, en la que se muestra el espectro de absorción de la molécula ClH, se puede observar que cada pico de absorción es doble debido a que el cloro posee dos isótopos (^{35}Cl y ^{37}Cl) y cada uno absorbe a frecuencias ligeramente diferentes.

Al estudiar el enlace molecular vimos cómo al formarse una molécula la energía potencial tenía la forma de un pozo, con un mínimo a una cierta distancia internuclear de equilibrio. Si los átomos constituyentes de la molécula estaban en el estado de menor energía, se obtenía el estado fundamental de la molécula. En caso contrario, aparecen los diferentes estados excitados. En la figura 27.1 se representó una situación energética típica

del estado fundamental y primero excitado de una molécula diatómica en el caso de que ambos sean ligantes. Los mínimos de las dos curvas de energía en general no coinciden, ya que al ser distintas las configuraciones electrónicas en cada caso, la distancia internuclear de equilibrio tampoco será la misma.

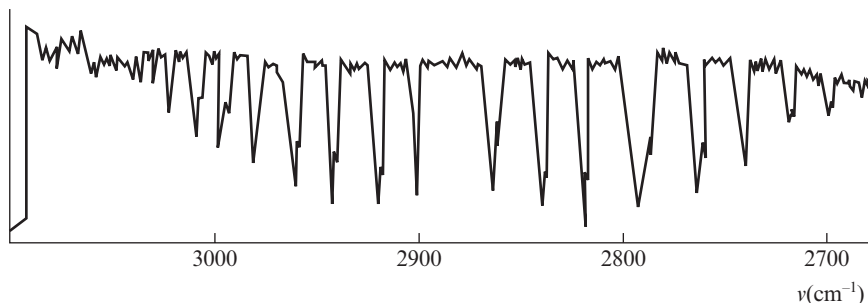


Figura 28.3. Típico espectro de rotación-vibración en el que se aprecian bien la zona *P* y la zona *R*. Obsérvese que cada pico de absorción está desdoblado debido al efecto isotópico.

La diferencia de energías entre estados electrónicos suele corresponder a la zona visible o ultravioleta del espectro. Dentro de cada nivel de energía electrónico aparecen los estados vibracionales que hemos estudiado. Las transiciones entre los diferentes estados electrónicos de la molécula dan lugar al espectro electrónico de la misma, pero cada una de estas transiciones en general conllevará también cambios en los números vibracionales y rotacionales, con lo que realmente cada transición entre dos niveles electrónicos es en realidad una banda compuesta por sub-bandas, cada una formada por todas las transiciones rotacionales correspondientes a cada transición entre dos niveles vibracionales. Habitualmente, en sólidos y líquidos todas estas bandas están ensanchadas por diferentes procesos que dan lugar al solapamiento de las mismas, con lo que el aspecto de un espectro molecular es el de la figura 28.4.

Ya hemos indicado anteriormente que en equilibrio térmico a temperatura ambiente casi todas las moléculas están en el nivel vibracional más bajo ($\nu = 0$) del estado electrónico fundamental, en el cual la función de onda del oscilador es una gaussiana centrada en R_{e0} . Si en una molécula diatómica consideramos una transición de absorción desde este nivel hacia otro nivel vibracional del primer estado electrónico excitado, el elemento de matriz para una transición dipolar eléctrica será:

$$\langle \phi'_T(\mathbf{r}, \mathbf{R}) | \mathbf{D} | \phi_T(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \rangle \quad [28.2.4]$$

donde ϕ'_T y ϕ_T son las funciones de ondas de los niveles involucrados en la transición, producto de su parte electrónica por la nuclear:

$$\phi'_T(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \phi'_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{e'0}) \phi'_n(R) \quad [28.2.5]$$

$$\phi_T(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \phi_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{e0}) \phi_n(R)$$

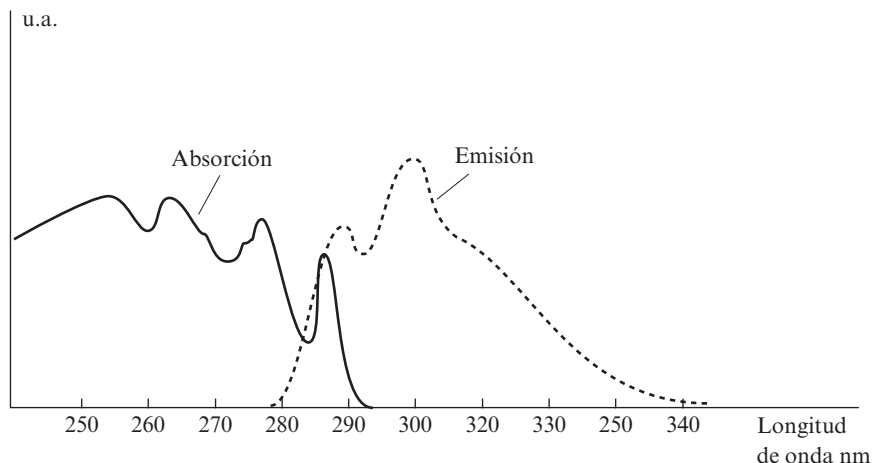


Figura 28.4. Espectro de absorción y de emisión típico mostrando el desplazamiento de Stokes.

y \mathbf{D} es el operador momento dipolar total, suma del electrónico y el nuclear:

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_e + \mathbf{D}_n = -e\mathbf{r} + e\mathbf{R} \quad [28.2.6]$$

Sustituyendo [28.2.5] y [28.2.6] en el elemento de matriz [28.2.4], éste toma la forma:

$$\langle \phi'_{T'} | \mathbf{D} | \phi_T \rangle = \langle \phi_{e'} | \mathbf{D}_e | \phi_e \rangle \langle \phi'_{n'} | \phi_n \rangle + \langle \phi_{e'} | \phi_e \rangle \langle \phi'_{n'} | \mathbf{D}_n | \phi_n \rangle \quad [28.2.7]$$

Como las soluciones de la ecuación electrónica son ortonormales:

$$\langle \phi'_{e'} | \phi_e \rangle = \delta_{e'e}$$

en el caso de estar considerado ($e' \neq e$), se tiene:

$$\langle \phi'_{T'} | \mathbf{D} | \phi_T \rangle = \langle \phi_{e'} | \mathbf{D}_e | \phi_e \rangle \langle \phi'_{n'} | \phi_n \rangle \quad [28.2.8]$$

En equilibrio térmico, $|\phi_e\rangle$ es el estado electrónico fundamental, y si caracterizamos las funciones nucleares por su número cuántico vibracional, $|\phi_n\rangle$ es el estado vibracional $|\phi_0\rangle$ (véase figura 28.5):

$$\langle \phi'_{T'} | \mathbf{D} | \phi_T \rangle = \langle \phi_{e'} | \mathbf{D}_e | \phi_e \rangle \langle \phi'_{v'} | \phi_0 \rangle \quad [28.2.9]$$

por tanto, el elemento de matriz es proporcional al producto escalar de las funciones de oscilador armónico en el estado fundamental (ϕ_0) y en uno excitado ($\phi'_{v'}$). La función de ondas (ϕ_0) es una gaussiana centrada en R_{e0} , mientras que las correspondientes a esta-

dos excitados tienen su máximo más importante en el extremo de la amplitud de oscilación. Así, el producto escalar de ambas funciones sólo tiene un valor importante cuando el máximo de la gaussiana coincide con el máximo lateral de la función excitada. Como consecuencia de ello y de la no coincidencia de los mínimos de los pozos de potencial (véase figura 27.1), la transición se efectúa en general a un nivel vibracional alto del estado electrónico excitado. Este efecto se conoce como principio de Franck-Condon, según el cual la transición se efectúa manteniendo la distancia internuclear constante.

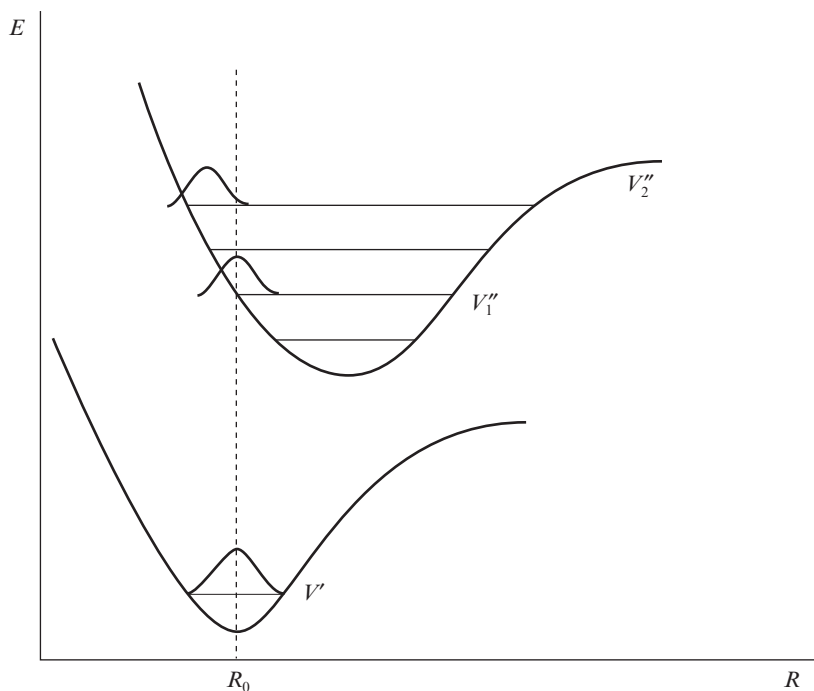


Figura 28.5. Principio de Franck-Condon para una transición de absorción desde el estado fundamental.

Una vez efectuada la transición de absorción, el nivel vibracional del estado excitado suele relajarse por transiciones no radiativas hasta el nivel vibracional más bajo ($v' = 0$); desde este nivel se produce la emisión radiativa hacia otro vibracional del estado electrónico fundamental, estando también esta transición controlada por el principio de Franck-Condon (véase figura 28.5). En definitiva, la energía de absorción $h\nu_A$ es mayor que la de emisión $h\nu_E$ (desplazamiento de Stokes) (véase figura 28.4). La diferencia de energía se convierte en energía cinética de traslación si la relajación se efectúa por colisiones.

28.3. FENÓMENOS DE DISPERSIÓN. EFECTO RAMAN

Hasta ahora nos hemos referido solamente a una parte de los fenómenos que se producen en la interacción de la radiación con la materia, la emisión y absorción de radiación por átomos y moléculas en frecuencias coincidentes con las propias del sistema material. En este apartado vamos a dedicar nuestra atención a otro fenómeno que se presenta cuando la frecuencia de la luz que interacciona con el sistema no coincide con ninguna de sus frecuencias propias; son los fenómenos de dispersión o esparcimiento (*scattering*).

En teoría clásica, los osciladores cargados que constituyen la materia realizan oscilaciones forzadas no resonantes cuando se les somete a fuerzas periódicas si sus frecuencias son distintas de la propia del oscilador, como es el caso que ahora nos ocupa. Estas oscilaciones son pequeñas comparadas con las que realizarían bajo la acción de fuerzas con frecuencias muy próximas a la de resonancia; sin embargo, la oscilación se produce y hay procesos moleculares interesantes que dependen de ella. Cuando el campo sinusoidal de una onda electromagnética monocromática actúa sobre una molécula en una frecuencia diferente de todas las posibles transiciones permitidas en dicha molécula, las cargas que la constituyen efectúan oscilaciones forzadas en la frecuencia del campo de la onda electromagnética.

La amplitud de las oscilaciones forzadas es proporcional al campo de la onda; por tanto, también el momento dipolar de las cargas en estas oscilaciones,

$$\mathbf{D} = \alpha \times \mathbf{E} \quad [28.3.1]$$

donde α es un parámetro propio de la molécula que se conoce como polarizabilidad, que, en general, depende de las distancias internucleares.

Para una molécula diatómica, desarrollando $\alpha(R)$ en serie de potencias de la distancia internuclear alrededor de su valor en la posición de equilibrio:

$$\alpha = \alpha(R) = \alpha(R_{e0}) + \left(\frac{\partial\alpha}{\partial R}\right)_{R=R_{e0}} (R - R_{e0}) + \dots \quad [28.3.2]$$

Como los núcleos estarán vibrando:

$$R - R_{e0} = (\Delta R)_0 \cos(2\pi\nu_e t + \varphi)$$

y llamando:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos 2\pi\nu t$$

al campo de la onda electromagnética, el momento dipolar forzado de la molécula será:

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &\simeq \mathbf{E}_0 \alpha(R_{e0}) \cos 2\pi\nu t + \mathbf{E}_0 \left(\frac{\partial\alpha}{\partial R}\right)_{R=R_{e0}} (\Delta R)_0 [\cos(2\pi\nu_e t + \varphi) \cos 2\pi\nu t] = \\ &= \mathbf{E}_0 \alpha(R_{e0}) \cos 2\pi\nu t + \frac{1}{2} \mathbf{E}_0 \left(\frac{\partial\alpha}{\partial R}\right)_{R=R_{e0}} (\Delta R)_0 \{\cos[2\pi(\nu_e + \nu)t + \varphi] + \\ &+ \cos[2\pi(\nu - \nu_e)t - \varphi]\} \end{aligned} \quad [28.3.3]$$

de manera que el momento dipolar oscilante de la molécula aparece en [28.3.3] explícitamente como suma de tres contribuciones. La primera,

$$D_1 = E_0 \alpha(R_{e0}) \cos 2\pi\nu t \quad [28.3.4]$$

oscila con la frecuencia del campo excitador y, de acuerdo con lo visto en el capítulo 20, producirá la emisión de radiación de esa misma frecuencia. Esta radiación se conoce como dispersión de Rayleigh. La segunda contribución al momento dipolar [28.3.3] es:

$$D_2 = \frac{1}{2} E_0 \left(\frac{\partial \alpha}{\partial R} \right)_{R=R_{e0}} (\Delta R)_0 \cos [2\pi(\nu_e + \nu)t + \varphi] \quad [28.3.5]$$

que oscila a la frecuencia suma de la de la onda y la de vibración de los núcleos. Por último, el tercer sumando:

$$D_3 = \frac{1}{2} E_0 \left(\frac{\partial \alpha}{\partial R} \right)_{R=R_{e0}} (\Delta R)_0 \cos [2\pi(\nu_e - \nu)t - \varphi] \quad [28.3.6]$$

oscila con la diferencia entre ambas frecuencias. Las dos contribuciones radiadas por [28.3.5] y [28.3.6] constituyen la que se conoce como dispersión Raman. La correspondiente a [28.3.6] se llama línea Stokes, y la [28.3.5] línea anti-Stokes.

El efecto Raman que acabamos de describir presenta interés en espectroscopía molecular porque del análisis de los espectros Raman se puede obtener información acerca de las frecuencias de vibración de las moléculas. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que para que un modo de vibración molecular dé lugar a espectro Raman es preciso que, de acuerdo con [28.3.3],

$$\left(\frac{\partial \alpha}{\partial R} \right)_{R=R_{e0}} \neq 0$$

lo cual no siempre ocurre.

Desde el punto de vista cuántico, la dispersión Raman supone transiciones en las que intervienen dos fotones, y son, por tanto, procesos de baja probabilidad. Uno de los fotones es absorbido y el otro reemitido. En la línea Stokes se absorbe un fotón desde el nivel vibracional $\nu = 0$ y después de emitir la molécula queda en el $\nu = 1$ (véase figura 28.6):

$$h\nu_E = h\nu_A - h\nu_e \quad [28.3.7]$$

En la anti-Stokes, la absorción es desde el de $\nu = 1$ y se reemite hasta el de $\nu = 0$:

$$h\nu_E = h\nu_A + h\nu_e \quad [28.3.8]$$

Como en equilibrio térmico está más poblado el nivel $\nu = 0$ que el $\nu = 1$, la línea Stokes es más intensa que la anti-Stokes. En el primer caso el fotón cede una parte de su energía para excitar vibracionalmente a la molécula, y en el segundo es la molécula vibracionalmente excitada la que cede un cuanto de energía vibracional al fotón emitido.

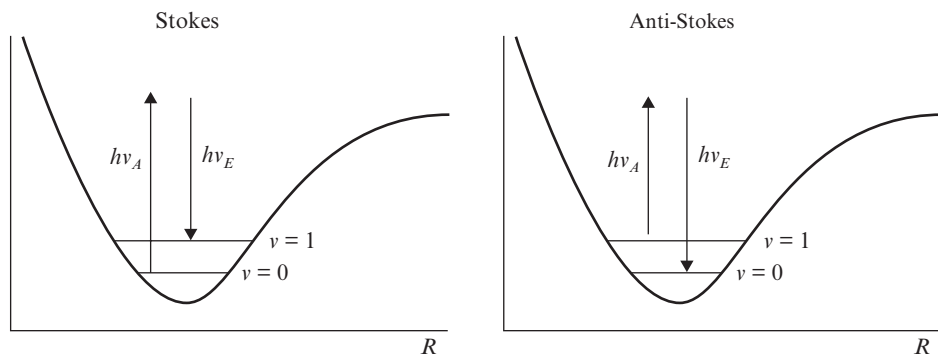


Figura 28.6. Líneas Stokes y anti-Stokes del efecto Raman.

28.4. INSTRUMENTACIÓN ESPECTROSCÓPICA

Una vez que hemos analizado desde el punto de vista teórico los distintos procedimientos que permiten a las moléculas absorber, emitir o dispersar luz, vamos ahora a explicar cómo se pueden obtener experimentalmente los espectros moleculares.

Si de momento nos restringimos a la que llamaremos espectroscopía convencional, hay tres tipos de espectros que pueden tener interés:

- Espectro de absorción, entendido como la distribución relativa, en función de la frecuencia (ν) o la longitud de onda (λ), de las intensidades absorbidas cuando el sistema molecular es iluminado por luz policromática.
- Espectro de excitación; para su obtención la muestra se ilumina con luz «monocromática» de frecuencia (o λ) variable y se registra la intensidad relativa que emite en una longitud de onda para cada una de excitación. El resultado se representa en función de la λ , o la ν , incidente. En ciertas ocasiones coincide con el de absorción.
- Espectros de emisión; se obtienen cuando la muestra se excita con una longitud de onda a la cual el material es absorbente y se registra la distribución relativa de la intensidad de la radiación emitida en función de su longitud de onda (o ν). Según las condiciones en las que se produce puede ser de fosforescencia, de fluorescencia, etc.

Para obtener estas diferentes clases de espectros se necesita hacer uso de diversas técnicas espectroscópicas que requieren de una instrumentación adecuada en cada caso que depende del rango de longitudes de onda en el que se pretende trabajar. Como ya hemos indicado, los espectros electrónicos están en el rango visible-ultravioleta, mientras que los de rotación-vibración están en el infrarrojo; la óptica a emplear es muy diferente en cada zona espectral. Además, también depende de la precisión en λ o ν con la que se quiera conocer el espectro (poder de resolución).

Cuando se trata de espectros moleculares, las líneas nunca son muy estrechas (a lo largo de este libro las hemos llamado bandas); el espectro electrónico, por ejemplo, aparece ensanchado por las transiciones vibracionales y, además, salvo que se tome especial cuidado para evitarlo, las interacciones intermoleculares en líquidos y sólidos también ensanchan el espectro. Por ello, en espectroscopía molecular no es necesario, en general, acudir a refinamientos tan especiales como en espectroscopía atómica para obtener los espectros (interferómetros de Fabry-Pèrot, de Michelson, etc.).

Nos vamos a limitar entonces a describir someramente las características esenciales de un espectroscopio sin referirnos a cada caso particular. Para cumplir su misión, un dispositivo de este tipo necesita, inexcusablemente, de una fuente de luz, de algunos elementos dispersores (prismas, redes de difracción, etc.) y de un detector de radiación (véase figura 28.7), además de la electrónica necesaria, tanto de medida como de control.

El proceso de selección de la longitud de onda se puede apreciar esquemáticamente, por ejemplo, en la figura 28.7(a); ahí la fuente ilumina una rendija de entrada S_1 y un sistema óptico forma la imagen de esta rendija en el detector (S_2). Como la luz ha sido dispersada por el prisma, en el detector aparecerá una imagen de S_1 por «cada» longitud de onda. Este dispositivo elemental (monocromador) permite seleccionar un rango de longitudes de onda variable barriendo el plano del detector con otra rendija de tamaño apropiado. La capacidad de resolución en longitudes de onda de este dispositivo está definida por su función instrumental, que depende de diversos parámetros, tales como la capacidad de dispersión del prisma, el tamaño de las rendijas, las características del detector, etc. Si el espectrómetro trata de registrar espectros de emisión, por ejemplo, precisará de dos monocromadores, uno fijo que seleccione la λ de la luz excitadora y otro variable que permita medir la intensidad emitida en cada rango de salida.

Los progresos que se han producido en la instrumentación utilizada en la espectroscopía molecular convencional se refieren fundamentalmente a la mejora del proceso de detección y análisis de la luz, ya sea mejorando el nivel mínimo de intensidad detectable o el rango de longitudes de onda analizable. Se han desarrollado así detectores fotosensibles tales como fotomultiplicadores, intensificadores de imagen, etc., e incluso nuevas técnicas de detección, recuento de fotones o analizadores ópticos multicanal (OMA), por ejemplo. Sin embargo, el elemento básico del espectroscopio convencional continúa siendo el monocromador.

Con la aparición del láser y su incorporación a las técnicas espectroscópicas, se ha desarrollado toda una gama de instrumentación, que podíamos señalar como no convencional, que ha permitido abordar la medida de muchas magnitudes imposible hasta entonces y extender la utilidad de esta espectroscopía láser a una gran variedad de aplicaciones en los campos científico y técnico.

En primer lugar, desde la aparición de láseres sintonizables es posible la sustitución del elemento excitador (lámpara + monocromador) por fuentes con mayor monocromaticidad y altas eficiencias luminosas. Además, otras características de la luz láser han permitido el desarrollo de nuevas técnicas espectroscópicas para la medida de parámetros muy difíciles de medir con la instrumentación convencional.

Así, la capacidad de los láseres pulsados de producir intensos pulsos de luz de duración inferior al femtosegundo (10^{-15} s), junto con el gran desarrollo de las técnicas de

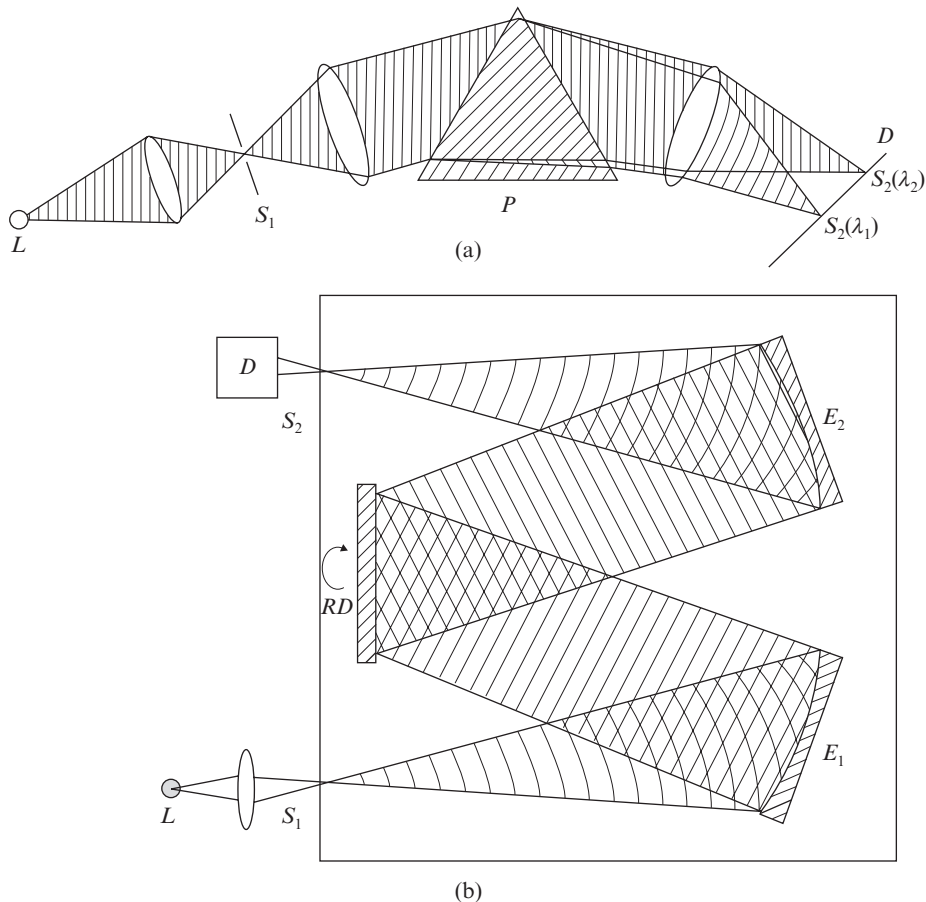


Figura 28.7. Esquema de espectroscopio de prisma y de red de difracción.

medida de pulsos cortos (en parte desarrolladas a partir de otras ya utilizadas anteriormente en física nuclear) han permitido la investigación de procesos ultrarrápidos que ocurren durante la excitación y desexcitación de los estados moleculares, permitiendo, por ejemplo, el seguimiento de la variación de población de algunos niveles moleculares mientras se produce la interacción entre una molécula de aminoácido y su entorno en el interior de las proteínas, proceso de gran interés en biología. La obtención de las curvas de desexcitación molecular permite, asimismo, el cálculo de tiempos de vida de niveles moleculares, de eficiencias cuánticas, etc., parámetros difíciles de medir en muchos casos sin el aporte de los láseres pulsados.

Ya hemos comentado que los espectros moleculares están formados por bandas anchas que no permiten la observación de la estructura vibracional que subyace bajo el espectro electrónico, a pesar de que la anchura de la fuente láser excitadora puede ser muy inferior a la de la propia línea vibracional que se trata de medir. Una importante fuente

de ensanchamiento de las líneas moleculares procede del desplazamiento Doppler de la frecuencia de emisión de cada molécula debido a la distribución de sus velocidades. Recientemente, se han desarrollado algunas técnicas experimentales que permiten la observación de espectros moleculares libres de ensanchamiento Doppler (espectroscopía láser sub-Doppler de alta resolución). El principio básico de la mayoría de estas técnicas es la selección de un grupo de moléculas cuya velocidad sea muy pequeña, al menos en alguna dirección prefijada. Esta selección puede conseguirse haciendo uso de pequeñas aberturas que seleccionan un haz colimado de moléculas (haces moleculares) mediante la rápida expansión adiabática del gas molecular a través de un pequeño orificio (jets supersónicos), enfriamiento con láser, etc.

Además de estos ejemplos de espectroscopía no convencional se han desarrollado técnicas de dispersión Raman estimulada, espectroscopía láser Raman anti-Stokes coherente (CARS), técnicas de espectroscopía multifotónica, etc., todas ellas fuera del alcance de este libro.

EJERCICIOS

28.1. Calcular la razón del primer intervalo energético entre niveles rotacionales y vibracionales para la molécula de HF. El momento de inercia de esta molécula es de $I = 1.35 \times 10^{-40} \text{ g cm}^2$, y la frecuencia vibracional de 3987 cm^{-1} .

28.2. Calcular la masa reducida y el momento de inercia de la molécula de HI sabiendo que la distancia interatómica es de $1.06 \times 10^{-10} \text{ m}$ y las masas respectivas: $m_H = 1836$ veces la del electrón y $m_I = 127m_H$. ¿Cuál es la estructura de su espectro rotacional? ¿Y la longitud de onda de la radiación absorbida o emitida entre niveles adyacentes?

28.3. En la misma molécula, suponer que la energía total de la molécula es la suma de sus energías vibracional y rotacional. Demostrar que los números de onda de la radiación absorbida y emitida por la molécula, suponiendo que sólo se excita un nivel vibracional pero muchos rotacionales, pueden ponerse en la forma: $\nu_0 \pm m\Delta\nu$, siendo m un número entero, y calcular $\Delta\nu$.

28.4. Hallar el momento de inercia y la distancia internuclear en la molécula $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ si la diferencia de dos líneas vecinas de la banda rotacional vibracional infrarroja es de 20.9 cm^{-1} .

28.5. Del valor de la longitud de onda recíproca equivalente a la vibración fundamental de una molécula de Cl_2 , 2940.8 cm^{-1} , en la que cada uno de los átomos tiene un peso atómico de 35, determinar la longitud de onda recíproca correspondiente al Cl_2 cuando uno de sus átomos tiene un peso atómico de 35 y el otro de 37. ¿Cuál es la separación de las líneas espectrales en longitud de onda recíproca debida a este efecto isotópico?

Soluciones a los ejercicios (capítulos 24 a 28)

24.1. Llamando en coordenadas elípticas:

$$\xi = (r_A + r_B)/R \quad \eta = (r_A - r_B)/R \quad R = |r_A - r_B|$$

(φ : ángulo de rotación alrededor del eje),

el elemento de volumen es:

$$d\tau = (R^3/8)(\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\varphi$$

Con ello:

$$S' = \left(1 + R + \frac{R^2}{3}\right) \exp(-R)$$

24.2.

$$E_p = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + \frac{1}{(1+S)4\pi\epsilon_0} \times \left\{ -\frac{e^2}{a_0} e^{-\frac{R}{a_0}} \left(1 + \frac{R}{a_0}\right) - \frac{e^2}{R} \left[1 - e^{-\frac{2R}{a_0}} \left(1 + \frac{R}{a_0}\right)\right] \right\}$$

$$E_i = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + \frac{1}{(1-S)4\pi\epsilon_0} \times \left\{ -\frac{e^2}{a_0} \left[1 - e^{-\frac{2R}{a_0}} \left(1 + \frac{R}{a_0}\right)\right] + \frac{e^2}{a_0} e^{-\frac{R}{a_0}} \left(1 + \frac{R}{a_0}\right) \right\}$$

con

$$S = e^{-\frac{R}{a_0}} \left[1 + \frac{R}{a_0} + \frac{1}{3} \left(\frac{R}{a_0}\right)^3\right]$$

24.3. A partir de la expresión que da la capacidad de un condensador de geometría conocida es elemental el cálculo de la constante dieléctrica del gas, la cual está rela-

cionada con la polarización macroscópica y con la intensidad del campo polarizante por:

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi P}{E}$$

De la definición de la polarización y teniendo en cuenta que la polarización creada por el campo tiende a ser destruida por la agitación térmica, se puede escribir:

$$\bar{P} = \frac{EP^2}{3kT} \quad \text{siendo } P \text{ el momento dipolar}$$

\bar{P} el medio

y, en definitiva:

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi N_0 P^2}{3kT} \quad N_0 \rightarrow \text{número de moléculas por unidad de volumen}$$

que es la expresión buscada. *Nota:* en realidad, esta última expresión está incompleta, ya que hay una contribución a la constante dieléctrica del momento dipolar inducido, pero ésta no depende de la temperatura, y, por tanto, si se representa la ε en función de $1/T$, la pendiente de la recta dará el momento dipolar permanente.

24.4. *D:* Profundidad del pozo de potencial.

r_0 : Distancia entre los núcleos en la posición de equilibrio.

β : Está relacionada con la frecuencia propia de vibración de la molécula:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \sqrt{\frac{2D\beta^2}{\mu}}$$

(véase capítulo 27).

24.5. a) $R \rightarrow 0$.

Queda un átomo hidrogenoide formado por un núcleo con dos protones y un electrón: $Z = 2$. $E = -4 \times 13.6$ eV; $\varphi \rightarrow \varphi_{100}$ con $Z = 2$.

b) $R \rightarrow \infty$.

$E = -13.6$ eV; $\varphi \rightarrow \varphi_{100}$ con $Z = 1$.

25.1. $M_1 = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4$.

$M_2 = -1, 0, 1$.

	Λ	M_1	M_2	Estados	Términos
A	$L_1 + L_2 = 5$	± 4	± 1	2	1
	$L_1 + L_2 - 1 = 4$	± 4 ± 3	± 0 ± 1	4	2
	$L_1 - L_2 = 3$	± 4 ± 3 ± 2	∓ 1 ± 0 ± 1	6	3
B	$L_1 - L_2 - 1 = 2$	± 3 ± 2 ± 1	∓ 1 ± 0 ± 1	6	3
	$L_1 - L_2 - 2 = 1$	± 2 ± 1 ± 0	∓ 1 ± 0 ± 1	6	3
	$L_1 - L_2 - 3 = 0$	1 0 -1	-1 0 1	6	3

$$A \dots (0+1) + (1+1) + (1+2) = \sum_0^2 (i+1)$$

$$B \dots 3 \times (2+1) = (L_1 - L_2)(2L_2 + 1)$$

$$A + B = \sum_0^{2L_2} (i+1) + (L_1 - L_2)(2L_2 + 1) = 5 \times 3 = (L_1 + 1)(2L_2 + 1)$$

25.2. ${}^1\Sigma_g^+, {}^3\Sigma_u^+, {}^5\Sigma_g^+, {}^7\Sigma_u^+$.

25.3. ${}^1\Sigma_g^+, {}^1\Sigma_u^-, {}^3\Sigma_u^+, {}^3\Sigma_g^-, {}^1,3\Sigma_u^-, {}^1,3\Pi_g^-, {}^1,3\Pi_u^-, {}^1\Delta_g^-, {}^3\Delta_u^-$.

25.4. ${}^1\Sigma^+, {}^3\Sigma^+$.

25.5. ${}^1\Sigma^+, {}^3\Sigma^+, {}^1\Pi, {}^3\Pi$.

26.1. Si ϕ_+ es la función espacial par y ϕ_- la impar:

ϕ_+	—	\uparrow	\rightarrow	\uparrow	\downarrow	$\uparrow \downarrow$
ϕ_-	$\uparrow \downarrow$	\uparrow	\rightarrow	\downarrow	\downarrow	—
M_s	0	1	0	0	-1	0
	a	b	c	d	e	f

26.2. Con la notación del ejercicio anterior:

$$\phi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_+(1)\phi_+(2)[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)]$$

$$\phi_b = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_+(1)\phi_-(2) - \phi_-(1)\phi_+(2)]\chi_+(1)\chi_+(2)$$

$$\phi_c = \frac{1}{2} [\phi_+(1)\phi_-(2) - \phi_-(1)\phi_+(2)][\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2)]$$

$$\phi_d = \frac{1}{2} [\phi_+(1)\phi_-(2) + \phi_-(1)\phi_+(2)][\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)]$$

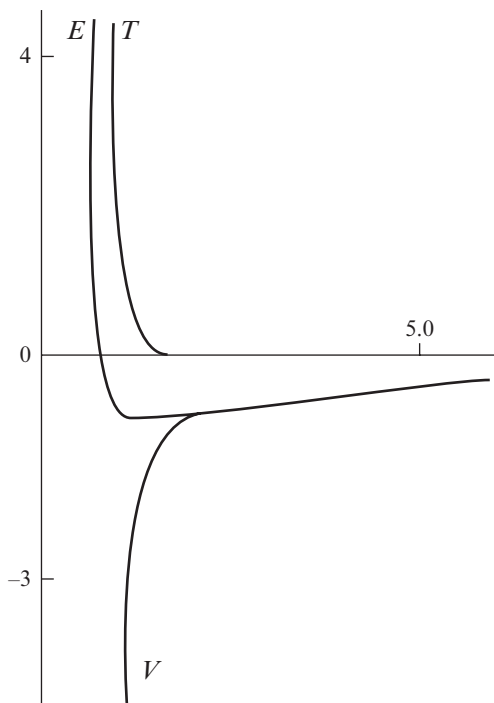
$$\phi_e = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_+(1)\phi_-(2) - \phi_-(1)\phi_+(2)]\chi_-(1)\chi_+(2)$$

$$\phi_f = \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_-(1)\phi_-(2)[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)]$$

26.3. Haciendo uso del teorema del virial:

$$\langle T \rangle = -E - R \frac{dE}{dR} = R^{-12}$$

$$\langle V \rangle = 2E + R \frac{dE}{dR} = -\frac{10}{11R^{12}} - \frac{12}{11R}$$



El enlace es iónico.

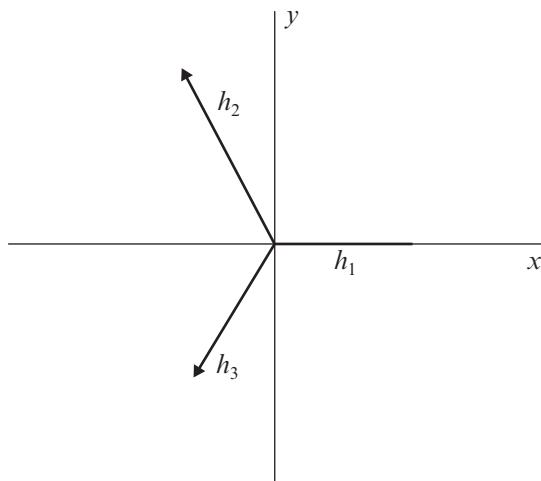
26.4. 180° .

26.5.

$$h_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} s + \sqrt{\frac{2}{3}} p_x$$

$$h_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} s - \frac{1}{\sqrt{6}} p_x + \frac{1}{\sqrt{2}} p_y$$

$$h_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} s - \frac{1}{\sqrt{6}} p_x - \frac{1}{\sqrt{2}} p_y$$



27.1. Hacer uso de la distribución de Boltzmann:

$$E' > E$$

- a) 300 K: $n_{E'}$ prácticamente nulo. 1000 K: $n_E = 1.3 \times 10^{16} n_{E'}$.
- b) 300 K: $n_E = 7n_{E'}$. 1000 K: $n_E = 1.79 n_{E'}$.
- c) 300 K: $n_E = n_{E'}$, lo mismo que a 1000 K.

27.2. La forma de la curva de potencial no se modifica al considerar deuterio en lugar de hidrógeno, ya que sólo depende de la interacción electromagnética entre los núcleos, que sigue siendo la misma. La diferencia aparece en los estados vibracionales y rotacionales debido a la diferente masa de los núcleos que altera tanto la frecuencia de vibración como el momento de inercia:

$$E_0^{D_2} = E_0^{H_2} / \sqrt{2} = 0.192 \text{ eV}$$

- 27.3. a : Dimensión lineal de la molécula.
 μ : Masa del electrón.
 M : Masa del núcleo.

$$E_{\text{el}} \approx \hbar^2 / \mu a^2$$

$$E_{\text{vib}} \approx (\mu / M)^{1/2} E_{\text{el}}$$

$$E_{\text{rot}} \approx (\mu / M) E_{\text{el}}$$

$$\mu / M \approx 10^{-4} \dots E_{\text{vib}} \approx E_{\text{el}} \times 10^{-2} \dots E_{\text{rot}} \approx E_{\text{vib}} \times 10^{-2}$$

- 27.4. a) B tiene mayor distancia internuclear.
- b) B tiene mayor momento de inercia.

Soluciones a los ejercicios (capítulos 24 a 28)

- c) A tiene mayor energía de punto cero.
 d) A tiene mayor energía de ligadura (pozo más profundo).

27.5. a) Calcular la masa reducida:

$$\mu = 1.2 \times 10^{-26} \text{ g}$$

$$I = \mu R^2 = 4.8 \times 10^{-42} \text{ g} \times \text{cm}^2$$

Nivel 0: energía: 0.

Nivel 1: energía: \hbar^2/I .

Nivel 2: energía: $3\hbar^2/I$.

b) 5.

28.1. 0.0104.

28.2.

$$\mu = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$I = \mu R^2 = 4.25 \times 10^{-47} \text{ kg} \times \text{m}^2$$

Las energías de los primeros niveles rotacionales son:

$$E_0 = 0 \quad ; \quad E_1 = \hbar^2/I = 2.5 \times 10^{-21} \text{ J}$$

$$E_2 = 3\hbar^2/I = 7.5 \times 10^{-21} \text{ J} \quad ; \quad E_3 = 6\hbar^2/I = 1.5 \times 10^{-20} \text{ J}$$

$$\lambda_{01} = 0.75 \text{ mm} \quad \lambda_{12} = 0.37 \text{ mm} \quad \lambda_{23} = 0.25 \text{ mm}$$

28.3. $E_T = E_{\text{rot}} + E_{\text{vib}} = (\hbar^2/2I)r(r+1) + (v+1/2)\hbar\omega_0$
 en la transición $r=0$ a $r=1$ y teniendo en cuenta la regla de selección $\Delta r = \pm 1$:
 $\Delta \bar{\nu} = 1.31 \times 10^3 \text{ m}^{-1}$.

28.4.

$$I = 2.65 \times 10^{-40} \text{ g} \times \text{cm}^2$$

$$R = 1.29 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

28.5. $\lambda'_0/\lambda_0 = (\mu'/\mu)^{1/2} \dots \lambda'_0 = 2900.8 \text{ cm}^{-1}$
 $1/\lambda_0 - 1/\lambda'_0 = 40.0 \text{ cm}^{-1}$.

PARTE QUINTA

Sólidos

- La estructura cristalina del estado sólido.
- Electrones en sólidos.
- Algunos efectos cuánticos en sólidos.
- Orden magnético espontáneo en sólidos.
- Superconductividad.

BIBLIOGRAFÍA

Ascroft, N. W. y Mermin, M. D. (1976). *Solid State Physics*. Nueva York: Harcourt.

Uno de los libros clásicos en el panorama de los libros de texto en Estado Sólido. Más extenso que el de Kittel y de nivel más avanzado. Sigue un orden en el desarrollo de los temas muy diferente al libro de Kittel. Contiene más tablas, apéndices y problemas (sin resolver) que aquél.

Ibach, H. y Lüth, H. (2009). *Solid State Physics. An Introduction to Theory and Experiment*. Berlín: Springer-Verlag.

Es un texto de lectura fácil donde vienen claramente diferenciados los aspectos básicos de los más especializados. Cuenta con un gran número de dibujos y esque-

mas. En comparación con el anterior y el posterior, el número de tablas y de problemas (sin resolver) es pequeño.

Kittel, C. (2005). *Introduction to Solid State Physics* (8.^a ed.). Nueva York: John Wiley.

Durante muchos años ha sido el libro de texto de referencia en todo el mundo. Cubre, de una manera accesible, todos los temas. Reúne una gran cantidad de tablas, diagramas y resultados experimentales. Utiliza en paralelo los sistemas internacional y gaussiano de unidades. Cuenta con numerosos problemas (sin resolver) y apéndices. Existe una traducción española (Editorial Reverté, 1993) de la 6.^a edición en inglés que es del año 1986.

29

La estructura cristalina del estado sólido

José Luis Vicent

29.1. PLANTEAMIENTO GENERAL

Durante los próximos capítulos se abordarán algunos aspectos de la física cuántica de los sólidos. Es necesario, antes de empezar con el desarrollo propiamente dicho de los temas elegidos, que el lector conozca con la mayor claridad el propósito que persigue el autor y los motivos que han conducido al enfoque con el que se presentan.

En primer lugar, hay que señalar que no se pretende que estos capítulos sean una introducción a la Física del Estado Sólido; por tanto, existe un gran número de aspectos básicos que no se mencionan, por dos motivos: bien por ser temas un tanto alejados del formalismo de la física cuántica (como pueden ser defectos en sólidos), o bien por necesitar un formalismo matemático más avanzado del que se supone que maneja el lector (ejemplo de este último caso puede ser el campo cristalino).

Otro punto a destacar es que la física del estado sólido está bastante cerca de lo que puede ser la experiencia diaria del lector. Por ejemplo, todo el mundo tiene la experiencia real de lo que es un metal, pero resulta más aventurado decir lo mismo de un átomo o de una molécula.

Finalmente, hay que tener en cuenta que las técnicas que se manejan están basadas en fuertes aproximaciones. Por lo pronto, en 1 cm^3 de un sólido tenemos del orden de 10^{23} partículas. Resolver el hamiltoniano de tal número de partículas, para poder conocer la energía de cada una de ellas, es tarea imposible (por supuesto que fuera del alcance de cualquier supercomputador, por muy en paralelo que trabaje). El mundo real está muy alejado de poder describirse con una precisión matemática. En la física del estado sólido nos encontramos de una manera natural con las técnicas de la física estadística y con la necesidad de recurrir a métodos aproximados, a veces con aproximaciones muy drásticas. Ahora bien, estos métodos resultan ser extraordinariamente útiles y poderosos, como lo demuestra el amplio conocimiento que se tiene de las leyes que rigen el comportamiento de los sólidos y la posibilidad de diseñar y construir, basados en esas leyes, dispositivos de estado sólido que llenan el mundo actual (transistores, memorias de computadores, diodos de emisión de luz, etc.).

Por último, unas consideraciones sobre los capítulos que siguen. En principio, salvo los dos primeros, se intenta que sean independientes, teniendo siempre presente que éste es un libro de física cuántica, es decir, el único criterio que prevalece es el carácter cuántico del tema que se va a tratar. La primera preocupación que debemos tener es ver si en

un sólido los efectos son de carácter cuántico o no. Una manera sencilla de poder responder a esta pregunta es viendo si la longitud de onda de De Broglie, asociada con el momento de las partículas, es del orden o menor que la longitud característica sobre la cual el potencial que actúa sobre las partículas cambia de una manera importante. En principio, un sólido está formado por electrones e iones. Los electrones se están moviendo en el potencial creado por los iones. Este potencial varía de una manera significativa entre dos iones, siendo la distancia entre próximos vecinos, como mucho, del orden de 3 \AA , y si calculamos, en un metal (véase problema 29.1) la longitud de onda de De Broglie resulta ser del mismo orden. Por tanto, en principio, se puede esperar que los electrones en sólidos respondan a comportamientos regidos por la física cuántica. Pero no es sólo este cálculo estimativo el que nos indica que las leyes de la naturaleza que gobiernan el comportamiento de los sólidos son de carácter cuántico; existen situaciones fundamentales que requieren el formalismo cuántico. Por ejemplo, el teorema de van Leeuwen dice: «Sea un conjunto de electrones clásicos no relativistas en equilibrio térmico, para cualquier temperatura finita y cualquier valor finito de un campo eléctrico o magnético aplicado, la imanación resultante es idénticamente nula», lo cual quiere decir que, en el marco de la física clásica, el magnetismo es imposible. Dicho con otras palabras, en la estadística de Boltzmann no pueden existir momentos magnéticos inducidos. Dado que la experiencia diaria nos demuestra que existe imanación, algo no va bien. La física cuántica, como veremos en el capítulo 32, nos da la respuesta correcta.

Pasaremos a continuación a detallar los temas que se tratan en éste y en los siguientes capítulos dedicados a la física del estado sólido.

En los dos primeros se tratan aquellos aspectos básicos del sólido, eso sí, de una manera muy breve y, sin duda, con lagunas, que son imprescindibles para poder seguir los tres últimos capítulos. No ha existido ningún criterio específico para elegir los temas que se consideran en estos tres capítulos, tan sólo que el carácter cuántico fuese fundamental, que por la brevedad del tema se pudiesen tratar de una manera lo más completa posible y que las herramientas necesarias estuviesen en los dos primeros capítulos. En este capítulo, se describe de una forma breve la estructura cristalina de un sólido perfecto, introduciendo una de las características fundamentales en un sólido: la simetría y la periodicidad que presenta la red cristalina. Asimismo, se introduce el efecto de la temperatura, que conduce a la aparición de unas «partículas» cuánticas llamadas fonones, cuyo número se puede aumentar o disminuir a voluntad, aumentando o disminuyendo la temperatura, finalizando con una sección dedicada a efectos de difracción por la red cristalina. El segundo capítulo (véase capítulo 30), está dedicado a los electrones dentro de la estructura cristalina. Se introducen conceptos cruciales en el comportamiento de un electrón en un sólido, como son la función de Bloch, la masa efectiva, la energía de Fermi, etc., y se pone de manifiesto la nueva disposición de los niveles de energía en un sólido, formando bandas de energía, y su importancia para que un sólido se comporte como un metal, un aislante o un semiconductor.

Los tres últimos capítulos (31, 32 y 33) tratan de aspectos concretos de la física del estado sólido. En el capítulo 31 se consideran varios temas en los que predomina el carácter cuántico del problema, como pueden ser la cuantización de una banda de conducción en presencia de un campo magnético, las diferentes masas efectivas en una misma banda,

las resonancias, etc. Los dos últimos (32 y 33) son dos capítulos monográficos dedicados a los dos aspectos más importantes, y quizá con más marcado carácter cuántico, de los fenómenos de orden a largo alcance que aparecen en los sólidos. El capítulo 32 está dedicado a la aparición, en determinadas circunstancias, del orden magnético espontáneo. Como acabamos de decir unas líneas más arriba, el origen de este efecto no existe en la física clásica. El último (capítulo 33) está dedicado a la superconductividad, que es un ejemplo claro de efectos cuánticos macroscópicos.

Una advertencia final: en todos estos capítulos se ha utilizado el sistema gaussiano de unidades. La razón es bien simple: es el sistema común que se maneja en la física del estado sólido, incluyendo, por supuesto, los libros de texto.

29.2. LA RED CRISTALINA

Es inevitable comenzar con un tema que no tiene nada en común con la física cuántica. La descripción de un sólido perfecto como un ente ordenado de átomos es un paso imprescindible para poder tratar las leyes físicas que gobiernan las propiedades de los sólidos.

Desde el punto de vista de su estructura, los sólidos se pueden clasificar en amorfos, policristales y monocristales. Un amorfo es, en realidad, un líquido sobreenfriado, donde los diferentes átomos no tienen ni orden químico ni orden topológico de largo alcance, aunque puede existir un cierto orden de corto alcance. Durante los últimos años, los vidrios metálicos o compuestos amorfos han tenido un desarrollo espectacular, siendo sin duda uno de los campos de la física del estado sólido que ha avanzado más, no sólo desde el punto de vista de la investigación, sino también desde el de las aplicaciones. Por supuesto que en este libro el estudio de la física de los vidrios metálicos está poco indicado. Son los sólidos de estructura perfecta los que se pueden estudiar teóricamente de una manera sencilla. Vamos, pues, a hablar de los monocristales o de cristales perfectos.

En general, lo que se conoce como un cristal en el lenguaje normal (el cristal de una ventana) es, en realidad, un vidrio. Un cristal es todo lo contrario a un vidrio. En un sólido cristalino perfecto, los átomos están situados, perfectamente ordenados, en una estructura periódica que se conoce con el nombre de red cristalina. En una red cristalina es posible definir lo que se llama la celda unidad, que, repitiéndose en tres dimensiones a sí misma, nos reproduce el sólido. Un sólido cristalino se caracteriza por poseer simetría translacional en tres dimensiones. Los átomos que lo constituyen están agrupados de tal manera que a lo largo de cualquier dirección espacial se repiten periódicamente de una manera regular.

Resumiendo, se puede escoger un volumen del cristal, donde estén incluidos todos los átomos no equivalentes del sólido y todos los elementos de simetría que existan, de tal forma que la repetición de este volumen en el espacio nos reproduce el cristal. Este volumen constituye la celda unidad. Existen diferentes formas de definir una celda unidad, pero se puede comprobar que todas son equivalentes. En principio, en todo lo que sigue vamos a considerar que, salvo que se indique explícitamente lo contrario, existe un único tipo de átomo en el cristal.

Hemos introducido la palabra clave para poder simplificar de una manera natural el problema del número gigantesco de átomos y partículas que constituyen el sólido. La palabra clave es simetría. Un cristal (un monocristal) posee una simetría que es la base de toda la teoría del estado sólido. Antes de seguir adelante, una puntualización: cuando el cristal es lo suficientemente perfecto como para que se reproduzca macroscópicamente la celda unidad, se tiene lo que se conoce como un monocristal. Lo habitual es que, macroscópicamente, se tenga lo que se llama un policristal. Un policristal está formado por pequeñas regiones, llamadas granos, separadas unas de otras por las fronteras de grano donde, al pasar de una región a otra, la orientación y las direcciones de los ejes de simetría cambian. En este capítulo y en los siguientes nos vamos a referir, bajo el nombre genérico de cristal, tan sólo a los monocristales; en estos capítulos los cristales son sólidos perfectos, es decir monocristales.

Una parte muy importante de la física del estado sólido está basada en el estudio de las simetrías y de los grupos puntuales que éstas forman. Al no intentar ser estos capítulos una introducción a la física del estado sólido, como ya se ha indicado, solamente nos vamos a referir a los conceptos mínimos necesarios para poder desarrollar los capítulos siguientes, dejando de lado temas tan importantes como pueden ser los sistemas cristalinos, las redes de Bravais, clases cristalinas, cuasicristales, etc. (se remite al lector interesado a cualquiera de los textos citados en la bibliografía).

Uno de los temas de cristalografía imposibles de obviar es la definición de la celda de Wigner-Seitz. Entre las diferentes formas de construir una celda unidad, la llamada celda de Wigner-Seitz se construye de la siguiente manera: *a*) elíjase un punto de la red cristalina y trácense líneas rectas que unen ese punto con los puntos de la red próximos a ese dado, y *b*) por el punto medio de esas líneas, y perpendicular a esas líneas, trácense planos, que se cortarán unos con otros. El volumen encerrado por esos planos alrededor del punto considerado constituye una celda unidad (véase figura 29.1).

Otro tema de cristalografía que necesitamos mencionar es el criterio para determinar las direcciones y planos cristalográficos. Un plano cristalino se determina por sus índices de Miller, que son tres números que se obtienen de la siguiente forma: *a*) determinar las intersecciones del plano con los tres ejes de coordenadas cartesianas; *b*) tomar las distancias de las intersecciones al origen en múltiplos de la constante de la red, y *c*) finalmente, se toman los inversos de estos tres números y se reducen a los enteros más pequeños que conserven la misma relación (véase problema 29.2). También conviene señalar que se sigue el criterio de que cuando el plano corta al eje en el infinito, se toma como número de Miller el cero. El único convenio que se toma para distinguir si los índices de Miller se refieren a planos o a direcciones es utilizar distintos tipos de paréntesis para cada caso. Así, se tiene que, en una celda cúbica, (100) nos indica la familia de planos paralelos al plano Y, Z , mientras que $\langle 100 \rangle$ nos indica las direcciones paralelas al eje X .

Otro aspecto muy importante es clasificar a los sólidos no tanto por las simetrías con la que cristalizan, sino por el tipo de mecanismo que mantiene a los átomos formando la estructura adecuada. En esta introducción nos vamos a referir brevemente a este asunto (en el capítulo 26 se trató ya de algunos aspectos importantes de este tema). Lo primero de todo es tener en cuenta que, en las condiciones adecuadas de presión y temperatura, casi todos los compuestos y elementos se pueden obtener en estado sólido (por ejemplo,

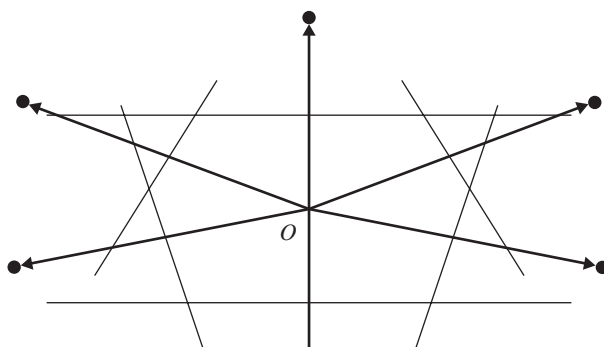


Figura 29.1. Celda de Wigner-Seitz para un cristal bidimensional.

hasta los gases nobles pueden formar cristales). Esto indica que, en cuanto a las interacciones que mantienen unidos a los átomos, existe una gran variedad de comportamientos en los sólidos. El origen primario de este hecho es bien sencillo: interacciones de tipo coulombiano, junto con el principio de exclusión de Pauli y la estructura electrónica de las capas externas, capa de valencia de cada elemento. No vamos a entrar en detalles, tan sólo vamos a citar la clasificación propuesta por P. W. Anderson. Se pueden clasificar los sólidos según el tipo de enlace en cinco grupos, que serían:

1. Enlace de van der Waals; por ejemplo, se pueden citar los cristales de los gases nobles.
2. Enlace de puente de hidrógeno; por ejemplo, el hielo (H_2O).
3. Cristales iónicos; por ejemplo, la sal común ($ClNa$).
4. Cristales covalentes; por ejemplo, el diamante (C).
5. Metales; por ejemplo, el cobre (Cu).

Hay que señalar que las fronteras entre muchos de estos tipos de enlace no son muy nítidas, y que en muchos casos se debe hablar de que un tipo de enlace predomina sobre otro, pero estando ambos presentes.

Solamente viendo la gran variedad de materiales que se han puesto como ejemplos, se puede tener una idea de lo complejo del tema. Desgraciadamente, el estudio, aunque fuese breve, de las interacciones de cohesión, de los tipos de enlace, que forman los sólidos ocuparían demasiado espacio en este capítulo; en fin, no está de más recordar que las magnitudes físicas espacio y tiempo tienen sus limitaciones.

29.3. EL EFECTO DE LA TEMPERATURA: FONONES

Hasta este momento hemos considerado el cristal como un ente perfecto, con los átomos situados en posiciones fijas de la red cristalina, formando una celda unidad que se repite a lo largo del cristal de una manera perfecta. En la sección 29.1 se dijo que uno de

los temas de los sólidos en los que no íbamos a entrar era en los defectos en sólidos. En esta sección vamos a hacer una salvedad.

En los sólidos reales existe todo tipo de defectos, uno fundamental es la superficie; los átomos que forman la superficie no están «viendo» la misma estructura alrededor de ellos que un átomo del interior del cristal. Otra fuente importante de defectos en el cristal es la temperatura; un cristal real no está a 0 K, se encuentra a una cierta temperatura, y al existir una cierta energía térmica en el cristal, los átomos se mueven alrededor de sus posiciones de equilibrio, emborronando, por decirlo de alguna manera, la perfección de la red. Vamos a dedicar esta sección a este aspecto fundamental en la física del estado sólido.

A temperaturas distintas de 0 K, dejando aparte las oscilaciones del punto cero, los átomos que constituyen el sólido se están moviendo, y al estar ligados unos a otros por la interacción que da lugar al enlace, su movimiento se traduce en oscilaciones colectivas que se propagan a través del cristal. Estas oscilaciones vienen caracterizadas por su longitud de onda λ , su frecuencia ω , su amplitud A y su número de onda q , que es el parámetro que vamos a utilizar, definido por

$$q = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Cada valor de q representa un modo de vibración (en realidad, para cada q tenemos tres modos, uno longitudinal y dos transversales; cada átomo tiene tres grados de libertad). Estos modos de vibración producidos por oscilaciones colectivas de los átomos, que son entidades discretas, se pueden cuantizar, de tal forma que la energía de cada modo está cuantizada, esto es, existe una unidad cuántica de energía, y, dado que los modos son ondas elásticas, de hecho hemos cuantizado la energía de las ondas elásticas. Igual que se cuantiza la energía electromagnética y se tienen los fotones, en este caso los cuantos se conocen con el nombre de fonones. Cuando no todos los átomos que constituyen el sólido son de la misma naturaleza, se pueden distinguir dos clases fundamentales de oscilaciones, llamadas acústicas y ópticas, que se caracterizan porque las oscilaciones ocurren en la misma dirección para todos los átomos en general (fonones acústicos), o bien porque todos los átomos de un tipo oscilan en dirección contraria a los del otro tipo (fonones ópticos). Las primeras excitaciones son de energía más baja que las segundas. Mientras las acústicas son las responsables de la propagación de sonidos o ultrasonidos, las ópticas lo son, por ejemplo, de la absorción en el infrarrojo de los haluros alcalinos. Un fonón con una longitud de onda y una dirección de propagación características puede transportar oscilaciones a lo largo de la dirección de propagación (longitudinales), o perpendicularmente a ella en las dos direcciones posibles (transversales).

Exactamente igual que se puede pensar en una onda electromagnética como un chorro de unas partículas llamadas fotones, podemos hablar de una onda elástica en un sólido como un chorro de fonones que transportan la energía y que se desplazan a la velocidad del sonido en ese sólido. De todas formas, conviene no perder de vista que estamos tratando con algo físico, con origen en las vibraciones de los átomos de la red cristalina, de tal forma que si, por ejemplo, aumentamos la temperatura, aumentaremos las vibraciones de los átomos, esto es, estaremos creando más fonones. Estamos acostumbrados a que el

número de partículas sea constante; tenemos ahora un caso en que no es así, estas «partículas» tan especiales en un sólido son susceptibles de aumentar o disminuir su número variando la temperatura. El número de fonones n_q que existe en un modo a una temperatura T viene dado por

$$n_q = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

Esto es, un número de ocupación de fonones n_q significa que se tienen n_q fonones del tipo q ; dicho de otra forma, que el modo normal q está en su estado excitado n_q .

Está claro que los fonones son bosones y no cumplen el principio de exclusión de Pauli (véanse los capítulos 15, 16 y 17).

Por último, nótese que la simetría propia del cristal tiene un papel preponderante en las oscilaciones propias de los átomos del mismo. Como es fácil presumir, éste es un tema bastante rico y complicado, pero, a pesar de su complejidad, solamente nos van a interesar aspectos muy concretos. Uno de ellos es la llamada frecuencia de Debye ω_D , que define a su vez una energía de Debye $\hbar\omega_D$, y una temperatura de Debye θ_D , de tal forma que

$$\hbar\omega_D = k_B\theta_D$$

El modelo de Debye de un sólido consiste en considerar el sólido en su límite clásico, es decir, como un continuo elástico. Si se tiene en cuenta que por cada celda unidad existe un solo átomo, y tenemos N celdas unidad, entonces la frecuencia de Debye viene determinada por el valor máximo que puede tener en tal sólido, tomado como un medio continuo, la frecuencia de vibración, y este valor viene determinado por el criterio de que el número total de modos de vibración debe ser igual al número de grados de libertad del sólido completo, y este número es $3N$, ya que tenemos 3 grados de libertad por cada átomo y N átomos en el sólido. Aunque este modelo parece muy simple, es extraordinariamente útil para tener una idea de cuál es la frecuencia máxima de los fonones en un sólido. La frecuencia de Debye es una característica típica de cada material.

Para terminar, vamos a abordar un tema que se puede tratar en unas pocas líneas y que reúne claramente las condiciones indicadas anteriormente; esto es, tenemos un claro ejemplo de la necesidad de aplicar la teoría cuántica para explicar efectos en sólidos. Vamos a estudiar los diferentes modelos de calor específico en la red cristalina.

El calor específico de un sistema en el que no cambia el volumen nos indica el ritmo de variación de la energía interna del sistema al cambiar la temperatura. Viene definido por la expresión:

$$C = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V$$

En un sólido, al cambiar la temperatura cambia su energía interna. El calor específico de los sólidos constituye uno de los temas que resultan más esclarecedores del comportamiento de un sólido, y es una de las comprobaciones más claras de la necesidad de abordar el estudio de los sólidos desde un punto de vista cuántico.

Experimentalmente se comprueba que, en un sólido, el calor específico se puede extrapolar a cero cuando la temperatura vale 0 K, y alcanza un valor constante a alta temperatura, siendo la variación como T^3 cuando estamos a baja temperatura. Este resultado está en abierta contradicción con lo que predice la física clásica. Recordemos brevemente la predicción de la física clásica: sea un sólido formado por átomos que se encuentran situados en puntos concretos de la red cristalina, y supongamos que estamos a una temperatura determinada, T ; los átomos vibrarán, por efecto de la energía térmica, alrededor de sus posiciones de equilibrio. Clásicamente, podemos considerar a las fuerzas de enlace que mantienen la estructura de la red como un conjunto de muelles que mantienen los átomos juntos y podemos aproximar las interacciones que mantienen la estructura cristalina por interacciones de tipo oscilador armónico. Cuando el cristal se calienta, los átomos vibran alrededor de sus posiciones de equilibrio como un conjunto de osciladores armónicos clásicos. La física clásica nos indica que la energía media por átomo a una temperatura T , teniendo en cuenta las tres direcciones posibles de movimiento, es

$$\varepsilon = 3k_B T$$

donde k_B es la constante de Boltzmann. Si en vez de calcular la energía media de un átomo calculamos la energía para el conjunto de átomos por mol de la sustancia (véase problema 29.3), y calculando el calor específico, se tiene:

$$C = 3R$$

donde $R = N_A k_B$, siendo N_A el número de Avogadro.

Resultado importante en el marco de la física clásica: el calor específico de un sólido es independiente de la temperatura a la que se encuentra. Esto, como acabamos de decir, es experimentalmente incorrecto.

Ahora bien, para temperaturas altas, incluyendo entre éstas la temperatura ambiente, la expresión que acabamos de deducir (ley de Dulong-Petit) responde a los datos experimentales. Tan sólo cuando se empieza a bajar la temperatura es cuando la capacidad calorífica deja de ser constante y va disminuyendo hasta desaparecer a 0 K. Entramos, al disminuir la temperatura, en el campo de la física cuántica. Einstein propuso el primer paso, dentro de la física cuántica, para resolver este problema. A continuación vamos a desarrollar brevemente su modelo.

La novedad que propone Einstein frente al modelo clásico consiste en mantener la idea de que los átomos se comportan como osciladores armónicos independientes, pero suponer que la energía de esos osciladores está cuantizada. En este caso, y si prescindimos de la energía del punto cero, que para la discusión que sigue es irrelevante, la energía real de un oscilador cuántico es (recordar el capítulo 8)

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

donde ω es la frecuencia y n es el número cuántico. Mientras que vamos a considerar, en lo que sigue,

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega$$

como energía del oscilador, esto es, redefinimos el cero para cada modo.

Tendremos, por tanto, que el estado fundamental tendrá una energía cero y los estados excitados forman un espectro discreto uniforme con separación entre estados, que será $\hbar\omega$.

Lo siguiente será pasar de un único oscilador al conjunto del sólido. Recordando los capítulos de estadística cuántica (16 y 17), podemos escribir que, en equilibrio térmico, la energía media será

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n e^{-(\varepsilon_n/k_B T)}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-(\varepsilon_n/k_B T)}}$$

donde el factor

$$e^{-(\varepsilon_n/k_B T)}$$

es el factor de Boltzmann, que nos da la probabilidad de que el estado de energía ε_n esté ocupado. La expresión anterior se puede escribir también como

$$\bar{\varepsilon} = -\frac{\partial}{\partial(1/k_B T)} \ln \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-(\varepsilon_n/k_B T)} \right]$$

teniendo en cuenta que

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega$$

y sustituyendo el valor de ε_n , se tiene que la suma dentro del logaritmo se convierte en una serie geométrica. Sumando la serie y derivando se tiene, finalmente,

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

que es la misma expresión propuesta por Planck en la radiación del cuerpo negro (véanse los capítulos 1 y 2).

Ahora es muy fácil calcular la energía total del sólido. Si tomamos un mol del material, tendríamos que la energía total por mol se puede escribir como

$$E = 3N_A \frac{\hbar\omega_E}{e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1}$$

donde hemos tenido en cuenta los tres posibles grados de libertad de cada átomo, y donde ω_E se conoce con el nombre de frecuencia de Einstein, y es el valor de la frecuencia común de los osciladores. El calor específico se puede obtener inmediatamente derivando la expresión anterior de la energía respecto de la temperatura, y resulta

$$C = 3R \left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{(\hbar \omega_E / k_B T)}}{(e^{\hbar \omega_E / k_B T} - 1)^2}$$

Esta expresión está de acuerdo, al menos cualitativamente, con los resultados experimentales. Se puede comprobar fácilmente (véase problema 29.4) que, a altas temperaturas, C tiende a un valor constante, mientras que a 0 K tiende a cero. De todas formas, no conviene olvidar que se trata de una primera aproximación, ya que el modelo de Einstein considera que cada átomo oscila independientemente uno del otro, lo cual no es cierto. En los sólidos, los átomos no oscilan independientemente unos de otros. La teoría de Debye del calor específico tiene en cuenta este aspecto.

Si además de considerar los átomos vibrando como osciladores armónicos suponemos que no actúan independientemente unos de otros, estamos en el marco de la teoría de Debye. Para calcular el calor específico de la red tenemos que ser capaces de escribir una expresión de la energía para este conjunto de osciladores armónicos acoplados. El movimiento de un átomo en el sólido afecta al movimiento de todos los demás. Hay que considerar el movimiento de la red cristalina como un todo, esto es, tenemos que considerar los modos colectivos de la red, es decir, los fonones. Tenemos una primera diferencia con el modelo de Einstein: en este modelo suponíamos una única frecuencia, ω_E , mientras que ahora tenemos diferentes modos de vibración, diferentes longitudes de onda, diferentes energías y diferentes frecuencias, desde un límite inferior, que es $\omega = 0$, hasta un límite superior (recordar las líneas anteriores donde se definía la frecuencia de Debye), que es $\omega = \omega_D$. Cada modo de vibración es equivalente a un oscilador armónico cuya energía media viene dada por la expresión

$$\bar{\epsilon} = \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \quad [29.3.1]$$

En este punto conviene hacer un inciso para insistir en un tema ya señalado, pero importante. La «partícula» que porta la unidad de energía ($\hbar \omega$) en un modo particular es un fonón, partículas que se mueven a la velocidad del sonido en ese medio y que, dado que la energía por fonón es $\hbar \omega$ y que la energía media de los fonones en el modo que estamos considerando viene dada por la expresión [29.3.1], el número medio de fonones que existen en equilibrio térmico en el modo será

$$n = \frac{1}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1}$$

expresión que está escrita unas líneas más arriba, pero que conviene repetir en este contexto.

Para calcular la energía total del sólido tenemos que ser capaces de sumar la energía de todos los modos posibles, y para ello debemos poder conocer el número de modos que pueden existir. Contar el número total de modos no es siempre sencillo; depende de muchas cosas, entre ellas de la propia estructura de la red cristalina, de sus bordes o fronteras (condiciones de contorno en lenguaje más matemático), etc. Existe un camino sencillo para abordar este tipo de problemas, que es el de contar en un intervalo elemental y luego sumar todos los intervalos elementales. En este caso, sería contar modos incluidos en un intervalo elemental de frecuencias $d\omega$. Llamamos $g(\omega) d\omega$ al número de modos que existen en el intervalo de frecuencias comprendido entre ω y $\omega + d\omega$, siendo, por tanto, $g(\omega)$ la expresión de la densidad de estados fonónicos. Por definición de intervalo elemental, la energía de cada uno de estos posibles modos es

$$\bar{\epsilon}(\omega) \quad [29.3.2]$$

por tanto, la energía elemental total en ese intervalo elemental será

$$dE = \bar{\epsilon}(\omega)g(\omega) d\omega$$

Si sumamos todas las energías elementales, tendremos al final

$$E = \int \bar{\epsilon}(\omega)g(\omega) d\omega \quad [29.3.3]$$

y la capacidad calorífica tendrá como expresión

$$C = \frac{\partial E}{\partial T}$$

Para poder escribir una expresión explícita de la capacidad calorífica necesitamos, como se ve, la expresión explícita de la densidad de estados fonónicos. Escribir una u otra expresión para $g(\omega)$ depende del modelo utilizado. En el modelo de Debye que estamos considerando se tiene que la red vibra casi como un medio continuo, y entonces es muy fácil encontrar una expresión para $g(\omega)$ (véase problema 29.5), teniéndose entonces para la expresión de la capacidad calorífica (véase problema 29.6).

$$C = 9R \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

donde R y θ_D tienen el significado anteriormente mencionado, y se ve claramente la dependencia con T^3 que nos predice el experimento.

En realidad, este modelo se ajusta muy bien cuando estamos considerando sólo longitudes de onda largas, esto es, modos de baja frecuencia (baja temperatura); pero cuando se acorta la longitud de onda y se tienen efectos ligados al carácter discreto de la red, el modelo de Debye empieza a fallar. Debemos, necesariamente, volver a la expresión general

[29.3.2]. La teoría exacta del calor específico necesita saber exactamente $g(\omega)$ y calcular luego numéricamente la integral. Para conocer exactamente la densidad de estados fonónicos, lo mejor de todo es medirlos. Pasaremos a describir (29.4), entre otras muchas cosas, cómo se puede hacer esto.

29.4. DIFRACCIÓN EN UNA RED CRISTALINA

Una gran cantidad de información sobre los sólidos se puede extraer de experimentos de difracción realizados sobre la red cristalina con diferentes sondas. Una red cristalina perfecta actúa como una rejilla de difracción para un gran número de sondas.

Brevemente, vamos a discutir los tipos de sondas que se pueden utilizar y la información que se obtiene del experimento.

Previamente, necesitamos estudiar, aunque sólo sea por encima, la dispersión de una onda que interacciona con un cristal. Como veremos, la estructura cristalina produce unas leyes de conservación con unas características muy peculiares. Asimismo, este estudio nos va a permitir introducir uno de los conceptos más útiles en la física del estado sólido: la red recíproca.

La dualidad onda-corpúsculo produce automáticamente difracción en una escala observable, siempre que el tamaño del objeto sea comparable con la longitud de onda de la radiación incidente. Si la longitud de onda es mucho más pequeña que el tamaño del objeto, tenemos que la dispersión seguirá las leyes de la óptica geométrica; si, por el contrario, la longitud de onda es mucho mayor que el tamaño del objeto, tendremos dispersión independiente del ángulo de dispersión, dispersión en nuestro caso, cuando se tiene como objeto una red cristalina. Por lo pronto, la naturaleza periódica tridimensional de un cristal hace que éste actúe como una red de difracción y nos concentre la radiación difractada en direcciones específicas. Exactamente igual que en el fenómeno de la difracción clásica en óptica, la separación en ángulo de los máximos de difracción está relacionada con la periodicidad de la rejilla de difracción, en este caso los planos cristalinos.

En resumen, estamos interesados tan sólo en aquellos agentes, aquellas sondas, que sean del tamaño adecuado, es decir, cuyas longitudes de onda sean del orden del parámetro de red, del espaciado de la red cristalina, que es del orden de unos pocos Å; por ejemplo, en el sistema periódico, a presión y temperatura ambiente, la distancia entre los átomos más próximos (próximos vecinos en la red) puede variar entre 4.35 Å para el Ba, y 1.54 Å para el C.

A continuación vamos a revisar brevemente cuáles pueden ser estas sondas. Empezaremos por la radiación electromagnética. Si recorremos el espectro electromagnético, desde los rayos γ (0.01 Å) hasta las ondas de radio (10^{10} Å), son los rayos X los que reúnen la condición de ser una sonda adecuada, de poder ver los detalles de la red cristalina. Los rayos X tienen longitudes de onda alrededor de 0.1 Å (rayos X duros), hasta alrededor de 10 Å (rayos X blandos), mientras que, por ejemplo, la luz visible está en unos pocos miles de Å, es decir, haciendo incidir luz visible sobre un sólido (longitud de onda de la sonda mucho mayor que el objeto) tendríamos dispersión óptica ordinaria, reflexión y refracción.

Los rayos X interactúan con la nube electrónica de los átomos, teniéndose (véase problema 29.7) que la longitud de onda λ viene dada por la expresión

$$\lambda(\text{\AA}) = \frac{12,4}{\varepsilon(\text{keV})}$$

donde ε es la energía de los rayos X incidentes.

Los fotones, en el rango de energía de los rayos X dentro del espectro electromagnético, son generados por la desaceleración de electrones utilizando como blanco metales; además, en este blanco se producen excitaciones inelásticas de los electrones internos. El primer proceso da lugar a un espectro de radiación ancho y continuo, sin estructura. El segundo efecto nos produce, superpuesto a este espectro, máximos estrechos en la intensidad para longitudes de onda bien determinadas; por ejemplo, si se utiliza un blanco de Cu, aparece un máximo muy intenso para $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$, mientras que un blanco de Mo tiene la longitud de onda de los rayos X emitidos en 0.709 \AA .

Otro tipo de sonda que se puede utilizar para estudiar la materia estaría constituida por electrones que inciden sobre el sólido con la adecuada energía, tal que tuvieran longitudes de onda del orden del parámetro de la red (véase de nuevo el problema 29.7).

La utilización de electrones de energía adecuada, como sondas para estudiar efectos en sólidos, constituye la técnica de la microscopía electrónica de transmisión. El problema que tienen estos microscopios, que entre otros tipos de aplicaciones tienen la de estudiar la difracción que se produce en un cristal exactamente igual que con rayos X, es que al ser los electrones partículas cargadas penetran muy poco en la materia, y, por tanto, sólo pueden ser utilizados en estudio de superficies o de lámina muy delgadas.

Finalmente, otra sonda de gran importancia en el estudio de los sólidos son los neutrones térmicos. Los neutrones (véanse los capítulos 34 hasta 38 y el apéndice L) no tienen carga eléctrica, por lo que penetran sin dificultad en la materia, siendo su interacción primaria con el núcleo. Aunque sea de pasada, ya veremos más adelante que los neutrones tienen otros tipos de interacción además de la nuclear. Se remite de nuevo al lector al ejercicio 29.7 para el cálculo de la energía del haz de neutrones incidente necesaria para que se produzca la difracción por la red cristalina. Como se puede comprobar, esta energía es la de los llamados neutrones térmicos, que son precisamente los que se obtienen en una pila atómica en un proceso normal de fisión.

Existen, además de éstas, otras técnicas que permiten el estudio de la materia mediante el envío de radiación y el estudio de la radiación dispersada por esa materia. Quizá, la más importante es la radiación sincrotrón; desgraciadamente, lo único que podemos hacer es mencionarla.

Volviendo al caso general de la difracción por rayos X, el siguiente paso que vamos a dar es el estudio breve de las condiciones de difracción.

Supongamos un cristal arbitrario, representado en la figura 29.2. Elegimos el punto 0 dentro del cristal como origen, y sea \mathbf{k}_0 el vector de onda de la radiación incidente. Como resultado de la interacción, cada punto de cristal se puede considerar como el origen de una onda esférica. La amplitud de estas ondas esféricas podemos suponer que es función del punto, dentro del cristal, donde ha sido elásticamente dispersada la onda plana de la

radiación incidente. Llamemos a esta función $D(r)$. Estamos interesados en encontrar una expresión para la amplitud dispersada con vector de onda k' . A distancias grandes del cristal (véase figura 29.2), la diferencia de fase entre ondas dispersadas en la dirección de k' , desde el origen O y desde un punto arbitrario P , es

$$rk_0 - rk' = rk \quad [29.4.1]$$

donde k es el llamado vector de dispersión, y teniendo en cuenta el teorema del coseno

$$\begin{aligned} k^2 &= k_0^2 + k'^2 - 2k_0k' \cos \varphi = 2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 - 2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \cos \varphi = 2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 (1 - \cos \varphi) = \\ &= 2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \left[1 - \left(1 - 2 \operatorname{sen}^2 \frac{\varphi}{2}\right)\right] = 2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \left[2 \operatorname{sen}^2 \frac{\varphi}{2}\right] \\ k &= k_0 - k' = \frac{4\pi}{\lambda} \operatorname{sen} \frac{\varphi}{2} \end{aligned}$$

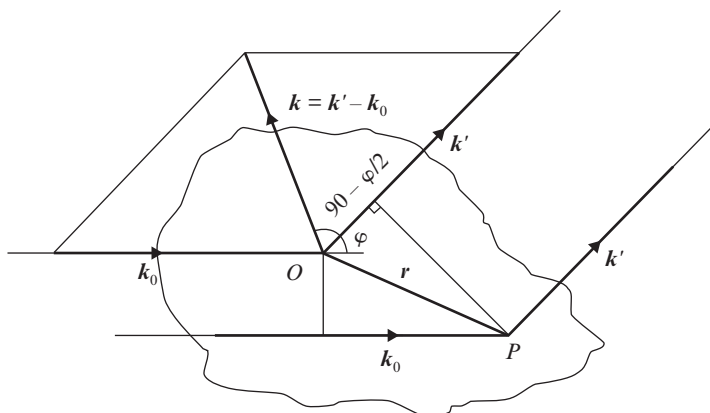


Figura 29.2. Relación entre los vectores de onda incidentes y dispersados en un cristal.

Así, se tiene que, si consideramos un volumen elemental del cristal alrededor del origen, $d\tau$, y otro volumen elemental alrededor del punto P , $d\tau'$, tendremos que las amplitudes de dispersión que llegan al mismo punto alejado del cristal F serán, respectivamente,

$$A_0 D(0) d\tau$$

para el volumen elemental del origen, y

$$A_0 D(r) e^{ikr} d\tau' \quad [29.4.2]$$

para el volumen elemental del punto P .

Pasemos ahora al caso de tener una red cristalina, y supongamos que en cada vértice del paralelepípedo de vectores \mathbf{a} , \mathbf{b} y \mathbf{c} hay un centro dispersor puntual con amplitud de dispersión S . Se tiene entonces que la intensidad total que llega al punto F será una suma de los módulos al cuadrado de las amplitudes de dispersión producidas en cada punto de la red; ahora, los puntos de la red vienen dados por

$$\mathbf{r} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}$$

donde n_1 , n_2 y n_3 son enteros. Si suponemos que el paralelepípedo tiene N_1 , N_2 y N_3 celdas en las direcciones \mathbf{a} , \mathbf{b} y \mathbf{c} , la intensidad de la dispersión con vector de dispersión \mathbf{k} vendrá dada por

$$I = \left| \sum_{n_1=0}^{N_1} \sum_{n_2=0}^{N_2} \sum_{n_3=0}^{N_3} S e^{ik(n_1\mathbf{a}+n_2\mathbf{b}+n_3\mathbf{c})} \right|^2 = S^2 \left| \sum_{n_1=0}^{N_1} e^{ikn_1\mathbf{a}} \right|^2 \left| \sum_{n_2=0}^{N_2} e^{ikn_2\mathbf{b}} \right|^2 \left| \sum_{n_3=0}^{N_3} e^{ikn_3\mathbf{c}} \right|^2$$

donde cada uno de éstos términos es el cuadrado de la suma de una progresión geométrica cuyo primer término es

$$\left| \frac{(1 - e^{iN_1\mathbf{k}\mathbf{a}})}{1 - e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}} \right|^2 = \frac{1 - \cos(N_1\mathbf{k}\mathbf{a})}{1 \cos(\mathbf{k}\mathbf{a})} = \frac{\text{sen}^2\left(\frac{1}{2}N_1\mathbf{k}\mathbf{a}\right)}{\text{sen}^2\left(\frac{1}{2}\mathbf{k}\mathbf{a}\right)} \quad [29.4.3]$$

Este término tiene un valor máximo cuando

$$\frac{1}{2}\mathbf{k}\mathbf{a} = m\pi$$

donde m es un entero, y este primer término tiende a cero cuando

$$\frac{1}{2}\mathbf{k}\mathbf{a} = \left(m + \frac{1}{N_1}\right)\pi$$

siendo de nuevo m un entero. Tenemos, por tanto, unas claras condiciones de máximo y mínimo en la intensidad dispersada. Vamos a explotar un poco más este hecho. Si estudiamos con cuidado la ecuación anterior [29.4.3], veríamos que existen varios máximos subsidiarios entre los máximos principales; es muy fácil demostrar que, en el caso de un cristal real, aunque sea muy pequeño, la altura de estos máximos secundarios es despreciable frente a los máximos principales. Podemos, por tanto, decir que la intensidad total es cero, salvo que se tenga simultáneamente que

$$\mathbf{k}\mathbf{a} = 2\pi h$$

$$\mathbf{k}\mathbf{b} = 2\pi k$$

$$\mathbf{k}\mathbf{c} = 2\pi l$$

donde h , k , l son números enteros.

En este punto conviene hacer un alto para introducir un concepto muy importante en física del estado sólido, que es el de red recíproca.

La condición para dispersión no nula que acabamos de mencionar se podría también escribir suponiendo que \mathbf{k} es un vector de una nueva red, la red recíproca, que se define por unos vectores base que vienen dados por la siguiente relación:

$$\mathbf{a}^* = \frac{1}{V_c} (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) \quad , \quad \mathbf{b}^* = \frac{1}{V_c} (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \quad , \quad \mathbf{c}^* = \frac{1}{V_c} (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$$

donde $V_c = \mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c})$ es, precisamente, el volumen de la celda unidad. Tenemos que los vectores de la nueva red vendrán dados por la relación

$$\mathbf{G} = 2\pi n_1 \mathbf{a}^* + 2\pi n_2 \mathbf{b}^* + 2\pi n_3 \mathbf{c}^*$$

donde n_1, n_2 y n_3 son tres enteros. Por tanto, la condición de máximo de la intensidad de dispersión, es decir, los valores de \mathbf{k} para los que se tiene el máximo de dispersión, se pueden escribir ahora como

$$\mathbf{k} = 2\pi(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*)$$

Tenemos, entonces, un resultado muy importante, que es el que da pleno significado a la red recíproca: los vectores \mathbf{k} , para los cuales se tiene dispersión no nula por una red real, son precisamente los radios vectores de los puntos que definen la red recíproca asociada con la red real (también llamada red directa).

La red recíproca tiene algunas propiedades importantes, que pasamos a enunciar sin demostrar:

1. Cada vector de la red recíproca es normal a una serie de planos de la red directa.
2. El volumen de la celda unidad de la red recíproca es

$$\frac{8\pi^3}{V_c} \quad [29.4.4]$$

donde V_c es el volumen de la celda unidad de la red directa.

3. La red directa es la recíproca de la red recíproca.
4. La celda de Wigner-Seitz en el espacio recíproco se denomina primera zona de Brillouin y, como veremos en el capítulo siguiente, su papel es fundamental.
5. Los vectores base de la red recíproca y de la directa cumplen las siguientes igualdades:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}\mathbf{a}^* &= \mathbf{b}\mathbf{b}^* = \mathbf{c}\mathbf{c}^* = 1 \\ \mathbf{a}\mathbf{b}^* &= \mathbf{b}\mathbf{c}^* = \mathbf{c}\mathbf{a}^* = \mathbf{b}\mathbf{a}^* = \mathbf{c}\mathbf{b}^* = \mathbf{a}\mathbf{c}^* = 0 \end{aligned}$$

6. Recordando la expresión [29.4.2], la amplitud de dispersión en un cristal con vector de dispersión \mathbf{k} viene dada por

$$A(\mathbf{k}) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} D(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\tau'$$

donde la integral es una integral de volumen sobre el espacio real. Si recordamos la transformada de Fourier, se tiene que el espacio real y el recíproco están relacionados por una transformada de Fourier; se tiene, pues, que se puede escribir

$$D(\mathbf{k}) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} A(\mathbf{k})e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\tau_k$$

donde ahora la integral de volumen lo es en el espacio recíproco.

Volviendo ahora a nuestro problema de las leyes de la dispersión de rayos X por un cristal, tenemos (véase figura 29.3) una serie de planos cristalográficos separados una distancia d ; sea \mathbf{s} un vector perpendicular a los planos; sean h, k y l los índices de Miller de los planos, y \mathbf{a}, \mathbf{b} y \mathbf{c} los vectores base de la red directa, se puede escribir

$$\frac{\mathbf{a} \times \mathbf{s}}{h} = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{s}}{k} = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{s}}{l} = |\mathbf{s}|d$$

Ahora podemos escribir el vector \mathbf{s} como un vector de la red recíproca, y quedará:

$$\mathbf{s} = x\mathbf{a}^* + y\mathbf{b}^* + z\mathbf{c}^*$$

Recordando el punto 5 de las propiedades de los vectores de la red recíproca, la ecuación anterior se puede escribir como

$$\frac{x}{h} = \frac{y}{k} = \frac{z}{l} = |\mathbf{s}|d \quad [29.4.5]$$

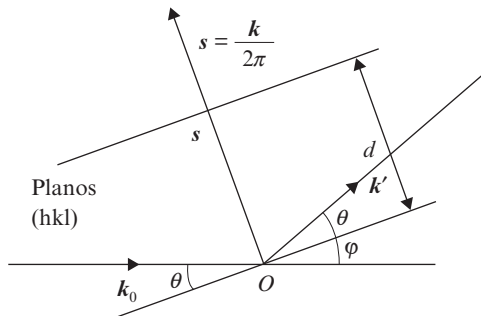


Figura 29.3. Condiciones geométricas de la ley de Bragg.

Entre todos los vectores s posibles podemos elegir el de componentes $x = h$, $y = k$, $z = l$; por tanto, el vector s es el vector de la red recíproca

$$s = ha^* + kb^* + lc^*$$

La condición de máximo en la intensidad de difracción para este vector de la red recíproca es

$$k = 2\pi s$$

Con esta ecuación y la ecuación [29.4.1] podemos escribir, teniendo en cuenta que $\theta = \varphi/2$,

$$k = 2\pi s \quad ; \quad 2\pi s = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta$$

que, combinada con la expresión [29.4.5], resulta

$$\lambda = 2d \sin \theta \tag{29.4.6}$$

donde λ es la longitud de onda de los rayos X incidentes, θ es el ángulo de incidencia de los rayos X, y d es el espaciado interplanar en el cristal. Esta expresión, conocida con el nombre de ley de Bragg, es fundamental para conocer la celda unidad de la red. Si somos capaces de medir los ángulos de incidencia para los cuales se produce una interferencia constructiva en el haz dispersado, y, por tanto, un máximo en la intensidad difractada, se puede averiguar la distancia de los planos que forman la red, es decir, el tipo de red. La difracción de rayos X por un cristal también nos permite, estudiando la intensidad de los máximos difractados, no sólo su posición, saber el tipo de átomos que se encuentran en la red. No tenemos espacio en esta sección para entrar en más detalles.

En el caso en que la sonda utilizada sean neutrones, además de la información sobre el tipo de red cristalina se tiene información sobre otro tipo de efectos.

En principio, los rayos X interaccionan con la nube electrónica de los átomos, mientras que los neutrones, que no tienen carga eléctrica, interaccionan con el núcleo, siendo la información que se extrae de los máximos de difracción exactamente la misma que en el caso de rayos X. Ahora bien, los neutrones tienen momento magnético, y son una de las fuentes más importantes para estudiar microscópicamente el orden magnético. Como veremos en el capítulo 32, existen materiales que, por debajo de cierta temperatura, sus momentos magnéticos se ordenan espontáneamente, sin necesidad de aplicar un campo magnético exterior. Esta red magnética se puede estudiar con neutrones. Los momentos magnéticos de la red, si están ordenados, producen una ley de Bragg cuando la sonda que se introduce en el material es portadora de momento magnético, como es el caso de los neutrones.

Una ley de Bragg se produce cuando se dan unas condiciones muy precisas. Quizá merezca la pena que comentemos un poco más la expresión [29.4.6]. Si nos damos cuenta,

dicha expresión está indicando un hecho transcendental: se tiene difracción cuando la diferencia entre los vectores de onda incidente y dispersado es, precisamente, un vector de la red recíproca. Es decir, se tiene interferencia constructiva cuando la dispersión es coherente. Esto es, repitiendo la expresión anterior [29.4.1]:

$$\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}' = \mathbf{G} = \mathbf{k}$$

donde \mathbf{k}_0 , \mathbf{k}' son los vectores de onda de los fotones incidente y dispersado, y \mathbf{G} es un vector de la red recíproca.

Por otro lado, se tiene que si multiplicamos esta expresión por \hbar , se tiene

$$\hbar\mathbf{k}_0 - \hbar\mathbf{k}' = \hbar\mathbf{G}$$

donde $\hbar\mathbf{k}_0$ es el momento del fotón (en el caso de ser rayos X), o bien el del neutrón. Se puede ver esta expresión como una ley de conservación de momentos. Teniendo siempre en cuenta que esto es un mero abuso de lenguaje, porque $\hbar\mathbf{G}$ no añade ningún significado físico nuevo, es tan sólo un vector de la red recíproca multiplicado por una constante. La característica fundamental de un sólido, que consiste en la periodicidad y simetría del «soporte» en el que se asientan y se mueven las excitaciones y partículas, se pone de manifiesto de una manera permanente. Desgraciadamente, como va a ser habitual en éste y en los siguientes capítulos, no podemos adentrarnos en la riqueza de contenido y significados que las reflexiones de Bragg tienen. Otro aspecto fundamental de las reflexiones de Bragg es que se trata de dispersión elástica (difracción), es decir, se conserva la energía del haz incidente y del dispersado. Resumiendo, la ley de Bragg lleva consigo que se tenga dispersión

$$\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}' = \mathbf{G} \quad \text{coherente}$$

$$|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}'| \quad \text{elástica}$$

En el caso en que no se tuviera la condición de elasticidad en la interacción con fotones de rayos X, resultaría muy difícil de observar físicamente, dado que se tienen fotones de energía un millón de veces superior a la energía media del sólido (recordar ejercicio 29.3). La energía que puede intercambiar con la red un fotón de rayos X es una millonésima parte de la energía del propio fotón, algo inapreciable.

Un caso bien distinto es la dispersión de neutrones. En este caso, además de la dispersión elástica y coherente (ley de Bragg) se pueden medir dispersiones inelásticas y también incoherentes. Empezaremos por estas últimas. Para entender qué es una dispersión incoherente, lo mejor es recurrir a un caso real. Supongamos que hacemos un experimento de difracción de neutrones en un cristal de ThD_2 . Lo que experimentalmente se observa es (representando en el eje Y la intensidad del haz de neutrones difractado y en el eje X ángulos) unos máximos de difracción para unos ángulos determinados (dispersión elástica y coherente). Si ahora repetimos el experimento para un cristal de ThH_2 , lo que se observa experimentalmente es que aumenta mucho el fondo continuo o fondo

difuso; es decir, se tiene, además de los máximos de difracción para algunos ángulos determinados, un aumento general de la intensidad de los neutrones dispersados, más o menos independiente del ángulo de dispersión (véase figura 29.4). El origen de este fondo continuo es la dispersión incoherente elástica, que existe en el cristal de ThH_2 y que no existe en el de ThD_2 . Esta dispersión es debida a lo siguiente: la única diferencia entre estos dos cristales es que en un caso tenemos hidrógeno y en el otro tenemos deuterio. El núcleo de deuterio no tiene espín nuclear, mientras que el protón del núcleo del hidrógeno sí lo tiene; existe, por tanto, además de la interacción neutrón-núcleo, una interacción momento magnético del neutrón-momento magnético del nucleón (en el hidrógeno). Ahora bien, los momentos magnéticos de los núcleos de hidrógeno no están orientados en una dirección, no están correlacionados y están totalmente al azar; por tanto, la dispersión a la que dan lugar es una dispersión en la que los neutrones que salen lo hacen sin cumplir la condición

$$k_0 - k' = G$$

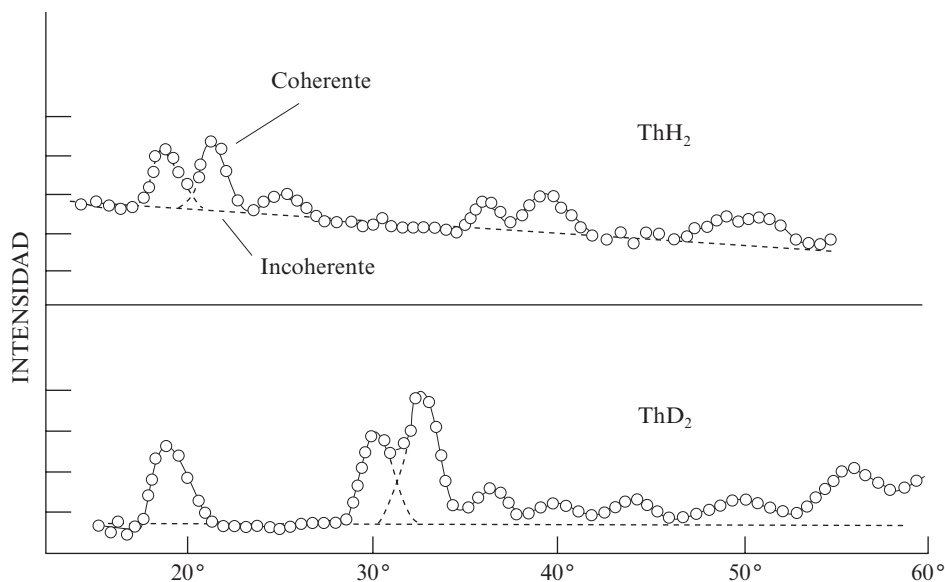


Figura 29.4. Difracción de neutrones para los compuestos ThH_2 y ThD_2 .

Resumiendo, tenemos que la dispersión elástica incoherente viene dada por un aumento de la contribución al fondo difuso, y viene caracterizada por

$$|k_0| = |k'| \quad \text{elástica}$$

$$k_0 - k' \neq G \quad \text{incoherente}$$

Veamos ahora las situaciones en que la dispersión es inelástica. Supongamos que el cristal está a una cierta temperatura, por ejemplo, a temperatura ambiente (300 K); la energía térmica es del orden de $k_B T = 0.02$ eV. Recordando que los neutrones que llegan tienen energías de ese mismo orden, se puede esperar que en el caso de neutrones sea fácil medir procesos inelásticos.

Que el cristal esté a una cierta temperatura T quiere decir que existe un número determinado de fonones con la energía $\hbar\omega(q)$. Un proceso inelástico será aquel en que los neutrones incidentes y los dispersados tienen distinta energía, y eso es debido a la absorción o emisión de un fonón. La ley de conservación de la energía viene dada por

$$\hbar\omega = \hbar\omega_0 \pm \hbar\omega(q)$$

donde $\hbar\omega$ y $\hbar\omega_0$ son las energías de los neutrones, y donde el signo + corresponde a la absorción y el - a la emisión. Los procesos inelásticos pueden involucrar un solo fonón, o ser más complicados y poner en juego más de un fonón. Dentro de la dispersión inelástica tenemos de nuevo dos posibilidades: coherente o incoherente. La información que se obtiene de estas dos dispersiones es sumamente importante, y la vamos a discutir brevemente.

Por lo pronto, hay que señalar que el problema de la medida de la energía de los neutrones y el ángulo con el que salen de la muestra está resuelto experimentalmente con diversas técnicas, como pueden ser, por ejemplo, la de tiempo de vuelo del neutrón desde la muestra hasta el detector. Si estudiamos la dispersión inelástica coherente, estaremos observando propiedades colectivas, fenómenos coherentes de los fonones, es decir, podemos obtener información experimental acerca de la relación de dispersión de los fonones, esto es, la relación entre el número de onda del fonón y su energía, mientras que si lo que estamos estudiando son relaciones inelásticas incoherentes, es decir, medimos la energía de neutrones en dispersión incoherente, esto es, fonones con número de onda que no tiene información sobre los vectores de onda de la red recíproca, estaremos acumulando información sobre fonones individuales y, por tanto, podemos extraer otra importante función que es la densidad de estados fonónicos, es decir, el número de fonones que existen por cada intervalo de energías. Experimentalmente, se sabe cómo separar la dispersión inelástica coherente (relación de dispersión de los fonones) de la dispersión inelástica incoherente (densidad de estados fonónicos).

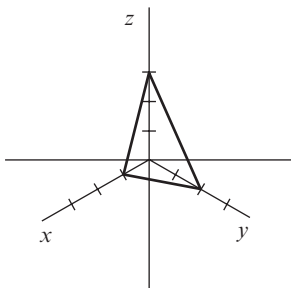
Como vemos, la información que se puede obtener de los estudios de dispersión en sólidos permite obtener datos experimentales básicos del mismo, desde su estructura cristalina hasta sus estados vibracionales (fonones). No hay que olvidar que estos efectos inelásticos también se pueden estudiar con rayos X; el problema es que, en este caso, se tienen dificultades experimentales añadidas.

Finalmente, tan sólo a título de curiosidad, hay que decir que, por supuesto, también se puede estudiar la interacción fonón-fotón cuando los fotones están en el rango del visible. La energía involucrada hace que solamente intervengan fonones de longitud de onda grande (véase problema 29.9). Existen dos tipos de dispersión (Raman y Brillouin), dependiendo del tipo de fonones que intervienen: cuando los fonones son ópticos, tenemos dispersión Brillouin; cuando son acústicos, tenemos dispersión Raman.

EJERCICIOS

29.1. Calcular el orden de magnitud de la longitud de onda de un electrón en un metal y compararla con la distancia entre próximos vecinos, típica en un sólido, sabiendo que en el metal, la energía cinética por partícula es del orden de 7×10^{-12} erg, y que la distancia interatómica es del orden, como mucho, de 3 Å.

29.2. Calcular los índices de Miller del plano de la figura.



29.3. Suponiendo que un átomo se puede asimilar a un oscilador armónico en tres dimensiones, calcular la energía por mol de una sustancia.

29.4. Calcular los límites para alta y baja temperatura de la expresión del calor específico según la teoría de Einstein.

29.5. Calcular la expresión de la densidad de estados fonónicos $g(\omega) d\omega$ para el modelo de Debye.

29.6. Calcular la expresión de la capacidad calorífica en el modelo de Debye.

29.7. Calcular la longitud de onda de un neutrón, de un electrón y de rayos X cuyas energías son, respectivamente, 0.03 eV, 100 eV y 20 keV.

29.8. Calcular los ángulos para los que se producen los tres primeros órdenes de difracción cuando se hacen incidir rayos X de longitud de onda 1.54 Å sobre planos cristalinos separados entre sí 2.1 Å.

29.9. Sabiendo que la zona de Brillouin tiene un radio del orden de 10^8 cm⁻¹, averiguar, dentro de la zona de Brillouin, las longitudes de onda de los fonones que pueden interactuar con fotones de 5000 Å (visible).

29.10. Dibujar las direcciones de índices de Miller $\langle 111 \rangle$ y los planos (001), (011) y (010) en un cubo.

29.11. Cuando, en una red cúbica, los átomos están ocupando los vértices del cubo y, además, los centros de cada cara del cubo, la red se conoce con el nombre de cúbica centrada en las caras. Determinar el número de átomos en una celda unidad de un cristal cúbico centrado en las caras.

30

Electrones en sólidos

José Luis Vicent

30.1. ELECTRONES EN LA RED CRISTALINA: TEOREMA DE BLOCH Y TEORÍA DE BANDAS

El capítulo anterior se ha dedicado a estudiar el armazón, la estructura de un sólido, destacándose una de las propiedades fundamentales: un cristal está formado por la repetición periódica de una estructura elemental. Las propiedades de simetría y periodicidad de los cristales son la base de las leyes que gobiernan su comportamiento.

En este capítulo, una vez que se tiene una idea de lo que es un cristal, se van a estudiar las leyes que rigen el comportamiento de los electrones que pertenecen a dicho cristal. En realidad, se trata de estudiar las energías y las funciones de onda de electrones que están situados en una estructura formada por potenciales periódicos, aunque existen situaciones donde podemos prescindir de la existencia de tal potencial periódico y encontrar, en primera aproximación, información muy útil acerca del comportamiento de los electrones en sólidos (aproximación de los electrones libres). Esta aproximación la utilizaremos en este capítulo, con indicación expresa de que lo estamos haciendo (sección 30.2), y también de una manera más amplia en el capítulo siguiente. Esta aproximación, aunque parece muy tosca, consigue explicar muchas de las propiedades de los electrones externos en los metales. Asimismo, introduce algunos parámetros clave en física del estado sólido. Pero en esta sección se va a considerar que los electrones externos están bajo la influencia de un potencial periódico producido por los iones que ocupan posiciones determinadas en la red cristalina.

Como veíamos en el capítulo anterior, la aparición de las propiedades de simetría de la red da lugar a una gran cantidad de novedades, como, por ejemplo, leyes de conservación, donde aparece explícitamente la periodicidad de la red, a través de un vector de la red recíproca. En el caso que nos ocupa, funciones de onda y energías, de nuevo nos encontraremos con novedades fundamentales inducidas por el carácter periódico de la energía potencial de la red. La periodicidad de la red es la clave para poder encontrar leyes en un sólido.

Empezaremos analizando las implicaciones de la periodicidad del potencial que ve un electrón en un cristal estudiando su influencia sobre las autofunciones de onda de ese electrón. La primera demostración del teorema que en su momento enunciaremos se debe a Floquet (véase ejercicio 30.1), que lo demostró para el caso irreal de una dimensión, mientras que fue Félix Bloch, primer discípulo de Heisenberg, quien demostró en

general este teorema. Debido a ello, se conoce el teorema como teorema de Bloch, y las autofunciones de un electrón en un cristal se conocen como funciones de Bloch. A continuación pasaremos a enunciarlo, demostrarlo y, más importante todavía, a discutir algunas consecuencias que tiene este teorema, que es fundamental en física del estado sólido.

Teorema de Bloch: las funciones de onda de un electrón en un cristal se pueden escribir como funciones de onda planas, multiplicadas por una función periódica cuyo período es el período de la red

$$\phi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r}) \quad [30.1.1]$$

donde n se llama, por motivos que veremos más adelante, índice de la banda, k es el número de onda y

$$u_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{nk}(\mathbf{r})$$

para todos los vectores \mathbf{R} de la red.

Teniendo esto en cuenta, podemos escribir también las funciones de Bloch como

$$\phi_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \phi_{nk}(\mathbf{r}) \quad [30.1.2]$$

Existen muchas demostraciones del teorema de Bloch. La que a continuación se desarrolla, siguiendo a Ashcroft y Mermin (véase bibliografía al principio), está basada en argumentos generales de la mecánica cuántica.

Sea $f(\mathbf{r})$ una función cualquiera. Definimos un operador traslación como aquel que actúa de la siguiente forma sobre la función

$$Tf(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

es decir, nos traslada el vector de posición con un vector de la red directa.

El hamiltoniano que estamos considerando es de la forma

$$H\phi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \phi = E\phi$$

donde el término potencial es un término periódico tal que

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

Aprovechando esta periodicidad del hamiltoniano, podemos escribir:

$$TH\phi = H(\mathbf{r} + \mathbf{R})\phi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = H(\mathbf{r})\phi(\mathbf{R} + \mathbf{r}) = HT\phi$$

En este punto consideremos brevemente algunas propiedades de este operador traslación. Tenemos

$$T_R T_{R'} \phi(\mathbf{r}) = T_{R'} T_R \phi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r} + \mathbf{R} + \mathbf{R}') \quad [30.1.3]$$

$$T_R T_{R'} = T_{R'} T_R = T_{R+R'}$$

En realidad, estamos diciendo que estos dos operadores, el operador traslación y el operador hamiltoniano, conmutan (véase el capítulo 7); por tanto, forman un conjunto completo de observables, es decir, los autoestados del hamiltoniano se pueden elegir de tal manera que sean simultáneamente autoestados de los operadores de traslación, esto es, las funciones propias serán

$$H\phi = E\phi$$

$$T\phi = c(\mathbf{R})\phi$$

donde llamamos $c(\mathbf{R})$ a los autovalores de los operadores traslación. Teniendo en cuenta la expresión [30.1.3], se tiene que los autovalores $c(\mathbf{R})$ están relacionados por

$$T_{R'} T_R \phi = c(\mathbf{R}) T_{R'} \phi = c(\mathbf{R}) c(\mathbf{R}') \phi$$

equivalente a

$$T_{R'} T_R \phi = T_{R+R'} \phi = c(\mathbf{R} + \mathbf{R}') \phi$$

Por tanto, los autovalores $c(\mathbf{R})$ tienen que satisfacer

$$c(\mathbf{R} + \mathbf{R}') = c(\mathbf{R}) c(\mathbf{R}') \quad [30.1.4]$$

Sean \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 los tres vectores unitarios de la red. Tenemos que

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

donde n_1 , n_2 y n_3 son números enteros.

Los autovalores de un vector cualquiera $c(\mathbf{R})$ de la red, aplicando [30.1.4], se pueden escribir en función de los valores propios de los vectores unitarios como

$$c(\mathbf{R}) = c(\mathbf{a}_1)^{n_1} c(\mathbf{a}_2)^{n_2} c(\mathbf{a}_3)^{n_3} \quad [30.1.5]$$

En el caso de que los vectores de la red sean uno de los vectores unitarios base, podemos escribir siempre los autovalores como

$$c(\mathbf{a}_i) = e^{2\pi i x_i} \quad [30.1.6]$$

Finalmente, [30.1.5] se puede escribir como

$$c(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}$$

donde

$$\mathbf{k} = x_1\mathbf{b}_1 + x_2\mathbf{b}_2 + x_3\mathbf{b}_3$$

donde \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 y \mathbf{b}_3 son vectores base de la red recíproca. Por tanto, tenemos que \mathbf{k} es un vector del espacio recíproco y \mathbf{k} es un vector de onda (recordar la sección 29.4 del capítulo anterior).

Finalmente, para cada vector de la red directa, podemos escribir

$$T_{\mathbf{R}}\phi = \phi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = c(\mathbf{R})\phi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\phi(\mathbf{r})$$

Ésta es precisamente la expresión del teorema de Bloch que hemos escrito unas líneas más arriba (expresión [30.1.2]).

Pero más importante todavía que ser capaces de escribir la función propia de un electrón en un cristal, son las consecuencias que se derivan de la propia forma de la autofunción. A continuación, vamos a resumir brevemente algunas de estas consecuencias.

En primer lugar, se observa que las funciones de onda, que definen los estados de los electrones de los orbitales externos de los átomos que constituyen el sólido, son ondas planas, ondas no localizadas, ondas itinerantes: cuya amplitud está modulada, está modificada, por una función que es periódica a todo lo largo de la red cristalina; esta función de modulación es, además, la misma para cada celda del cristal.

Otro aspecto importante que hay que destacar es que en el teorema de Bloch aparece un vector \mathbf{k} que es el vector de onda del electrón. Se ha introducido, de una manera natural, un número cuántico que tiene su origen en la simetría traslacional del potencial periódico que nos define el cristal y que, en algunas ocasiones —en realidad las más interesantes—, tiene el papel análogo al del momento del electrón libre. Tener presente la influencia de la red en el comportamiento de \mathbf{k} se pone de manifiesto con la importantísima propiedad de que el vector de onda \mathbf{k} siempre se puede reducir a un vector \mathbf{k} dentro de la primera zona de Brillouin del espacio recíproco. Este resultado fundamental reduce el estudio de un sólido al estudio de su primera zona de Brillouin. En la primera zona de Brillouin está contenida toda la información necesaria para estudiar el sólido. Esto es muy fácil comprobarlo. Suponemos que \mathbf{k} no es un vector que esté dentro de la primera zona de Brillouin; entonces, si \mathbf{G} es un vector de la red recíproca, siempre podemos escribir

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{G} \quad [30.1.7]$$

donde \mathbf{k}' se elige tal que sí esté dentro de la primera zona de Brillouin, y, como para cualquier vector de la red recíproca, tenemos que (véase ejercicio 30.3)

$$e^{i\mathbf{G}\mathbf{R}} = 1$$

Que la expresión [30.1.2] se cumple para \mathbf{k} fuera de la primera zona, automáticamente significa que se cumple para \mathbf{k}' dentro de la primera zona de Brillouin, estando \mathbf{k} y \mathbf{k}' relacionados por un vector de la red recíproca (expresión [30.1.7]) (véase figura 30.1).

Ligado a este aspecto, es interesante conocer el número posible de valores de \mathbf{k} permitidos en la primera zona. Este número se puede calcular utilizando un teorema que pasaremos a enunciar sin demostrarlo. El teorema dice: el número de valores permitidos dentro de la primera zona de Brillouin es igual al número de celdas unidad que tenga el cristal.

Otro punto importante que se puede deducir del teorema de Bloch es que introduce otro número cuántico, el número n , que aparece en la expresión [30.1.1].

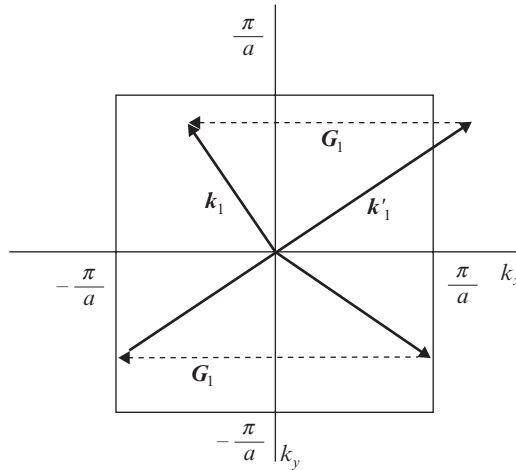


Figura 30.1. Esquema del cumplimiento de la expresión [30.1.7] para la primera zona de Brillouin de una red cuadrada.

Vamos brevemente a discutir el importante significado de este número n . Sea

$$\phi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}u(\mathbf{r})$$

la solución de la ecuación de Schrödinger, donde \mathbf{k} es fijo y $u(\mathbf{r})$ tiene la periodicidad de la red. El valor de esta función $u(\mathbf{r})$ será la solución de la correspondiente ecuación de Schrödinger, que es

$$H_k u_k(\mathbf{r}) = \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{i} \nabla + \bar{\mathbf{k}} \right)^2 + V(\mathbf{r}) \right] u_k(\mathbf{r}) = E_k u_k(\mathbf{r}) \quad [30.1.8]$$

con la condición

$$u_k(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

Un hecho importante es que, en la ecuación [30.1.8], aparece explícitamente k y, por tanto, las autofunciones como los autovalores de energía dependen de k , algo que ya se ha tenido en cuenta utilizando k como subíndice en las autofunciones. Tenemos una familia de ecuaciones [30.1.8]. Una ecuación para cada valor permitido de k . Si nos fijamos en los autovalores de la energía, solución de las ecuaciones [30.1.8], se tiene que para cada valor de k existe un conjunto grande, pero discreto, de soluciones para la energía, de valores propios de la energía, que serán $E_1(k)$, $E_2(k)$, $E_3(k)$, etc. Dado que estas energías dependen de k , varían de una manera continua según se va variando el valor de k (véase la figura 30.2). Como se ve, se tienen zonas donde existen valores permitidos de energía separadas por zonas con valores prohibidos de energía; estas últimas se llaman zanjas de energía, mientras que las primeras se llaman bandas de energía. El número cuántico n nos sirve para identificar la banda de energía donde estamos trabajando.

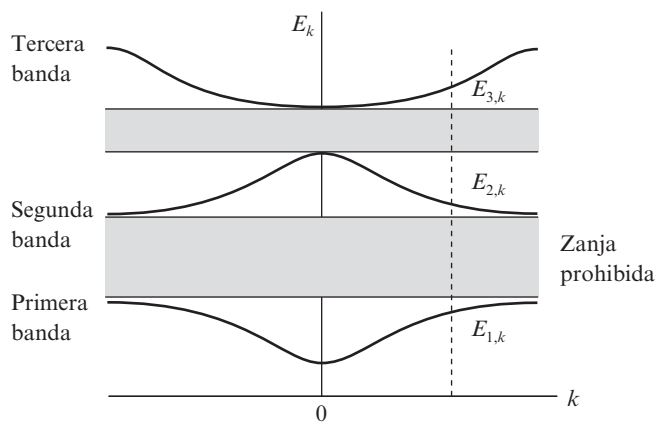


Figura 30.2. Diagrama de bandas de energía y de zanjas prohibidas de energía.

Mientras que en un átomo aislado los valores permitidos de energía se sitúan en niveles discretos de energía, cuando se unen varios átomos para formar un sólido, esos niveles discretos dan lugar a bandas continuas de energía. En esas bandas, entre dos valores dados de energía, llamados el fondo y el borde de la banda, existe un continuo de valores permitidos. Los niveles de energía son el origen de las bandas de energía; se puede ver que el ancho de la banda (diferenciada en energía entre el fondo y el borde) aumenta cuando el nivel es un nivel externo: por ejemplo, las cinco bandas $3d$ (bandas que provienen de los cinco posibles niveles de energía $3d$) son mucho más anchas que las tres bandas $2p$. Los electrones que están en las bandas $3d$ son mucho menos localizados que los electrones que están en las bandas $2p$.

En realidad, en un sólido existe un número de bandas posibles realmente infinito, pero solamente las de más baja energía están ocupadas por electrones. Dependiendo del número de electrones que tengamos, así tendremos más o menos bandas ocupadas. Se llama banda de valencia a la banda de más alta energía que tiene electrones; la última banda ocupada es la banda de valencia.

Un tema interesante es conocer el número posible de orbitales que puede haber en una banda dentro de la primera zona de Brillouin. Sabemos que la función de Bloch de un electrón viene dada por ϕ_{nk} , donde n indica la banda y k el orbital o estado del electrón en esa banda. Recordando el teorema que hemos enunciado unas líneas más arriba, tenemos que el número de orbitales posibles, dentro de la primera zona de Brillouin, es igual al número de celdas unidad que existen en el cristal. Teniendo en cuenta que en cada celda de Wigner-Seitz tenemos un solo átomo, si existen N átomos en el cristal, el número de estados posibles en una sola banda es $2N$, recordando que por cada orbital podemos tener dos electrones (con espines opuestos).

Este resultado, como veremos unas líneas más abajo, es fundamental para poder clasificar los sólidos en metales, aislantes, etc.

Antes de abordar este tema acerca de la clasificación de los sólidos según la teoría de bandas, necesitamos decir algunas palabras acerca de las zanjadas de energía prohibida que separan las bandas. Se puede intentar bosquejar el origen de estas zanjadas sin hacer ningún cálculo explícito. La idea principal es que las zanjadas de energía deben su existencia a que los electrones se mueven en un potencial periódico. Como veremos en la sección siguiente, si suponemos que no existe potencial en el cristal, eso lleva consigo que no aparezcan zanjadas de energía; esto es lo que se llama el modelo de los electrones libres. Si calculamos la energía de un electrón en un sólido en la aproximación de los electrones libres, es decir, sin que exista potencial, para un valor de k precisamente en la frontera de la primera zona de Brillouin nos encontramos con que la energía será

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad [30.1.9]$$

la forma parabólica esperada para electrones libres.

Ahora bien, si hacemos el mismo cálculo, pero en la aproximación que estamos considerando en toda la sección (aproximación de los electrones casi-libres), es decir, con un potencial periódico, y recordando que el borde de la celda de Wigner-Seitz está situado a mitad de distancia entre dos átomos —y es allí donde se produce la dispersión más intensa de los electrones por los iones—, se puede demostrar que, para el valor de k en el borde de la zona existen dos soluciones para la energía del electrón: una de ellas con un valor menor que la energía del electrón libre, expresión [30.1.9], y la otra con un valor de energía superior a la energía del electrón libre (véase figura 30.3). Cada una de estas energías corresponde al borde y al fondo de dos bandas contiguas. Resumiendo, las zanjadas de energía en la relación de dispersión $E(\mathbf{k})$ se abren en las fronteras de la zona de Brillouin. Hay que destacar que la aparición de zonas prohibidas de energía en los sólidos está ligada a la propia estructura del sólido, que determina la geometría de la zona de Brillouin. Como veremos en el capítulo 33, existe otro tipo de zanjadas que aparecen en un sólido, pero por motivos distintos y con características distintas: la zanja superconductor.

En el apéndice H se estudiará en detalle, haciendo el cálculo pertinente, la teoría de bandas para el caso teórico e irreal de una cadena lineal de átomos.

Uno de los tópicos más complicados en la teoría del estado sólido es el cálculo de las bandas de un sólido. Existen varios métodos basados en distintos tipos de aproximaciones.

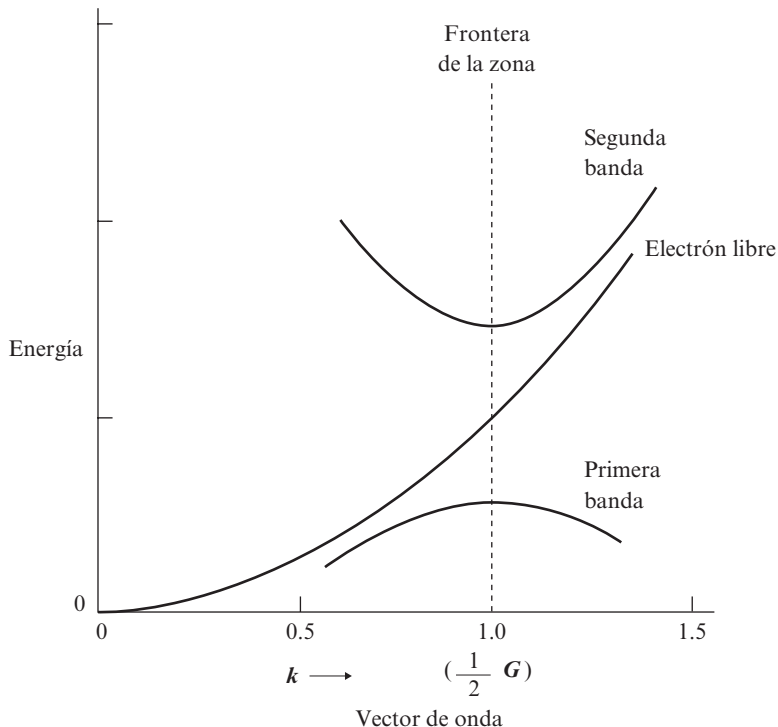


Figura 30.3. Relación de dispersión para la frontera de la zona de Brillouin para la primera y la segunda bandas de comparación con la relación de dispersión para electrones libres (aparición de la zanja prohibida de energía).

En realidad, lo que a nosotros nos interesa es la teoría de bandas, que es una forma de estudiar un sólido muy útil, como veremos a continuación.

En primer lugar, la teoría de bandas permite clasificar, muy fácilmente, los sólidos en aislantes o metales. Cuando la última banda con estados ocupados, la banda de valencia, está completamente llena y la zanja de energía que separa esta banda de la siguiente desocupada es del orden de 2 eV, entonces tenemos un aislante, porque los electrones no tienen estados accesibles cuando se le aplica al sólido un campo eléctrico. En realidad, lo que ocurre es que la corriente neta total, considerada toda la banda, en una banda llena es nula. En cambio, cuando la banda de valencia no está completamente llena se tiene que un campo eléctrico aplicado produce una corriente, con una velocidad neta de los electrones de conducción, conocida con el nombre de velocidad de arrastre. Dado lo que hemos dicho unas líneas más arriba sobre el número de orbitales posibles en una banda, un elemento cuya última capa tiene un número impar de electrones dará lugar siempre a un metal cuando esté en estado sólido. En cambio, un número par de electrones en la última capa del elemento da lugar a una última banda completamente llena y, por tanto, a un aislante. Como todo, esta drástica regla hay que matizarla; porque, en

primer lugar, en muchos casos existe el efecto de solapamiento o hibridización entre distintas bandas ocupadas, dando lugar, por ejemplo, a que no se pueda hablar de banda de valencia de tipo estrictamente s , puede que en algunas situaciones esté mezclada con bandas de tipo p .

Resumiendo, la ocupación de las bandas de valencia nos indica si tenemos un metal o un aislante. En el caso de tener un metal la banda de valencia se suele denominar banda de conducción.

Anteriormente hemos indicado un valor, meramente estimativo (2 eV), del valor de la zanja de energía entre la última banda ocupada (valencia) y la siguiente. Existe una situación muy importante que es cuando la zanja de energía entre el borde de la banda de valencia (llena) y el fondo de la banda siguiente es pequeño, del orden del eV o un poco más. En este caso, a temperaturas muy bajas, el sólido se comporta como un aislante, pero si vamos aumentando la temperatura, puede ocurrir que la propia energía térmica sea suficiente para que los electrones de la banda de valencia salten la zanja de energía y pasen a llenar estados en la banda siguiente, banda desocupada que empieza a actuar como banda de conducción. Se tiene lo que se conoce como un semiconductor. Cuanto más alta sea la temperatura mejor conducirá el material, ya que podremos bombear más electrones a la banda superior. Este comportamiento es precisamente el opuesto al de un metal; en un metal, experimentalmente, se tiene que cuanto más alta es la temperatura peor conductor es.

Existe un último grupo de sólidos, muy poco numeroso, en los cuales, para algunos puntos del espacio k , para algunos valores de k , la zanja de energía entre la banda de valencia y la siguiente banda desocupada vale cero; en estos sólidos existen puntos donde no existe zanja. Estos materiales se conocen con el nombre de semimetales. Finalmente, como ejemplos de elementos que responden a estos distintos comportamientos, podemos citar, como ejemplo de metal, el Na; de aislante, el C; de semiconductor, el Si, y de semimetal, el Bi.

30.2. ALGUNOS CONCEPTOS BÁSICOS: SUPERFICIES DE FERMI, MASAS EFECTIVAS Y HUECOS

Por un momento vamos a olvidarnos de la situación en que nos hemos movido en la sección anterior, donde hemos estudiado los electrones en un cristal, esto es, electrones que están bajo la influencia de un potencial periódico. Es lo que se llama la aproximación de los electrones casi-libres. A continuación se va a considerar un cristal en su mínima expresión. Vamos a estimar los electrones como electrones libres y el único potencial que existe es el que evita que los electrones «salgan» fuera de los bordes reales del cristal macroscópico. Ésta es la aproximación que se conoce con el nombre de electrones libres, donde lo único que hay que tener en cuenta es el principio de exclusión de Pauli.

En lo que sigue vamos a tratar en realidad de un gas de electrones libres a temperatura de 0 K. Recordando el capítulo 17, estamos tratando con un gas de fermiones. Si queremos calcular la energía de ese gas de fermiones, tenemos que proceder de la siguiente forma. Lo primero que se necesita es resolver la ecuación de Schrödinger sin energía po-

tencial. Repitiendo un cálculo ya realizado, se tiene, en principio, que obligar a las funciones de onda solución de esta ecuación de Schrödinger a permanecer dentro del cristal. Es decir, necesitamos, de entrada, definir unas condiciones de contorno y una forma del cristal. En cuanto a la forma del cristal, si las longitudes de onda de los electrones son pequeñas, como es el caso en la realidad, comparadas con el tamaño del cristal, se puede elegir la forma del cristal como nos plazca. La forma más sencilla es un paralelepípedo rectangular de aristas L_x , L_y y L_z . Otro aspecto previo es determinar las condiciones de contorno de estas funciones de onda solución de la ecuación de Schrödinger. Una condición frontera evidente es exigir a las funciones de onda del electrón que se anulen en las superficies del cristal; esta condición da una solución con unas funciones de onda del tipo

$$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{L_x L_y L_z}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L_x} \operatorname{sen} \frac{m\pi y}{L_y} \operatorname{sen} \frac{p\pi z}{L_z}$$

Otras posibles condiciones de contorno son las mencionadas en capítulos anteriores, condiciones de contorno cíclicas (Born-von Karman), donde las funciones de onda son las mismas en dos caras opuestas del paralelepípedo, esto es

$$\phi(x + L_x, y, z) = \phi(x, y, z)$$

$$\phi(x, y + L_y, z) = \phi(x, y, z)$$

$$\phi(x, y, z + L_z) = \phi(x, y, z)$$

Con estas condiciones es fácil comprobar que las soluciones son de la forma

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(L_x L_y L_z)^{1/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

donde, siendo n_x , n_y y n_z números enteros, se tiene

$$k_x L_x = 2\pi n_x$$

$$k_y L_y = 2\pi n_y$$

$$k_z L_z = 2\pi n_z$$

donde los vectores \mathbf{k} nos dan los vértices de una red de paralelepípedos cuya malla tiene como aristas $2\pi/L_x$, $2\pi/L_y$, $2\pi/L_z$.

Cada vértice de esta red representa un estado posible, un orbital para un fermión. En cada vértice en el espacio de las \mathbf{k} podemos situar dos electrones con espines opuestos. El volumen de la celda en el espacio de las \mathbf{k} es, recordar 29.4.4

$$\frac{(2\pi)^3}{L_x L_y L_z}$$

y, por tanto, la densidad será

$$\frac{V}{(2\pi)^3}$$

Pasando ahora a los valores de la energía, sabemos que la energía de estos fermiones es

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

A 0 K, los fermiones van ocupando los niveles de energía hasta un cierto nivel máximo, que depende del número de electrones que tengamos. Este nivel máximo tienen una energía que se conoce con el nombre de energía de Fermi, cuya importancia en la física de estado sólido es fundamental. Repitiendo la definición: se llama energía de Fermi a la energía máxima que tienen los fermiones en un gas de fermiones a 0 K.

En el espacio de vectores \mathbf{k} todos los estados están ocupados en el interior de una esfera de radio k_F , que se llama esfera de Fermi, y k_F , vector de onda de Fermi, o con un ligero abuso de lenguaje, momento de Fermi. La energía de Fermi vendrá dada por

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

donde el vector de onda de Fermi se puede calcular. Sea N el número total de fermiones, entonces

$$N = 2 \int \frac{V}{(2\pi)^3} d^3 \mathbf{k}$$

que resulta

$$N = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 = \frac{V k_F^3}{3\pi^2}$$

Este resultado también nos permite calcular el número de fermiones por unidad de volumen, que es

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

Finalmente, tenemos que la energía de los fermiones más energéticos, esto es la energía de Fermi, será

$$E_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2m}$$

Todo esto está calculado para 0 K, y en la aproximación de los electrones libres, sin potencial, ¿qué es lo que ocurre si levantamos estas dos restricciones? Por lo pronto, la energía de Fermi es del orden de unos pocos eV, 1, 2, 3 eV, mientras que si pasamos de 0 K a temperatura ambiente (300 K) la energía térmica aportada es de 0.02 eV, lo que quiere decir que el efecto de la temperatura lo único que produce es un emborronamiento en la superficie de Fermi, que deja de estar nítidamente definida. Pasamos (recordar el capítulo 16) a la función de distribución de Fermi-Dirac, donde el papel principal lo desempeña el potencial químico. La energía de Fermi es el potencial químico a 0 K.

Por otro lado, si pasamos al caso real de tener un potencial periódico actuando, lo que ocurre es que la superficie de Fermi deja de ser una esfera y se deforma, pudiendo tener formas muy complicadas. En el capítulo 32 se representa en parte la superficie de Fermi del Fe. Conocer la topología de la superficie de Fermi es fundamental para poder entender el comportamiento de los elementos metálicos. En la sección 31.5 se indica el fundamento de los métodos experimentales para determinar la topología de la superficie de Fermi.

Resumiendo, supongamos un metal, esto es, una banda de valencia (en este caso será una banda de conducción) incompleta; el nivel de Fermi, la energía de Fermi, nos separa los estados ocupados de los desocupados.

Otro concepto fundamental en física del estado sólido es el concepto de masa efectiva, que pasaremos a discutir a continuación.

En el capítulo 3 se estudiaba el aspecto ondulatorio de la materia, y, entre otros rasgos, los paquetes de ondas; dentro de este contexto se define la velocidad de grupo en una dimensión como

$$v = \frac{\partial \omega}{\partial k}$$

donde ω es la frecuencia y k el vector de onda. En función de la energía y en tres dimensiones se puede escribir la expresión equivalente

$$v = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(\mathbf{k})$$

Supongamos que tenemos un electrón, descrito por la representación de su paquete de onda, sobre el que actúa una fuerza exterior. La variación de energía producida en ese paquete de onda por la fuerza externa en un período de tiempo Δt será

$$\Delta E = Fv\Delta t = \frac{F}{\hbar} \frac{dE}{dk} \Delta t$$

Podemos escribir también que la variación en energía del paquete de onda es

$$\Delta E = \frac{dE}{dk} \Delta k$$

Igualando estas dos ecuaciones, tenemos la siguiente ecuación de movimiento

$$F = \hbar \frac{dk}{dt}$$

Asimismo, podemos escribir también, teniendo en cuenta estas expresiones, que el ritmo de cambio de la velocidad de grupo debida a la aplicación de la fuerza exterior es

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F$$

Si nos fijamos en esta última ecuación, parece que adopta formalmente una forma newtoniana, fuerza, masa y aceleración. El único problema es que hay que asimilar la masa del paquete de onda a

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad [30.2.1]$$

Desde luego, esto tiene poco que ver con la masa inercial de la partícula libre. Por definición a la inversa de la expresión [30.2.1], se le llama masa efectiva del electrón en un sólido. Esta masa efectiva puede tener valores muy distintos de la masa en reposo del electrón libre (véase, por ejemplo, la sección 31.3 del capítulo siguiente), pero en la ecuación de movimiento tiene el mismo papel. Hay que destacar también que la masa efectiva con la que se mueven los electrones, respondiendo a la acción de un agente externo, depende de $d^2 E/dk^2$, esto es, depende de los detalles de las relaciones de dispersión $E(k)$ de las bandas donde esté el electrón, en concreto depende de la curvatura de las bandas. Por tanto, bandas con relación de dispersión con marcado carácter parabólico (electrones que se comportan casi como si estuvieran libres) tendremos masas efectivas parecidas a la del electrón libre. Por el contrario, bandas de relación de dispersión casi constante, electrones con masas efectivas muy distintas a la del electrón libre. Por otra parte, bandas con curvatura muy acusada se moverán por ellas electrones con masas efectivas pequeñas, electrones ligeros; bandas con curvaturas moderadas, se tendrá electrones con masas efectivas grandes, electrones pesados.

Finalmente, el tercer aspecto básico que se quiere destacar es el concepto de hueco.

Supongamos una banda llena a la que le quitamos un electrón. Si, por ejemplo, aplicamos un campo eléctrico exterior al cristal, el movimiento de los electrones que quedan en la banda es equivalente al movimiento del estado vacío en la dirección en la que k disminuye. Normalmente, los electrones que desaparecen de una banda son electrones que pasan a la banda vacía inmediata superior; por tanto, los estados vacíos se producen en las regiones de energías más altas de la banda de valencia. Si en una banda de valencia desaparece un electrón que estaba en un estado k , decimos que se ha creado un hueco en el estado k . El concepto de hueco es algo más que una definición trivial. Los huecos son una herramienta muy útil para trabajar en física del estado sólido, sobre todo cuando se están estudiando semiconductores y también problemas de conducción en general. Las

propiedades físicas de un hueco son consecuencia de las propiedades de la banda de electrones. Es más fácil estudiar una sola «partícula», el hueco, que estudiar una banda completa a la que le falta un electrón.

Si un electrón de masa efectiva m_e , vector de onda \mathbf{k}_e y energía E_e desaparece de la banda de valencia, el hueco que aparece se comporta como una partícula con las siguientes propiedades:

1. Masa efectiva del hueco:

$$m_h = -m_e$$

(Recordar la definición, unas líneas más arriba, de masa efectiva.)

2. Vector de onda del hueco:

$$\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$$

3. Energía del hueco:

$$E_h = -E_e$$

4. Carga eléctrica del hueco:

$$e_h = -e$$

(Nota: se ha tomado siempre como e la carga del electrón, esto es, $e < 0$. La carga del hueco es positiva.)

Como se puede ver, los huecos son unas entidades muy peculiares, pero muy útiles, ayudan a simplificar una gran cantidad de cálculos. Algunas de las características especiales de los huecos pueden ser, por ejemplo, que en los diagramas normales de energía en función de k , mientras que en un electrón la energía aumenta al movernos en el eje vertical hacia arriba, los huecos, su energía disminuye si nos movemos en esa misma dirección. Esto es, los electrones, podríamos decir, tienden a moverse hacia abajo, mientras que los huecos tienden a moverse hacia arriba en un diagrama $E(k)$. Los huecos tienen mínima energía «flotando», mientras que los electrones la tienen «hundándose».

30.3. SEMICONDUCTORES

La última sección de este capítulo, referido a los electrones en sólidos, se va a dedicar a los semiconductores. El motivo principal es subrayar de una manera explícita la importancia de los semiconductores en la física del estado sólido.

El estudio de los semiconductores, y la tecnología que se ha desarrollado basada en estos materiales, constituyen la base de una enorme cantidad de dispositivos que se utili-

zan en muy diversas actividades en la vida diaria. La investigación básica y aplicada, así como la tecnología y el desarrollo de dispositivos de estado sólido, es, sin duda, actualmente y seguramente por mucho tiempo, uno de los campos más activos relacionados con la física de estado sólido. Diodos, transistores, rectificadores, láseres de semiconductores, células solares, circuitos integrados, microelectrónica en general..., todos estos campos están basados en el buen conocimiento que tiene la física de estado sólido del comportamiento de los semiconductores.

En línea con los temas tratados en las otras secciones de este capítulo, empezaremos por describir la estructura de bandas típica que da lugar a un semiconductor. Recordando que en la sección 30.1 se decía que un semiconductor es un aislante cuya zanja de energía es pequeña, comenzaremos por describir la estructura de las bandas de valencia de un aislante típico, el carbono.

El átomo de carbono tiene la estructura electrónica siguiente: $1s^2 2s^2 2p^2$; tenemos 4 electrones de valencia. El carbono cristaliza en diversas estructuras, grafito y diamante. Vamos a estudiar el carbono en la estructura diamante. Para lo que sigue, no nos interesa en concreto los detalles de esta estructura, lo único importante es que cada celda unidad acomoda dos átomos de C (recordar que hasta este mismo momento siempre hemos considerado un solo átomo en la celda unidad); que existan dos átomos quiere decir que vamos a tener 8 electrones de valencia en cada celda unidad. Por tanto, tendremos las bandas de valencia $2s$ y $2p$ completamente llenas, tenemos una banda s y 3 bandas p completamente llenas, tenemos un aislante.

En la figura 30.4 se representa la estructura de bandas en la primera zona de Brillouin. Para poder entender esta figura hay que tener presente que la representación es sólo parcial. Al hacer una representación de la estructura de bandas, lo que se representa es la relación de dispersión $E(\mathbf{k})$ en la primera zona de Brillouin. Ahora bien, hay que especificar en qué direcciones de la zona de Brillouin se está eligiendo el vector \mathbf{k} para representar $E(\mathbf{k})$ (eje X vector \mathbf{k} , eje Y energía E). Si nos fijamos en el eje X de la figura 30.4, se indica las direcciones mediante índices de Miller (recordar la sección 29.2); también aparece una serie de letras (Γ , X y L). Veamos qué significa todo esto. En principio, las letras nos indican puntos especiales de la zona de Brillouin, puntos que están directamente relacionados con las propiedades de simetría del cristal. En principio, se designa por Γ el centro de la zona de Brillouin, luego Γ es el 0, el origen del espacio recíproco. Entonces, si en el eje X de la figura nos movemos hacia la derecha, estamos siguiendo en el espacio recíproco la dirección $\langle 100 \rangle$ (dirección paralela al eje X) hasta el borde de la zona de Brillouin, intersectando esta zona por el punto X . Si, por el contrario, nos fijamos en el recorrido del vector de onda \mathbf{k} hacia la izquierda del eje X de la figura, estaremos yendo desde el centro de la zona de Brillouin hasta la frontera (punto L), siguiendo la dirección $\langle 111 \rangle$. En cuanto a las letras que aparecen en el eje Y de la figura 30.4, se trata de distinguir las diferentes bandas. Vemos por la figura que, por ejemplo, de las cuatro bandas de valencia (una que proviene de un nivel atómico de tipo s , y tres de niveles atómicos de tipo p) tenemos una degeneración doble en el centro de la zona de Brillouin (punto Γ). Para conocer perfectamente la estructura de bandas habría que hacer un mapa completo, moviéndose por todas las direcciones posibles en la primera zona de Brillouin, pero la figura 30.4 se puede considerar representativa.

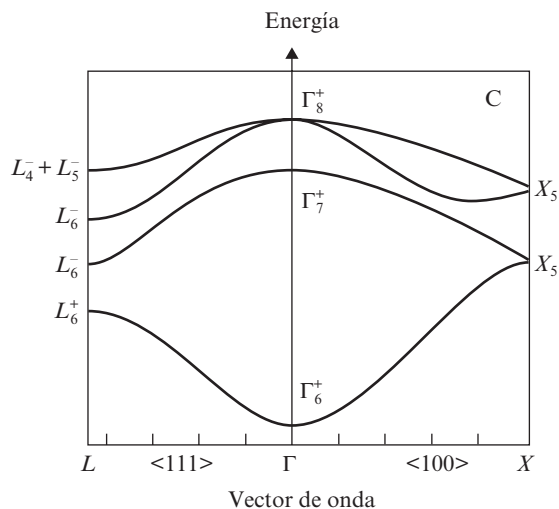


Figura 30.4. Estructura de las últimas bandas de energía en la primera zona de Brillouin para el C.

Estas bandas están, como acabamos de indicar, llenas. Si suponemos que en el cristal existen N celdas unidad, dado que se tienen dos átomos por cada celda, tendremos $2N$ átomos y $8N$ electrones para las cuatro bandas de valencia. En la figura 30.4 también vemos que el borde de la banda de valencia (valor más alto de la energía) está situado para un valor de k en el centro de la zona de Brillouin. Las siguientes bandas, que no están representadas en la figura, están muy alejadas en energía, están desocupadas y la zanja de energía es muy grande; el diamante es un aislante como todo el mundo sabe.

Veamos ahora, en función de lo dicho en estas líneas, la estructura y comportamiento de un semiconductor típico, el Si, elemento que también tiene la estructura del diamante.

El Si tiene las bandas de valencia que provienen de la última capa atómica, que es la $3s^2 3p^2$. Estamos de nuevo en la misma situación que en el C. En la figura 30.5 está representada la estructura de bandas del Si, pero con algunas diferencias respecto a la representación anterior. En principio, se representan las bandas de valencia de más alta energía y, además, las bandas de conducción (desocupadas) de más baja energía, además de indicar el valor en energía de la zanja, es decir, la diferencia entre el borde de la banda de valencia (punto de la banda con energía más alta) y el fondo de la banda de conducción (punto de la banda de conducción con energía más baja). Se ve que es del orden de 1.1 eV. Entonces, cuando estamos a 0 K, el Si es un aislante, se tienen la banda de conducción vacía y la banda de valencia totalmente ocupada. Ahora bien, si empezamos a subir la temperatura, la zanja de energía es lo suficientemente estrecha en algunos puntos que se puede excitar electrones, mediante energía térmica, y sacarlos de la banda de valencia y pasarlos a la banda de conducción, donde tenemos estados desocupados válidos para que se pueda producir corriente eléctrica. En principio, estamos desocupando estados en la banda de valencia, en su borde, y colocándolos en el fondo de la banda de conducción. Es decir, estamos creando electrones de conducción y, al mismo tiempo, huecos, que también contribuirán a

la conducción, como veremos a continuación. Antes vamos a referirnos brevemente a la posibilidad de tener tanto huecos como electrones con distintas masas efectivas, esto es, portadores de carga ligeros y pesados que contribuyen de distinta forma a la conducción. Basta con darse cuenta de que en las bandas de valencia (huecos) tenemos bandas con curvaturas muy diferentes, diferentes masas efectivas, lo mismo se puede decir de las bandas de conducción (electrones). A este tema nos referiremos de nuevo en la sección 31.3.

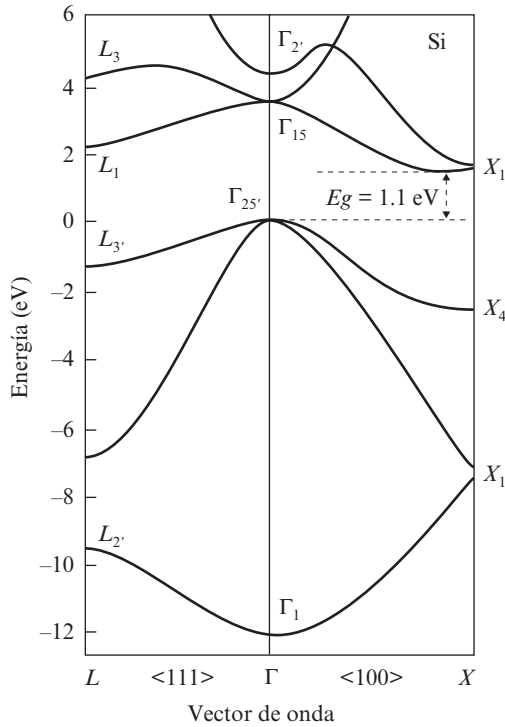


Figura 30.5. Estructura de las últimas bandas de energía en la primera zona de Brillouin para el Si.

A continuación, y como final de esta sección, hablaremos un poco de la conducción en semiconductores. Como acabamos de decir, un semiconductor es un aislante perfecto a 0 K que se convierte en un conductor cuando se empieza a subir la temperatura y, además, conduce cada vez mejor cuanto más alta sea la temperatura, justo lo contrario que en un metal. En un semiconductor, al aumentar la temperatura lo que hacemos es aumentar el número de portadores, es decir, aumentar la corriente, mientras que en un metal, al aumentar la temperatura el número de portadores de corriente no varía, pero sí creamos más fonones, que son los que interaccionando con los electrones de conducción hacen aumentar la resistencia del metal (véase sección 31.2).

En un semiconductor, cada electrón excitado, térmicamente o por cualquier otro tipo de agente excitador, bombeado a la banda de conducción deja atrás de sí un hueco en la

banda de valencia. Por supuesto, el número de huecos y de electrones es el mismo; esto es lo que se llama semiconductor intrínseco. Estos semiconductores tienen una densidad de portadores baja y no son muy útiles tecnológicamente. Existe una forma muy sencilla de aumentar el número de portadores, y es envenenando el semiconductor (dopando el semiconductor, utilizando la palabra ampliamente aceptada en el campo). Envenenar un semiconductor consiste en introducirle un número determinado de impurezas de tal manera que aumente el número de portadores, de huecos o de electrones. Esto es lo que se llama semiconductor extrínseco. Por ejemplo, el Si se puede convertir en un semiconductor extrínseco añadiéndole cantidades pequeñas, impurezas, de otros elementos que estén situados a su derecha o a su izquierda en el sistema periódico. Si en el Si (tetravalente) se introducen impurezas de B (trivalente, a la izquierda de Si en el sistema periódico), estas impurezas pueden aceptar, localizar, un electrón de la banda de valencia del Si creando un hueco en el Si. Por el contrario, si envenenamos el Si con As (a la derecha del Si en el sistema periódico y elemento pentavalente), será muy fácil que pase un electrón localizado en el átomo de As a la banda de conducción del Si, aumentando, por tanto, la densidad de portadores. Las energías necesarias para localizar un electrón en la impureza o que la impureza se desprenda de un electrón son pequeñas, del orden de centésimas de eV.

Los semiconductores extrínsecos formados con impurezas que aumentan el número de electrones en la banda de conducción se llaman de tipo *n*. Los semiconductores extrínsecos que aumentan el número de huecos en la banda de valencia se llaman de tipo *p*.

Un tema a destacar es que las intensidades de corriente debidas a los huecos y a los electrones son aditivas, electrones y huecos tienen densidades de corriente en la misma dirección; el motivo es que el movimiento de los huecos es en dirección opuesta al de los electrones. Basta tener esto en cuenta y las diferencias de signo en las cargas y recordar que la densidad de corriente viene dada por

$$j = nqv$$

donde *q* es la carga, *v* la velocidad y *n* la densidad de portadores; para comprobarlo, en la figura 30.6 se hace un esquema.

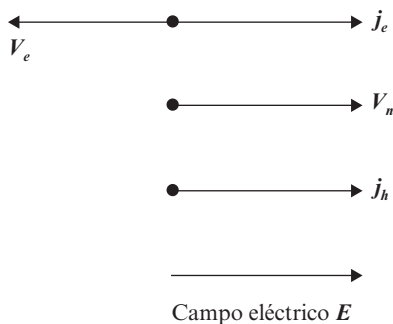


Figura 30.6. Esquema de las velocidades y densidades de corriente para electrones y huecos en un semiconductor.

Hasta aquí una breve introducción al mundo de los semiconductores. El paso siguiente (consultar cualquiera de los libros citados en la bibliografía) sería estudiar, en equilibrio térmico, las concentraciones de huecos y electrones, el nivel de Fermi en semiconductores, etc.

EJERCICIOS

30.1. En un cristal unidimensional de longitud L con N átomos con una distancia entre próximos vecinos a , demostrar la relación de Bloch

$$\psi(x + a) = \exp(2\pi ip/N)\psi(x)$$

donde p es un número entero y $\psi(x)$ la función de onda.

30.2. Calcular las energías de Fermi para los elementos Na, Cu y Al suponiendo que tienen en la banda de conducción por átomo uno, dos y tres electrones, respectivamente.

30.3. En la aproximación de los electrones libres (recordar la sección 30.2) calcular, en función de la energía de Fermi, la energía total de los electrones a 0 K.

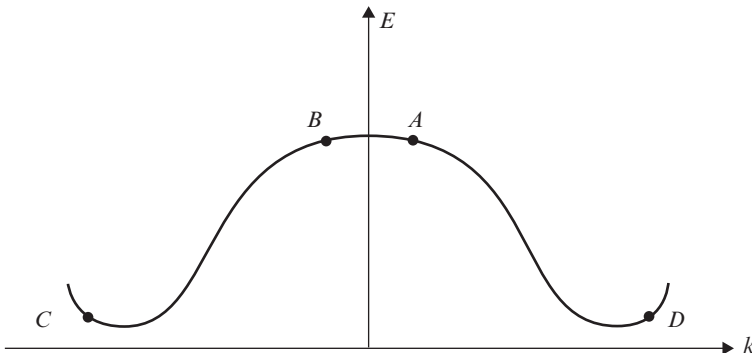
30.4. Demostrar la relación

$$e^{i\mathbf{G}\mathbf{R}} = 1$$

donde \mathbf{R} es un vector de la red directa y \mathbf{G} es un vector de la red recíproca.

30.5. Demostrar que el número de estados k que hay en una banda dentro de la primera zona de Brillouin es igual al número de celdas unidad que hay en el cristal.

30.6. Siendo la forma de la banda en un cristal según el dibujo, *a*) indicar si las masas efectivas son positivas o negativas para electrones situados en los puntos A , B , C y D , y *b*) si se aplica un campo eléctrico en la dirección negativa, indicar la dirección, positiva o negativa de la velocidad de los electrones anteriores.



30.7. Sabiendo que el peso atómico del Si es de 28 g y la densidad es de $2.3 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, calcular el número de átomos de Si que hay en 1 cm^3 . Si se envenena una oblea de Si con 2×10^6 átomos de *B* y 10^{16} átomos de *P*, calcular la concentración de electrones y huecos.

31

Algunos efectos cuánticos en sólidos

José Luis Vicent

31.1. INTRODUCCIÓN

Después de dos capítulos dedicados a algunos aspectos fundamentales de la física del estado sólido, en esta lección se han elegido algunos tópicos en función de la claridad con que aparece el carácter cuántico en los efectos considerados.

Existen numerosas manifestaciones de la Física Cuántica en las propiedades de los sólidos. Aunque el criterio seguido para seleccionar los temas pudiera parecer arbitrario, se han considerado aspectos tan distintos como que el tema se pudiese desarrollar sin necesidad de mucho cálculo y mucho espacio, así como la conveniencia de no centrarse en un solo campo, sino, por el contrario, abarcar varios temas.

La sección 31.2 está dedicada a un tópico fundamental como es la conducción en metales. Aquí lo que hay que destacar es el comportamiento de los sólidos, de la red cristalina perfecta, como un medio casi transparente por el que se mueven e interaccionan una serie de «partículas», de excitaciones.

La sección 31.3 está dedicada a semiconductores. Existe una gran variedad de propiedades y fenómenos que ocurren en semiconductores. Actualmente, la Electrónica Física basada en semiconductores está presente en una enorme variedad de tecnologías; la vida actual sería impensable sin el aprovechamiento de las propiedades cuánticas de los semiconductores. Entre todos los efectos cuánticos en semiconductores, en esta sección se estudian algunos aspectos del llamado efecto Gunn. Este fenómeno nos va a permitir conocer, o al menos «ver», la estructura de bandas de un semiconductor de zanja directa, el AsGa, que cada vez tiene mayor importancia y empieza a sustituir y aventajar a la tecnología actual de semiconductores basada en el Si. También nos va a permitir familiarizarnos con fenómenos curiosos, debidos al balance entre distintos efectos producidos por la peculiar estructura de bandas del AsGa y la aplicación de un intenso campo eléctrico que produce electrones «calientes» y su transferencia entre distintas partes del espacio de momentos.

En la sección 33.4 se discutirá brevemente, sin entrar en detalles, otro efecto de gran importancia, no sólo desde el punto de vista básico, sino también desde el punto de vista de las aplicaciones: el tema de las resonancias magnéticas.

En la sección 33.5 se estudia el efecto que la aplicación de un campo magnético tiene sobre la banda de conducción, pero teniendo tan sólo en cuenta que los electrones de conducción son partículas cargadas, es decir, estudiando únicamente la contribución dia-

magnética sin que el espín de los electrones intervenga. Este estudio nos conduce a la aparición, cuando se tiene un campo magnético aplicado, de niveles en la banda de conducción, llamados niveles de Landau. Otra consecuencia importante de los niveles de Landau es que permiten realizar experimentos para determinar la topología de la superficie de Fermi de un metal que es, como ya se señaló en el capítulo anterior, una de las características más importantes de un metal.

31.2. CONDUCCIÓN EN METALES

La experiencia diaria nos dice que los metales conducen la corriente eléctrica con gran facilidad. Asimismo, si calentamos por un extremo una barra metálica, se tiene el otro extremo también caliente. Existe, por tanto, la evidencia de que los electrones de conducción se mueven con gran facilidad por los metales. En el capítulo anterior (sección 30.1) se ponía de manifiesto que, en un metal, la última banda donde existen estados ocupados no está llena, es decir, se tiene la posibilidad de que los electrones se muevan a estados desocupados con un pequeño aporte de energía. La existencia de estados accesibles de energía es condición necesaria, pero no suficiente. Para que se puedan producir efectos de transporte es preciso, además, que los electrones se puedan mover por el cristal casi libremente. Si se tiene en cuenta la distancia que existe entre los átomos en una red cristalina y el tamaño de cada átomo, se encuentra que los radios atómicos y las distancias entre los átomos son del mismo orden; esto es, los átomos están muy empaquetados cuando forman un sólido (véase ejercicio 31.1). Parece lógico pensar que un electrón que empieza a moverse tenga dificultades para hacerlo y vaya colisionando de un átomo al siguiente y pierda la energía que se le comunicó para moverse. Esto no es lo que ocurre en la realidad: la red cristalina es prácticamente transparente para el movimiento de los electrones, y éste es un efecto debido exclusivamente al carácter cuántico de los electrones.

A continuación, y de una manera muy simplificada, vamos a describir el origen de este efecto.

La ecuación de Schrödinger para un electrón de función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$ es (recordar el capítulo 6 y los siguientes)

$$i\hbar = \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H\psi(\mathbf{r}, t)$$

Los estados estacionarios son las autofunciones o funciones propias de esta ecuación, tales que

$$H\phi_n(\mathbf{r}) = E_n\phi_n(\mathbf{r})$$

donde E_n son los niveles de energía del electrón. Así, para un electrón en un estado estacionario se tiene

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = a_n(t)\phi_n(\mathbf{r})$$

donde $a_n(t)$ se puede interpretar como la amplitud de probabilidad de encontrar al electrón en ϕ_n en el instante t (véase el apéndice B). Se puede escribir

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = E_n a_n \quad [31.2.1]$$

Supongamos ahora que no tenemos un átomo aislado sino que agrupamos varios átomos formando una molécula o un sólido. Entonces hay que tener en cuenta el acoplamiento, la interacción, entre los distintos átomos, de tal forma que la generalización inmediata de la expresión anterior (31.2.1) es (véase ejercicio 31.2)

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_m E_{nm} a_m \quad [31.2.2]$$

Supongamos ahora que lo que tenemos es una red cristalina a la que le añadimos un electrón en el átomo n . Si suponemos que intervienen sólo los próximos vecinos, en la amplitud de probabilidad de encontrar el electrón en el átomo n , podemos escribir la expresión [31.2.2] como

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = E a_n - A a_{n-1} - A a_{n+1}$$

donde E y A son las energías definidas positivas.

Es fácil demostrar que la solución es de la forma

$$a_n \propto \exp i(kx_n - \omega t)$$

donde

$$\hbar\omega = E - A e^{-ika} - A e^{ika} = E - 2A \cos ka \quad [31.2.3]$$

Esta relación de dispersión da una dependencia periódica de ω en función de k con un período de $2\pi/a$, siendo la a la distancia entre próximos vecinos. Se puede comprobar que hacer que intervengan los segundos vecinos y, en general, ir añadiendo más átomos, no modifica esencialmente la dependencia $\omega(k)$, que sigue siendo senoidal con una periodicidad de $2\pi/a$. El resultado que nos interesa destacar es que, al añadir un electrón en un átomo que está en una red cristalina, existe un valor mínimo en la energía. Normalmente, si la energía térmica no es muy grande ($k_B T \ll A$), el electrón estará cerca del valor mínimo (que es $\hbar\omega = E - 2A$). Podemos definir una energía de excitación ε así:

$$\varepsilon = \hbar\omega - (E - 2A) \quad [31.2.4]$$

Sustituyendo la expresión [31.2.3] en la [31.2.4], y haciendo el desarrollo de esta energía de excitación para pequeños valores de k , resulta

$$\varepsilon = Ak^2 a^2$$

que podemos también escribir de forma análoga a la energía de una partícula libre como

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

donde $\hbar^2/2Aa^2$ hace el papel de una masa. Recordando el concepto de masa efectiva (véase sección 30.2), tenemos finalmente

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Podemos concluir, por tanto, que el electrón añadido en la red se mueve con una energía que es formalmente idéntica a la energía cinética de un electrón libre, con la única diferencia de que la masa no es la masa desnuda o masa del electrón libre. Aparece una masa nueva que depende de las características de la red cristalina por la que se mueve el electrón. Resumiendo, los electrones pueden circular por un cristal como partículas libres, pero con masas que dependen de la red cristalina.

Este resultado, aquí sólo esbozado, para electrones se puede generalizar para muchos tipos de excitaciones en un sólido, por ejemplo, para la falta de un electrón, esto es, para el movimiento de un hueco (recordar sección 30.2). En realidad, por una red perfecta puede viajar y propagarse un gran número de «partículas» como si la red fuese transparente. Un sólido está lleno de excitaciones cuánticas que interactúan y se mueven por la red. Tan sólo diremos sus nombres sin entrar en más detalles. En un sólido nos podemos encontrar con fonones, excitones, plasmones, polarones, polaritones, magnones, etc.

El aspecto crucial de todo lo anterior es que, en una red perfecta, la solución que hemos encontrado para un electrón añadido a un átomo (acoplado tan sólo a sus próximos vecinos) es formalmente idéntica a la correspondiente para cualquier grupo de átomos. En realidad, la que tenemos es una colección de ondas planas sin atenuar viajando por la red cristalina.

A continuación vamos a dedicar las próximas líneas a algunos aspectos generales de las teorías más simples de conducción en sólidos.

Empezaremos con un anacronismo (es decir, con una teoría, la de Drude, de 1900, muy anterior al formalismo cuántico) necesario para deducir el comportamiento de un electrón de conducción en una red cristalina. Drude, muy poco después del descubrimiento del electrón (experimento de Rutherford), propone que la conducción en los metales se produce por un conjunto de electrones que se mueven libremente. Esto no es ni más ni menos que la consecuencia inmediata del modelo deducido unas líneas más arriba. Lo que sería la consecuencia lógica del carácter cuántico del electrón está tratado por Drude dentro del marco clásico. Drude propone que las propiedades eléctricas y térmicas de los metales se pueden explicar suponiendo que existe un gas perfecto de electrones libres en equilibrio térmico con la red de iones positivos y no considerando las interacciones electrón-electrón. Lo curioso de este modelo de Drude es que permite extraer expresiones para

la conductividad eléctrica σ y para la conductividad térmica K que cumplen la ley experimental de Wiedemann-Franz (1853)

$$C = \frac{K}{\sigma}$$

donde C es una constante universal que no depende del tipo de metal de que se trate ni de la temperatura. A pesar de este resultado, realmente espectacular, la teoría clásica de Drude no predice los comportamientos correctos con la temperatura de las conductividades térmicas y eléctricas por separado. Hay que modificar las variaciones de σ y K en función de la temperatura predichas por el modelo de Drude, de acuerdo con las teorías cuánticas, y entonces se obtienen variaciones de las conductividades en función de la temperatura que, a grandes rasgos y en algunos intervalos de temperatura, siguen fielmente los comportamientos experimentales.

Aunque no vamos a hacer los cálculos por falta de espacio, sí se puede hacer una discusión cualitativa. La teoría clásica aplicada a un gas perfecto de electrones (Drude) produce una variación de la conductividad con la temperatura, que es

$$\sigma \propto T^{-1/2}$$

Experimentalmente, se tiene un comportamiento en un amplio rango de temperaturas del tipo

$$\sigma \propto T^{-1}$$

En cuanto a la dependencia de la conductividad térmica, se encuentran discrepancias notables con los resultados experimentales. En primer lugar, a temperatura ambiente, los valores teóricos son varios órdenes de magnitud, unas 100 veces, más grandes que los valores experimentales; incluso a temperaturas más bajas, los valores experimentales tienen una disminución drástica, algo que la teoría clásica no prevé en absoluto. La teoría de Drude está construida teniendo en cuenta la distribución de Maxwell-Boltzmann para un gas clásico (recordar el capítulo 17), algo que, como sabemos, es totalmente incorrecto para electrones (fermiones). Como es de esperar, después de lo que acabamos de comentar, el buen ajuste de la ley experimental de Wiedemann-Franz con la teoría de Drude es algo fortuito y se debe a la perfecta cancelación de dos errores del mismo orden, pero de sentidos opuestos (una buena discusión está en las primeras páginas del libro *Solid State Physics*, de N. W. Ashcroft y N. D. Mermin). De todas formas, la idea original de Drude es correcta: se pueden considerar los electrones de conducción como un gas y despreocuparse de la interacción entre ellos. Ahora bien, hay que tener en cuenta que estamos tratando con fermiones. El principio de exclusión de Pauli indica claramente que no todos los electrones de conducción tienen el mismo papel, ni son equivalentes. Solamente una pequeña fracción de electrones de la banda de conducción, los de mayor energía en la banda, contribuyen a la conducción eléctrica y térmica, ya que son los únicos que pueden cambiar su energía.

Por una parte, el recorrido libre medio (distancia que recorre un electrón de conducción entre dos interacciones consecutivas con la red cristalina) es inversamente proporcio-

nal a la amplitud de vibración de los iones que forman la red. Por otra parte esta amplitud de vibración es directamente proporcional a la temperatura. Estos dos resultados producen una dependencia de la resistencia eléctrica, que es

$$R \propto T$$

exactamente la que se observa experimentalmente para un amplio rango de temperaturas.

Antes de seguir avanzando conviene hacer una breve recapitulación y destacar los resultados más importantes de esta sección. Por lo pronto, el título indica que estamos tratando de metales; ahora bien, es muy importante resaltar que la deducción del comportamiento de una red cristalina perfecta como un medio casi transparente para numerosas excitaciones es algo que sucede para todo sólido. Si las excitaciones son electrones (fermiones), necesitamos además otros requisitos (principio de Pauli, etc.), que no son necesarios para, por ejemplo, la propagación e interacciones de fonones (bosones).

Hecha esta puntualización, el resto de esta sección está dedicado a algunos aspectos de la resistividad en metales.

Supongamos un gas de Fermi, esto es, un conjunto de electrones de la banda de conducción; estos electrones están moviéndose al azar, en un movimiento regido por la temperatura a la que está el metal y con la estadística habitual. Lo que interesa resaltar es que de este movimiento al azar no resulta ninguna velocidad neta de los electrones en ninguna dirección. ¿Qué ocurre si aplicamos un campo eléctrico al metal? Entonces se produce un movimiento de los electrones en dirección opuesta a la de aplicación del campo eléctrico y se tiene una velocidad neta. Ahora bien, estos dos movimientos son muy diferentes. Por una parte, la velocidad al azar de los electrones debida a la agitación térmica es del orden de la velocidad de Fermi, que es del orden del millón de metros por segundo. Por otra parte, la velocidad llamada de arrastre, debida a la aplicación de un campo eléctrico, es del orden de 1 cm por segundo. Es como si tuviésemos un enjambre de abejas que se están moviendo totalmente al azar y como locas a gigantescas velocidades y al mismo tiempo todo el enjambre en conjunto se desplaza a velocidades pequeñísimas en una dirección determinada.

Es un hecho experimental que los metales conducen peor si se aumenta la temperatura. Esto es debido a que los electrones, en sus movimientos al azar, interactúan («ven») a los fonones («a las vibraciones de la red») y como resultado cambian su momento, cambian su \mathbf{k} y, por tanto, influyen en el movimiento de todo el conjunto. Existen dos aspectos de esta interacción electrón-fonón. En primer lugar, tenemos la interacción electrón-fonón, digamos normal, que cumple las relaciones de conservación que se señalan a continuación, donde hemos considerado que un electrón que viene con un momento \mathbf{k} después de absorber o emitir un fonón cambia su momento a un valor \mathbf{k}' :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \hbar\omega_q = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}$$

$$\hbar\mathbf{k} \pm \hbar\mathbf{q} = \hbar\mathbf{k}'$$

Dado que el número de fonones con bajo q es muy superior al de los que tienen valores de q grandes para temperaturas bajas, la ley de conservación, escrita unas líneas más arriba, nos conduce a que a baja temperatura los cambios de los momentos de los electrones son pequeños. A temperaturas altas, el número de fonones de q grande es muy superior al de los de q pequeño y, por tanto, en este caso, las variaciones de k al «sufrir» la interacción electrón-fonón son muy superiores a las anteriores. El segundo aspecto que contribuye decisivamente a que un conductor tenga más resistencia al aumentar la temperatura es la aparición de los procesos electrón-fonón, conocidos por la palabra alemana *umklapp* (que se puede interpretar como volteo). Estos procesos son sólo posibles cuando el número de onda q de los fonones es grande y superior a un cierto umbral; por tanto, sólo aparecen a altas temperaturas, contribuyendo a la resistencia a alta temperatura. Estos procesos son complicados y tan sólo señalaremos que no se cumplen las leyes de conservación escritas anteriormente, ya que se tiene transferencia de momento al cristal como un todo.

Otro aspecto interesante es saber cuáles son, en el mar de Fermi, los electrones que intervienen en la conducción eléctrica. Para ello basta con tener en cuenta el orden de magnitud de la energía de Fermi, que es de unos pocos eV, mientras que la diferencia de energías térmicas ($k_B T$) entre 0 K y temperatura ambiente es mucho menor (ya que para $T = 300$ K se tiene $k_B T = 0.02$ eV). Esto quiere decir que sólo los electrones que están en una estrecha franja, del orden de $k_B T$, participan en los procesos de conducción, dispersión electrón-fonón, etc. Si nos olvidamos de los procesos no normales o *umklapp* (que sólo tienen lugar a alta temperatura), todos los aspectos anteriormente señalados están resumidos en la figura 31.1.

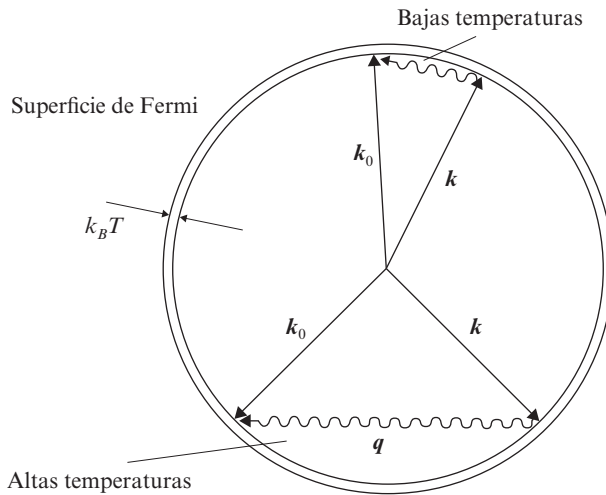


Figura 31.1. Representación gráfica de dispersiones típicas de electrones por fonones.

Finalmente, para no dejar incompleto este aspecto de la resistencia en estado normal en los metales, conviene señalar que no existe una teoría que sea capaz de reproducirnos

el comportamiento experimental de la resistividad en todo el rango de temperaturas, siendo la más adecuada la semifenomenológica de Bloch-Grüneisen. También conviene hacer notar que los fonones, las vibraciones de la red, no son el único origen de la resistividad, y que las impurezas, defectos, etc., pueden dispersar los electrones haciendo que cambie su k ; pero en estos casos no existe dependencia con la temperatura. Esto se resume en la conocida regla de Matthiessen

$$\rho(T) = \rho_i(T) + \rho_r$$

donde ρ_r es la llamada resistividad residual, que no depende de la temperatura y que proviene de los defectos de distinto tipo de la red, mientras que la resistividad ideal, ρ_i , resistividad fonónica, depende de la temperatura y va disminuyendo al disminuir la temperatura. Hay que resaltar que la resistividad residual puede llegar a ser tan importante como la fonónica a la resistividad total, o incluso contribuir más; esto depende del tipo de material de que se trate.

31.3. ELECTRONES «CALIENTES» EN SEMICONDUCTORES

En 1963, J. B. Gunn, experimentalmente, descubre que cuando un campo eléctrico polarizador excede un cierto valor crítico, la corriente en el semiconductor arseniuro de galio (AsGa) fluctúa periódicamente con unas frecuencias en el rango de las microondas. El efecto Gunn está basado en que los electrones de las bandas de conducción y valencia pueden «calentarse» lo suficiente por la aplicación de un campo eléctrico lo bastante intenso como para transferirse de una parte del espacio de momentos a otra y usar las características especiales de la banda, de tal manera que en la conductividad existan fuertes desviaciones de la ley de Ohm, dando lugar a la llamada conductividad diferencial negativa, que consiste en una disminución de la conductividad al aumentar el valor del campo eléctrico aplicado.

Este efecto que hemos bosquejado tiene una gran cantidad de aplicaciones en dispositivos de estado sólido, desde alarmas antirrobo hasta radares de carretera para controlar el tráfico. Está claro que en este libro no interesa explicar cuál es el mecanismo que conduce del efecto Gunn a una alarma antirrobo, pero sí es muy útil comprobar cómo en un mismo compuesto un mismo electrón puede tener masas efectivas muy distintas y por ello moverse de una manera muy diferente, y todo esto debido a la peculiar estructura de bandas del semiconductor. Antes de seguir conviene resaltar que aunque nos centremos en el AsGa, este efecto Gunn también se produce, por ejemplo, en semiconductores como InP o CdTe.

Empezaremos por describir la estructura de bandas (banda de valencia y banda de conducción) del AsGa, que se representa simplificada en la figura 31.2, donde en el eje X se representa el momento y en el eje Y la energía, es decir, estamos representando la relación de dispersión del semiconductor. Existen dos tipos de zanja de energía, la llamada directa y la llamada zanja indirecta. Se llama zanja directa de energía cuando la parte de mayor energía de la banda de valencia (última banda poblada), que se suele llamar borde

de la banda de valencia, está situada justo debajo del borde de la banda de conducción (mínimo de energía de la banda de conducción). Una zanja es indirecta cuando esto no ocurre y se tiene que el borde de la banda de valencia y el borde de la banda de conducción no coinciden para el mismo valor de k . En la figura 31.2 se representa el esquema simplificado del Si (semiconductor con zanja indirecta) y del AsGa (semiconductor con zanja directa).

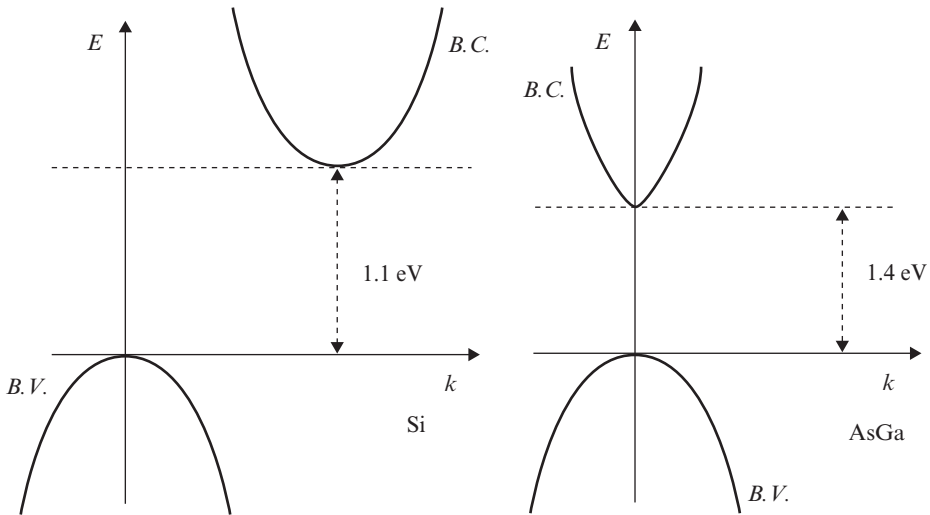


Figura 31.2. Diagrama de las bandas de conducción y valencia en el Si (zanja indirecta) y en el AsGa (zanja directa).

En este punto se puede hacer un inciso para tratar de pasada un tema muy interesante. En un semiconductor de zanja directa se pueden tener transiciones del máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción, sin cambio de momento, con el mismo valor de k , de tal forma que, por ejemplo, un fotón puede llevarse toda la energía puesta en juego en el proceso. Sin embargo, en una transición de un semiconductor de zanja indirecta, entre el punto más alto de la banda de valencia y el punto más bajo de la banda de conducción, para que se conserve el momento tiene que participar alguna otra partícula, que no puede ser otra cosa que un fonón, el cual nos producirá una transición no radiativa. Estas transiciones con emisiones de fotones son las que hacen que con estos semiconductores de zanja directa se fabriquen los LED (*Light Emitting Diode*), dispositivos de estado sólido que hoy en día están presentes, por ejemplo, en las calculadoras de bolsillo y en muchos otros instrumentos digitales.

Si observamos la forma de la estructura de bandas del AsGa (véase figura 31.3), que en esta figura está simplificada y algo idealizada y corresponde a la zona de Brillouin (recordar la sección 30.1), observamos que en la banda de conducción se tiene mínimos de energía localizados en el centro de la zona y en los bordes. Estos mínimos se suelen denominar «valles», y en este caso tenemos un valle principal y dos secundarios. El valle

principal tiene menor radio de curvatura que los dos secundarios, lo cual quiere decir que los electrones que estén situados en este valle principal son más ligeros, tienen menor masa efectiva, que los que estén localizados en los valles secundarios. En la figura están representados los valores de las masas efectivas, siendo m_0 la masa del electrón libre. Conviene volver a insistir en que el esquema de la figura 31.3 es un tanto simple; por ejemplo, el valle principal en AsGa no es estrictamente parabólico y su forma correcta vienen dada por

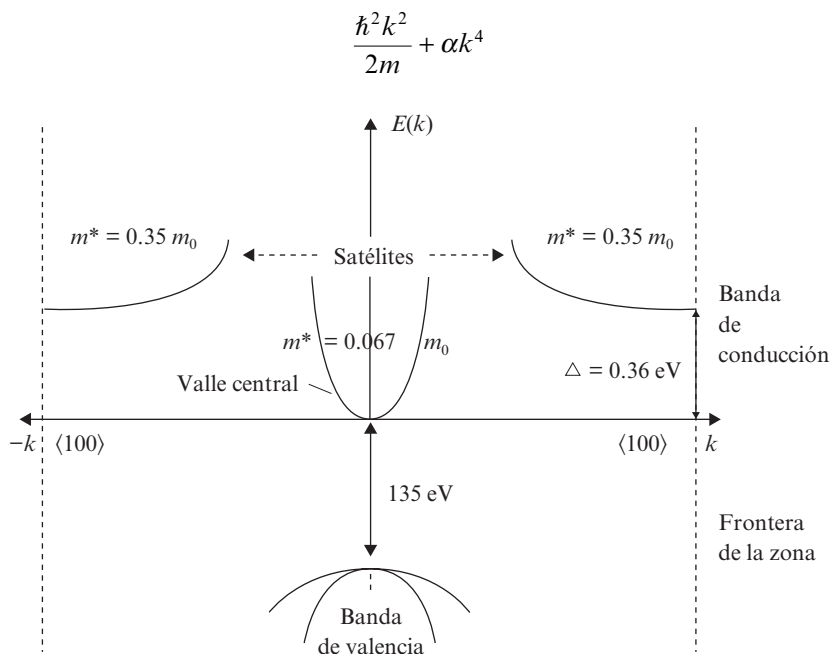


Figura 31.3. Diagrama de bandas del AsGa con detalles del valle central y de los satélites en la banda de conducción.

Pero para lo que nos interesa, que es meramente cualitativo, podemos continuar con una banda totalmente parabólica.

Ésta es la situación estática, esto es, tenemos unos pocos electrones que a temperatura ambiente están situados en el fondo del valle principal de la banda de conducción. Dado que la energía térmica a 300 K es de 0.02 eV, los electrones estarán en equilibrio con la red a esa temperatura.

Supongamos ahora que se aplica un campo eléctrico al material. Entonces los electrones situados en el fondo de la banda de conducción, en el borde del valle central, adquirirán más energía, dejarán de estar en equilibrio térmico con la red y ocuparán estados de más energía de la banda de conducción en el valle central; estos electrones se «calentarán». Si se sigue aumentando la intensidad del campo eléctrico, puede llegar un momento en que los electrones estén tan calientes que se puedan transferir a los valles secundarios

y pasar de ser electrones ligeros (con pequeña masa efectiva) a ser electrones pesados (con gran masa efectiva). Esta transferencia puede alcanzarse gracias a que el campo eléctrico nos calienta suficientemente los electrones y a que la estructura de bandas del AsGa es la adecuada para que, mediante la absorción o emisión de fonones, se pueda producir la transferencia de electrones del valle principal a los secundarios (y, por supuesto, el proceso inverso, así como transferencia entre los cuatro valles secundarios entre sí). También hay que considerar las transiciones dentro de un mismo valle, conocidas como intravalle, que también se pueden producir por medio de fonones.

En general, una transición intravalle de un electrón de energía $E(k)$ antes de la transición y con energía $E(k')$ después de la transición se produce mediante el intercambio de un fonón:

$$\text{Absorción:} \quad E(k') = E(k) + \hbar\omega_0$$

$$\text{Emisión:} \quad E(k') = E(k) - \hbar\omega_0$$

El caso importante de transición del valle central a los satélites, que es el que nos interesa, requiere que los electrones adquieran una energía Δ (se calienten) antes de que la dispersión de un valle al otro sea posible. Resumiendo, tendríamos:

1. Transición del valle principal a los secundarios:

$$\text{Absorción:} \quad E_s(k') = E_p(k) - \Delta + \hbar\omega$$

$$\text{Emisión:} \quad E_s(k') = E_p(k) - \Delta - \hbar\omega$$

2. Del valle secundario al principal:

$$\text{Absorción:} \quad E_p(k') = E_s(k) + \Delta + \hbar\omega$$

$$\text{Emisión:} \quad E_p(k') = E_s(k) + \Delta - \hbar\omega$$

En la figura 31.4 se presenta un esquema de alguna de estas transiciones.

En resumen, tenemos un semiconductor donde existe la posibilidad de tener dos tipos de electrones con masas efectivas pequeñas (gran movilidad) y con masas efectivas grandes (pequeña movilidad), lo cual depende de la intensidad del campo eléctrico aplicado. La posibilidad de que exista una zona del material con electrones digamos rápidos (fríos) y con electrones lentos (calientes) hace que se forme una región dipolar, región de alta resistencia, que viaja a lo largo de la muestra partiendo del cátodo y hacia el ánodo; durante su paso por el semiconductor la corriente eléctrica que lo atraviesa es baja, mientras que cuando desaparece, la intensidad es alta. Así, se tiene que el movimiento repetido de estos dominios a través del semiconductor nos produce oscilaciones en la corriente, que dependen del campo eléctrico aplicado. La posibilidad de controlar con un campo eléctrico externo estas oscilaciones de corriente hace que los dispositivos de estado sólido, basados en diodos Gunn, tengan numerosas aplicaciones en el campo de las microondas.

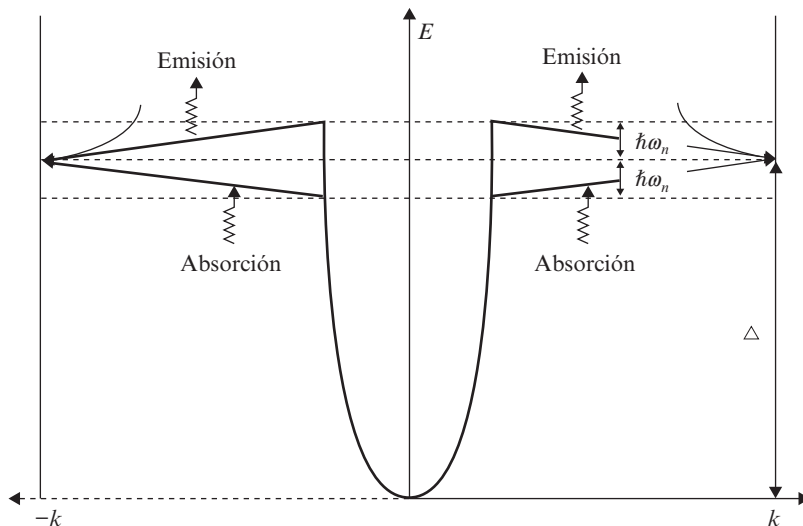


Figura 31.4. Posibles transiciones en la banda de conducción del AsGa. (Transferencia de electrones mediante absorción o emisión de fonones.)

31.4. RESONANCIAS MAGNÉTICAS

Los fenómenos de resonancia están entre los más importantes en la física. Las próximas líneas las vamos a dedicar a la resonancia magnética. Desgraciadamente, en esta sección no se pueden abordar las numerosas vertientes que tiene este fenómeno. El orden que se va a seguir consiste en empezar describiendo el efecto, para, después, escribir las ecuaciones fenomenológicas que lo gobiernan y terminar hablando brevemente de los efectos de relajación.

Existen muy diferentes tipos de resonancia magnética dependiendo del tipo de material que se esté estudiando. En principio, podemos (véase sección siguiente y más en detalle el capítulo 32) distinguir entre materiales que tienen momentos magnéticos permanentes no acoplados, que pueden ser ordenados solamente bajo la acción de un campo magnético exterior, en competición con el efecto de desorden producido por la temperatura, y un segundo grupo de materiales que por debajo de una cierta temperatura tienen ordenados sus momentos magnéticos de una forma espontánea, sin campo aplicado. En esta sección nos vamos a dedicar a la resonancia magnética en los materiales que no tienen orden espontáneo. La discusión de resonancias para el caso de orden espontáneo es formalmente idéntica a la que vamos a hacer aquí, pero la aparición del llamado campo interno o molecular (véase sección 32.1) complica bastante la situación.

En principio, existen dos tipos de resonancias magnéticas de momentos magnéticos no acoplados, la resonancia paramagnética (EPR en las siglas inglesas, *Electron Paramagnetic Resonance*) y la resonancia magnética nuclear (*Nuclear Magnetic Resonance*, NMR). La

única diferencia entre ambas es la frecuencia a la que se tiene que sintonizar el campo magnético exterior para tener el efecto resonante. Los electrones que forman los átomos, que a su vez se agrupan para formar un sólido, portan un momento magnético (véanse capítulo 19 y siguientes), siendo su valor de un magnetón de Bohr (μ_B), mientras que el momento magnético elemental del núcleo (μ_n) es unas mil veces más pequeño. Esta diferencia de magnitud es, en el fondo, la única que existe entre EPR y NMR, la cual, entre los valores de los momentos magnéticos, es la que conduce a la diferencia en las frecuencias de resonancia, en el rango de los GHz para EPR y en el de los MHz para NMR.

Empezaremos con la descripción del efecto. Supongamos que se coloca una sustancia (en principio no tiene ni siquiera que ser un sólido) con momentos magnéticos en presencia de un campo exterior y que se tienen dos posibilidades de orientación del espín, paralelo al campo y antiparalelo al campo. Si estamos en equilibrio térmico, se tendrán más espines paralelos al campo que antiparalelos y existirá una diferencia de población, ya que se favorecerá el estado de más baja energía. Supongamos ahora que se tiene, además del campo magnético aplicado constante (H), un pequeño campo magnético aplicado que oscila con una frecuencia determinada. En principio, no ocurrirá nada hasta que la frecuencia de ese campo oscilante sea precisamente (recordar el capítulo 20) la correspondiente a una energía $\hbar\omega_r$, que es, a su vez, la diferencia de energía entre los niveles con los momentos magnéticos paralelos al campo aplicado o antiparalelos:

$$\hbar\omega_r = \mu H$$

siendo μ la magnitud del momento magnético correspondiente.

Ahora bien, dado que hay más momentos magnéticos paralelos al campo aplicado, entonces la sustancia absorberá energía proveniente del campo oscilante de frecuencia ω_r , debido al salto de momentos magnéticos del estado de energía inferior (paralelo a la dirección de aplicación del campo) al superior (antiparalelo a la dirección de aplicación del campo). Por supuesto que existen transiciones en los dos sentidos, pero en el equilibrio el resultado será un efecto de absorción pequeño, que se puede observar y medir experimentalmente. Es inmediato ver la importancia de esta técnica, ya que la frecuencia a la cual se produce la resonancia es una característica propia del núcleo o del átomo que estemos estudiando; es como su huella, como su marca de identidad. En particular, NMR es una poderosa herramienta, totalmente comercializada, para la determinación e identificación de estructuras, por ejemplo, de complicadas moléculas orgánicas.

A continuación vamos a estudiar con un poco más de detalle algunos aspectos interesantes de este efecto. Empezaremos por el comportamiento de la población de momentos magnéticos.

Sean N_+ y N_- las poblaciones de los niveles con momentos magnéticos $+1/2$ y $-1/2$. Entonces

$$n = N_+ - N_-$$

será el número neto de momentos magnéticos que tenemos, y que será, multiplicado por el valor del momento magnético de cada portador, el momento magnético total. Si llama-

mos P a la probabilidad por unidad de tiempo de que se invierta un momento magnético, el ritmo de variación del momento magnético neto se puede escribir como

$$\frac{dn}{dt} = -2Pn \quad [31.4.1]$$

Integrando, se tiene

$$n(t) = n(0)e^{-2Pt}$$

Por otra parte, la absorción de energía por unidad de tiempo, siendo la diferencia de energía entre los dos niveles $\hbar\omega$, se puede escribir como

$$\frac{dE}{dt} = N_+P\hbar\omega - N_-P\hbar\omega$$

donde el primer sumando es el número de momentos magnéticos que por segundo pasan del nivel de baja energía al nivel de alta energía menos el número de los que descienden emitiendo energía (segundo sumando). Es claro que para que exista absorción de energía lo primero que se ha de tener es que

$$N_+ \neq N_-$$

Ahora bien, estos momentos magnéticos no están aislados, en nuestro caso están en una red cristalina. Vamos a ver a continuación el papel que desempeña la red.

Si se aplica un campo magnético, se aumenta una de las poblaciones y se va liberando energía que, en principio, será absorbida por la red cristalina en donde están situados los momentos magnéticos, hasta que se llega a un cierto equilibrio térmico. Esto tarda un cierto tiempo, que es precisamente el tiempo de relajación espín-red. Solamente se tiene una transición entre estados posibles de los momentos magnéticos si ésta va acompañada de otra entre dos estados en la red. Si llamamos N_1 y N_2 a los estados de los momentos magnéticos y N_a y N_b a los estados de la red, en equilibrio térmico, se tiene

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{N_a}{N_b}$$

Llamando

$$N = N_+ + N_-$$

queda que la variación del número de portadores de momentos magnéticos (véase ejercicio 31.3) es

$$\frac{dn}{dt} = N(P_\downarrow - P_\uparrow) - n(P_\uparrow + P_\downarrow) \quad [31.4.2]$$

donde, teniendo en cuenta el efecto de la red

$$P_{\uparrow} = N_a P_{2a \rightarrow 1b}$$

$$P_{\downarrow} = N_b P_{2b \rightarrow 1a}$$

siendo $P_{2a \rightarrow 1b}$ la probabilidad de que el estado de los momentos 2 y de la red a pase al estado de los momentos 1 y de la red b . Como

$$P_{2a \rightarrow 1b} = P_{1b \rightarrow 2a}$$

se tiene

$$\frac{dn}{dt} = \frac{n_0 - n}{T_1}$$

donde

$$\frac{1}{T_1} = P_{\uparrow} + P_{\downarrow} \quad \text{y} \quad n_0 = N \frac{P_{\downarrow} - P_{\uparrow}}{P_{\downarrow} + P_{\uparrow}}$$

siendo n_0 la diferencia de población en el equilibrio térmico.

Luego, recordando [31.4.1], quedará al final

$$\frac{dn}{dt} = -2Pn + \frac{n_0 - n}{T_1}$$

cuya interpretación es ahora bien sencilla. El primer término (término de Larmor) corresponde a las transiciones inducidas por absorción de energía del campo magnético. El segundo término (llamado de Bloch) es un término disipativo que da cuenta de la relajación espín-red, siendo T_1 una constante con dimensiones de tiempo, que viene a ser el tiempo que tarda la componente de la imanación en la dirección del campo aplicado en alcanzar su valor en equilibrio una vez aplicado el campo magnético. T_1 se puede medir experimentalmente; es del orden de 10^{-6} s a temperaturas de nitrógeno líquido (77 K) y de 10^{-2} s a temperatura del helio líquido (4.2 K).

Existen otros numerosos aspectos más o menos directamente relacionados con las resonancias magnéticas, como pueden ser los procesos de relajación espín-espín, que no podemos tratar. Baste decir como punto final que las resonancias magnéticas es uno de los temas más, ricos tanto conceptualmente como por sus aplicaciones.

31.5. NIVELES DE LANDAU

Como ya se comentó en la sección 29.1, la aplicación de un campo magnético exterior a la materia produce efectos que sólo se pueden explicar en el marco de la Física Cuántica.

La magnitud que nos caracteriza y clasifica las distintas respuestas de la materia a la aplicación del campo magnético es la susceptibilidad, que nos indica el ritmo de variación de la imanación en función de la variación del campo magnético aplicado, y que se representa por

$$\chi = \frac{M}{H}$$

Es decir un agente externo (campo magnético) produce un efecto en la materia (imanación) que depende del tipo de materia de que se trate (susceptibilidad).

En general, existen dos grandes tipos de comportamiento. Si se estudia el efecto del campo aplicado sobre las partículas cargadas que existen en todo sólido, se tiene que la susceptibilidad es independiente de la temperatura, pequeña y negativa ($\chi \sim -10^{-6}$); éste es el efecto diamagnético, que aparece en cualquier material y que siempre está presente. El segundo efecto de un campo magnético en la materia se pone de manifiesto si existen momentos magnéticos presentes en la materia; entonces el campo aplicado tiende a ordenarlos en competencia con el desorden inducido por la temperatura. Para este caso la susceptibilidad sigue siendo pequeña, pero ahora es positiva y sí depende de la temperatura. Dentro de este grupo existe un subgrupo muy importante que presenta, por debajo de una cierta temperatura, una transición de fase (en general, transición de segundo orden) con ordenamiento espontáneo de los momentos magnéticos sin necesidad de aplicar un campo exterior. A este último grupo le dedicaremos el capítulo siguiente.

El problema que vamos a tratar en esta sección es la respuesta de la banda de conducción a la aplicación de un campo magnético. Vamos a limitarnos al efecto diamagnético. Se va a considerar tan sólo que aplicamos el campo magnético a un gas de electrones (gas de Fermi) prescindiendo en todo lo que sigue del espín del electrón.

En principio, el efecto de un campo magnético sobre un electrón fue tratado en el capítulo 20. En esta sección vamos a comenzar resumiendo los aspectos fundamentales para, a continuación, ir un poco más lejos.

El hamiltoniano es:

$$H = \frac{1}{2m} \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right]^2$$

Suponiendo que la dirección de aplicación del campo magnético es la del eje z , elegimos

$$\mathbf{A} = (0, Hx, 0)$$

Por tanto, el hamiltoniano pasa a ser

$$H = \frac{1}{2m} \left[p_x^2 + \left(p_y - \frac{eH}{c} x \right)^2 + p_z^2 \right]$$

La ecuación de Schrödinger es:

$$H\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r})$$

Podemos escribir la función de onda como

$$\phi(\mathbf{r}) = \varphi(x)e^{i(k_y y + k_z z)}$$

La ecuación para $\varphi(x)$ será

$$\frac{1}{2m} \left[p_x^2 + \left(\hbar k_y - \frac{eH}{c} x \right)^2 + \hbar k_z^2 \right] \varphi(x) = E\varphi(x)$$

Si sustituimos x por la nueva variable x_0 , dada por

$$x_0 = x - \frac{c\hbar}{eH} k_y \quad ; \quad \omega_c = \frac{eH}{mc}$$

donde ω_c es la frecuencia ciclotrónica, que desempeña un papel fundamental en todo lo que sigue, la ecuación para $\varphi(x)$ queda ahora:

$$\left[\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_c^2 x_0^2 \right] \varphi(x_0) = \left[E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right] \varphi(x_0)$$

Esta ecuación es formalmente idéntica a la de un oscilador armónico centrado en

$$\frac{c\hbar}{eH} k_y$$

Los autovalores de la energía serán

$$E_{nz} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

Este resultado es crucial para todo lo que sigue. Por un lado, la aplicación de un campo magnético en la dirección z implica que el movimiento del electrón en la dirección z es igual al de un electrón libre en ausencia de campo aplicado. Así, la contribución a la energía cinética en la dirección z es la misma. Por otra parte, en el plano del espacio de momentos perpendicular a la dirección de aplicación del campo, aparece una energía cuantizada. Resumiendo, el efecto de la aplicación de un campo a la banda de conducción consiste en que en el espacio de momentos k se condensan los electrones en tubos concéntricos (en la proyección sobre el plano p_x, p_y serán circunferencias) con eje en la dirección de p_z . En la figura 31.5 se muestra este efecto de forma esquemática. La aplicación de un campo magnético a la banda de conducción nos produce la aparición de subbandas

donde se condensan los electrones, llamadas niveles de Landau. La separación en energía entre subbandas consecutivas depende del valor del campo magnético aplicado, ya que viene dada por la frecuencia ciclotrónica.

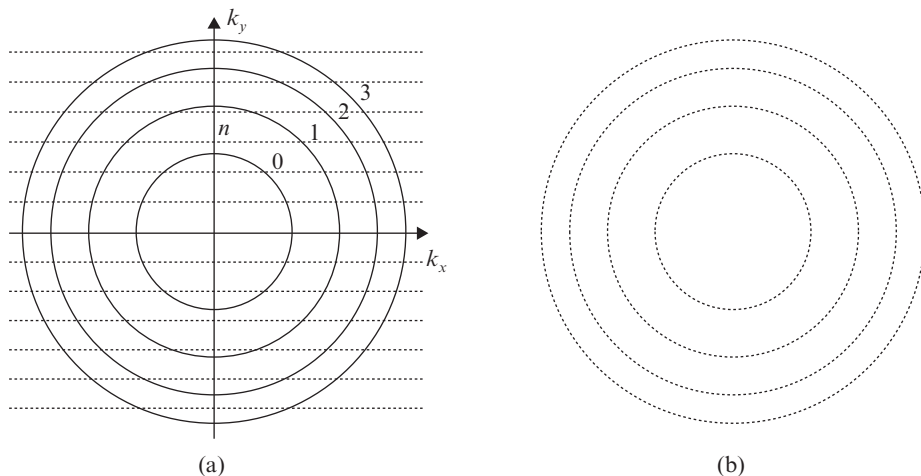


Figura 31.5. Esquema de los estados de una banda de conducción para electrones libres: (a) sin campo magnético aplicado; (b) campo magnético aplicado (niveles de Landau).

Este efecto tiene una importancia experimental fundamental para poder conocer la topología de la superficie de Fermi del metal.

Supongamos que estamos en una situación experimental tal que

$$\omega_c \tau \gg 1$$

donde τ es el llamado tiempo de relajación, el tiempo que transcurre entre dos colisiones consecutivas de un electrón de conducción. Normalmente, es a temperatura ambiente, del orden de 10^{-14} s. Las condiciones experimentales necesarias son bajas temperaturas (con lo cual estamos aumentando el valor de τ) y campos magnéticos intensos (con lo cual se aumenta el valor de ω_c). En este límite, un electrón completa varias órbitas ciclotrónicas (véase ejercicio 31.5) en un plano perpendicular a la dirección del campo aplicado antes de ser dispersado. Por tanto, el movimiento del electrón está determinado solamente por la geometría de la superficie de Fermi y por los efectos de campos externos. También hay que considerar que la situación experimental es tal que $\hbar\omega \gg k_B T$. Estamos en el llamado régimen cuántico, donde los aspectos que estamos considerando, niveles de Landau, superficie de Fermi bien definida, etc., responden experimentalmente a las predicciones teóricas. El efecto de la temperatura, que siempre tiende a desdibujar y desordenar los efectos cuánticos, no es muy importante.

Una vez puntualizado que las condiciones experimentales (baja temperatura y campos magnéticos intensos) son las adecuadas, pasaremos a ver cómo se puede determinar la

topología de la superficie de Fermi utilizando el efecto cuántico de la aparición de los niveles de Landau al aplicar a la banda de conducción un campo magnético.

Supongamos un monocristal, es decir, el material macroscópicamente reproduce la celda unidad (todos los átomos bien ordenados). En este caso, podemos aplicar el campo magnético en direcciones cristalográficas bien determinadas, es decir, podemos definir con la dirección del campo una dirección bien determinada en el espacio de momentos y, en consecuencia, podremos estudiar las órbitas cuantizadas, los tubos cuantizados y los niveles de Landau de los planos que corten a la superficie de Fermi perpendicularmente a la dirección de aplicación del campo magnético. Veamos qué ocurre si al aplicar un campo magnético vamos aumentando su valor. Al aumentar el valor del campo aplicado aumenta ω_c , y, por tanto, aumenta la diferencia en energía entre los niveles de Landau. Esto hace que los distintos niveles de Landau vayan pasando por el nivel de Fermi según se va variando el valor del campo magnético; por tanto, cuando el nivel de Fermi coincide con la separación entre dos niveles, no existirán estados ocupados en el nivel de Fermi; por el contrario, cuando pasa un nivel de Landau por el nivel de Fermi se tiene un máximo en la población de estados en el nivel de Fermi, pero cuando el nivel de Landau ha pasado por el nivel de Fermi y se sigue aumentando el campo, el nivel de Landau, una vez atravesado el nivel de Fermi, se despuebla. En la figura 31.6 se representa esta situación.

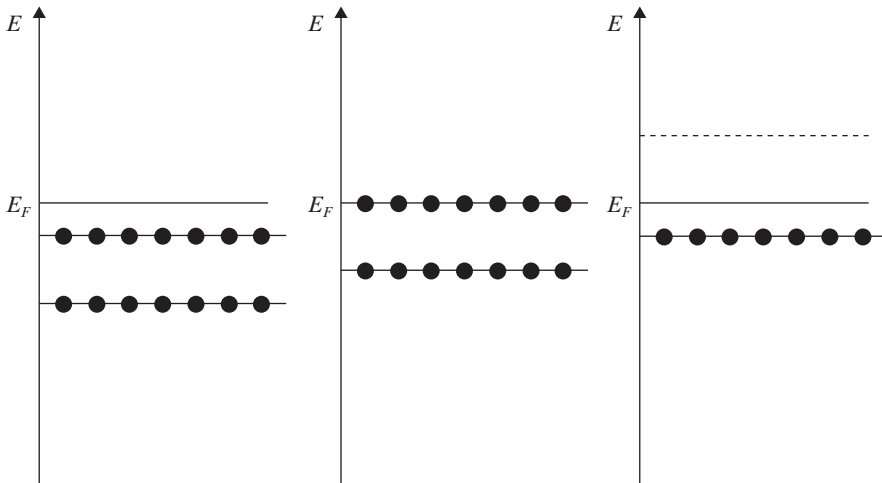


Figura 31.6. Evolución de la densidad de población en el nivel de Fermi al ir aumentando el valor del campo magnético aplicado (oscilaciones cuánticas).

En resumen, variando el valor del campo magnético aplicado podemos modular la población electrónica del nivel de Fermi. Esto quiere decir que todas las propiedades que dependen de la densidad de estados en el nivel de Fermi fluctuarán con el valor del campo magnético aplicado. Así tenemos, por ejemplo, fluctuaciones en la susceptibilidad diamagnética de la banda de conducción (efecto de Haas-van Alphen) y fluctuaciones en la resistividad (efecto Shubnikov-de Haas). El resultado importante, que mencionaremos sin

demostrar, es que la frecuencia de las oscilaciones Shubnikov-de Haas o de Haas-van Alphen son directamente proporcionales a las áreas extremales (en seguida veremos qué significa esto) de la superficie de Fermi. Se llaman áreas extremales a las áreas máximas o mínimas de una sección transversal (máxima o mínima) de la superficie de Fermi, normal al campo magnético. Esto es, si medimos, en función del campo magnético aplicado, la frecuencia de las oscilaciones de la resistividad o de la susceptibilidad, obtenemos información directa del área de una sección transversal de la superficie de Fermi. Cambiando la dirección de aplicación del campo magnético podemos tener información, que, junto a la procedente de otro tipo de experimentos, como son los de ruptura magnética, resonancia ciclotrónica, etc., permiten construir la geometría de la superficie de Fermi.

EJERCICIOS

31.1. En un cristal cúbico centrado en las caras (definición en el ejercicio 29.10), si suponemos que los átomos son esferas que están en contacto unas con otras, calcular el porcentaje de la celda unidad que está sin ocupar.

31.2. Demostrar la expresión [31.2.2].

31.3. Demostrar la expresión [31.4.2] e interpretar cada uno de los términos.

31.4. Si se aplica a un metal un campo magnético constante de 2000 Oe y perpendicular a éste un pequeño campo magnético oscilante, se observa que para una frecuencia de 5 GHz en este campo oscilante se tiene resonancia. Calcular la masa efectiva (en función de la masa del electrón libre) para los electrones de conducción de este metal.

31.5. En un monocristal de un metal se sabe que el recorrido libre medio a temperatura muy baja es de 10^{-2} cm y que la velocidad de los electrones de conducción es del orden de 5×10^8 cm \cdot s $^{-1}$. Si se aplica un campo magnético de 30 kOe, calcular el radio de la órbita ciclotrónica. ¿Cuántas órbitas completará el electrón antes de ser dispersado?

32

Orden magnético espontáneo en sólidos

José Luis Vicent

32.1. FENOMENOLOGÍA DEL ORDEN MAGNÉTICO

Toda la materia es magnética, ya que cualquier medio material responde a la aplicación de un campo magnético exterior. En el capítulo anterior ya se ponía de manifiesto este fenómeno (sección 31.5).

Como ya se indicó, la acción de un agente exterior, el campo magnético, produce un efecto en el material que es la aparición de la imanación. La relación entre estas dos magnitudes depende del tipo de materia a la que estemos aplicando el campo magnético. En realidad podemos tratar la materia como una caja negra, algo a lo que se le aplica un campo magnético y aparece una imanación. En el capítulo anterior definíamos la magnitud característica (la susceptibilidad), propia de cada material, que nos permite agrupar y distinguir la materia en distintos grupos según sea su susceptibilidad (sección 31.5). Recordando y ampliando lo escrito allí, y ciñéndonos exclusivamente a los materiales que tienen momento magnético permanente, tenemos un primer tipo de materiales, los cuales, por debajo de una cierta temperatura, tienen una transición de fase (de segundo orden, salvo muy raras excepciones) a un estado con los momentos magnéticos ordenados de una manera espontánea, sin necesidad de aplicar un campo magnético. Ahora existe también una gran cantidad de materiales que, teniendo momentos magnéticos permanentes, solamente la acción de un campo magnético es capaz de ordenarlos y dar lugar a que aparezca una imanación macroscópica en el material, imanación que desaparece cuando se deja de aplicar el campo. Dentro de este grupo tenemos dos tipos, cuyo comportamiento está reflejado en las figuras 32.1.(a) y 32.1.(b), el primero son los paramagnéticos y el segundo son los conocidos, hasta hace cincuenta años, con el nombre de paramagnéticos anómalos.

Resumiendo, tenemos tres grandes grupos de materiales:

Tipo 1. Aquellos en los que, por debajo de cierta temperatura, permanece un orden de los momentos magnéticos cuando desaparece el campo magnético aplicado.

Tipo 2. Aquellos en los que la desaparición del campo magnético exterior aplicado desordena de nuevo los momentos magnéticos, siendo tan sólo la acción de la temperatura, que siempre tiende a desordenar los momentos magnéticos, la única que permanece.

Tipo 3. Materiales en los que su susceptibilidad se desvía fuertemente del comportamiento paramagnético por debajo de una cierta temperatura.

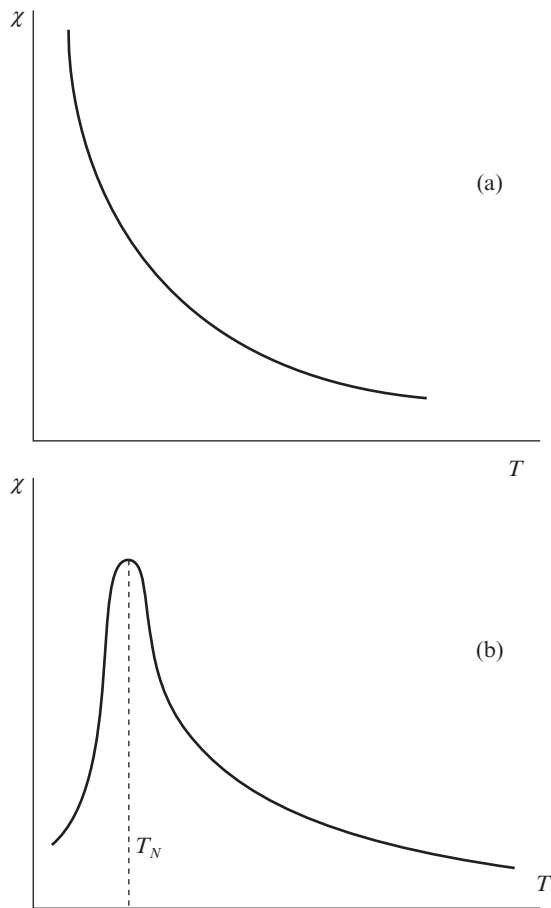


Figura 32.1. (a) Susceptibilidad frente a temperatura en un paramagnético. (b) Susceptibilidad frente a temperatura en un paramagnético anómalo (antiferromagnético).

En este punto, y antes de avanzar, tenemos que distinguir dos niveles, el macroscópico y el microscópico. En el aspecto macroscópico, la diferencia es clara: un material que, por debajo de una cierta temperatura, tiene los momentos magnéticos ordenados espontáneamente (tipo 1) puede dar lugar a una imanación neta macroscópica que se puede modificar con un campo magnético aplicado. Véase en la figura 32.2 el efecto de la aplicación de un campo exterior sobre la imanación macroscópica (lo que se conoce con el nombre de imanación técnica) de un material del tipo 1. Como se puede ver en esta figura, tenemos un comportamiento muy complejo; explicarlo está muy lejos del propósito de este libro. En cuanto a los materiales de tipos 2 y 3, o son paramagnéticos (tipo 2) o bien (tipo 3) presentan anomalías (recordar la figura 32.1.(b)). Ninguno de estos dos tipos puede desarrollar una imanación neta intrínseca, es decir, para tener imanación siempre hay que tener un campo magnético exterior aplicado, y a veces con valores gigantescos.

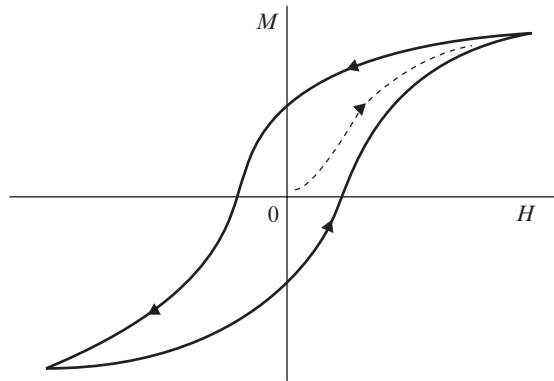


Figura 32.2. Ciclo de histéresis en un ferro o ferrimagnético.

El panorama cambia si nos movemos en el plano microscópico.

Como se indicaba en el capítulo 29 (la estructura cristalina del estado sólido, sección 29.4), para conocer cómo se disponen realmente a nivel microscópico los momentos magnéticos en un sólido se tiene una poderosa herramienta experimental: la difracción de neutrones.

Si se estudia la difracción de un haz de neutrones por cristales de los tres tipos antes mencionados, se tienen resultados sorprendentes.

Empezaremos por los cristales de tipo 1, es decir, aquellos en los cuales macroscópicamente existe, por debajo de una cierta temperatura, imanación. Si observamos estos materiales en un experimento de neutrones y extraemos el orden de los momentos magnéticos de los átomos, se observa que, microscópicamente, estos materiales a su vez pertenecen a dos subgrupos. El primero de ellos es el de los materiales ferromagnéticos. En estos materiales todos los momentos magnéticos que aparecen son iguales, y a 0 K están todos alineados en la misma dirección y en el mismo sentido. El segundo subgrupo es aquel en donde existen dos tipos de momentos magnéticos, uno de ellos de menor magnitud que el otro y dirigido en sentido opuesto, de tal forma que existen dos subredes de distinto momento magnético y dirigidos en sentidos opuestos. Estos materiales reciben el nombre de ferrimagnéticos.

La difracción de neutrones por cristales del tipo 2, cristales paramagnéticos para todo el rango de temperaturas, no presenta ningún efecto, salvo una cierta contribución al fondo difuso. Tenemos la dispersión incoherente de los neutrones por momentos magnéticos que no están ordenados.

La difracción de neutrones por cristales del tipo 3, llamados paramagnéticos anómalos, nombre que se mantuvo hasta que se realizaron experimentos de difracción de neutrones en ellos, da un resultado sorprendente. Se observa, por debajo de una cierta temperatura, que los momentos magnéticos se ordenan, pero formando dos subredes con los momentos magnéticos iguales y dirigidos antiparalelamente (H. Shull, 1950). Es decir, a 0 K no tendremos imanación macroscópica porque las dos subredes se compensan. Estos materiales se conocen con el nombre de antiferromagnéticos (L. Néel, 1936).

Resumiendo, tenemos que, desde el punto de vista microscópico, los tres tipos de comportamiento que señalábamos se pueden reducir a dos:

1. Materiales que no presentan nunca orden magnético espontáneo (paramagnéticos para todas las temperaturas), que corresponden al tipo 2 de la clasificación macroscópica.
2. Materiales que presentan orden magnético espontáneo por debajo de una cierta temperatura, que son los ferromagnéticos, los ferrimagnéticos y los antiferromagnéticos.

Es importante señalar que si bien desde el punto de vista macroscópico los ferromagnéticos y los ferrimagnéticos presentan imanación macroscópica, ciclos de histéresis y en todo un comportamiento similar, por el contrario, los antiferromagnéticos no tienen imanación neta. Si se estudian desde el punto de vista microscópico, las similitudes entre los antiferromagnéticos y los ferrimagnéticos son grandes; en ambos casos los momentos magnéticos se ordenan antiparalelamente, mientras que en un ferromagnético los momentos magnéticos se ordenan paralelamente. En la figura 32.3 se presenta un esquema general.

En el resto del capítulo se va a estudiar, de una manera muy esquemática, el origen microscópico, es decir, cuál es la interacción responsable de que en algunos compuestos y elementos por debajo de una cierta temperatura (temperatura de Curie para el caso ferro y ferri y temperatura de Néel para los antiferro) los momentos magnéticos se ordenen espontáneamente paralelamente (ferro) o bien antiparalelamente (antiferro y ferri).

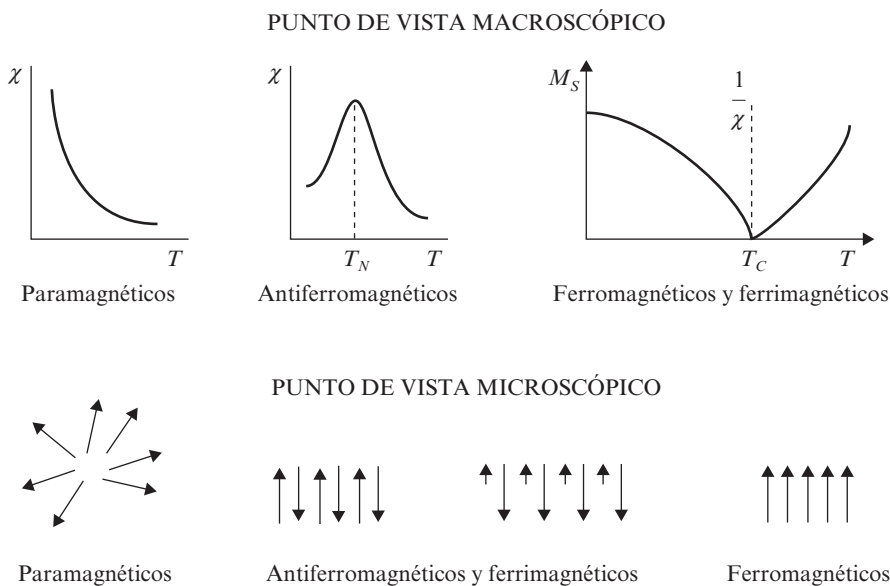


Figura 32.3. Distintas clasificaciones magnéticas de los materiales según se esté en un nivel macroscópico o microscópico.

Antes de dar el salto a la teoría cuántica, unas breves palabras sobre la teoría fenomenológica del orden magnético espontáneo.

A principios del siglo XX, P. Weiss fue el primero que describió un modelo fenomenológico para explicar la aparición de orden magnético espontáneo por debajo de cierta temperatura. El primer punto experimental que hay que considerar es que las temperaturas a las que aparece este efecto son extraordinariamente altas, en muchos casos muy por encima de la temperatura ambiente, lo cual, dados los órdenes de magnitud de las interacciones de tipo térmico, hace descartable que los momentos magnéticos se ordenen debido a pura interacción momento magnético-momento magnético de tipo dipolar magnética. Hay que buscar el origen del orden magnético espontáneo en una interacción mucho más intensa. A principios del siglo XX no existía la herramienta necesaria (la del formalismo de la Mecánica Cuántica) para poder abordar este dilema, esto es, interacción que ordena momentos magnéticos y que no es de origen puramente magnético. P. Weiss no responde a la pregunta sobre el origen de la interacción que mantiene ordenados los momentos magnéticos. Supone que en el interior del material existe un campo magnético muy intenso y de origen desconocido que es el responsable del orden de los momentos magnéticos. Este campo interno se conoce con el nombre de campo molecular. P. Weiss desarrolla una teoría de campo medio y supone que el valor del campo molecular (H_M) es el mismo en todos los puntos del material y es proporcional al valor de la imanación de saturación (M_s), de tal forma que podemos escribir

$$H_M = \lambda M_s$$

La teoría de Weiss, a pesar de su simplicidad, reproduce la variación de M_s con la temperatura en líneas generales, con dos grandes lagunas: las bajas temperaturas y el comportamiento cerca del punto de transición (temperatura de Curie).

En la sección siguiente vamos a explicar cuál es el origen microscópico de este campo molecular.

32.2. TEORÍAS DE CANJE

Uno de los primeros problemas que abordaron W. Heisenberg y P. A. M. Dirac dentro del formalismo de la Mecánica Cuántica fue precisamente la interacción que produce el orden magnético espontáneo.

Éste es un tema complejo, como veremos. Explicar por qué el Fe es ferromagnético no es en absoluto trivial, pero está al alcance de este libro explicar el fundamento, los cimientos, en que se basa la aparición de orden magnético espontáneo en algunos elementos del sistema periódico y en muchos compuestos y aleaciones.

Supongamos que tenemos dos electrones en un núcleo Z_e (recordar el capítulo 22) y que la interacción espín-órbita es despreciable. Dentro del esquema de la llamada aproximación de Heitler-London, aproximación en la cual los orbitales atómicos sirven para construir los orbitales moleculares, podemos escribir la función de onda como función de

$$\varphi_n(\mathbf{r}_1)\alpha(\sigma_1)\varphi_m(\mathbf{r}_2)\alpha(\sigma_2)$$

siendo φ la parte orbital y α la parte de espín. Sean φ_a y φ_b las funciones de onda (orbital) de los estados fundamentales y E_a y E_b las energías de los estados fundamentales de cada uno de los electrones 1 y 2.

Esto es:

$$\text{Electrón 1} \rightarrow \varphi_a \rightarrow E_a$$

$$\text{Electrón 2} \rightarrow \varphi_b \rightarrow E_b$$

Para calcular la energía del estado fundamental de dos electrones en un núcleo Ze debemos escribir una expresión para el hamiltoniano y obtener los elementos de matriz para un conjunto ortonormal completo de funciones de onda.

El hamiltoniano será

$$H = H_0(\mathbf{r}_1) + H_0(\mathbf{r}_2) + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

donde $H(\mathbf{r}_1)$ es el hamiltoniano del electrón 1 en el núcleo Ze y $H(\mathbf{r}_2)$ es el hamiltoniano del electrón 2 en el núcleo Ze .

Necesitamos ahora escribir el conjunto completo y ortonormal de las funciones de onda de este sistema, basado en funciones de onda de la forma anteriormente descrita. Para ello hay que recordar (véase capítulo 15 y siguientes) que los electrones son fermiones y, por tanto, están descritos por funciones de onda antisimétricas, esto es, que cambia el signo ante el intercambio de las coordenadas del electrón. En el capítulo 22 está descrito cómo se construyen estas funciones de onda, que constituyen los determinantes de Slater.

En nuestro caso vamos a representar por $\alpha(\uparrow)$ la parte de espín de la función de onda, cuando el espín del electrón sea $+1/2$, y $\beta(\downarrow)$ la parte de espín cuando sea $-1/2$.

Es fácil comprobar (véase ejercicio 32.2) que las cuatro funciones

$$\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4$$

forman una base. Donde

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \det \begin{pmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\alpha(\sigma_1) & \varphi_a(\mathbf{r}_2)\alpha(\sigma_2) \\ \varphi_b(\mathbf{r}_1)\alpha(\sigma_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\alpha(\sigma_2) \end{pmatrix}$$

$$\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \det \begin{pmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\beta(\sigma_1) & \varphi_a(\mathbf{r}_2)\beta(\sigma_2) \\ \varphi_b(\mathbf{r}_1)\alpha(\sigma_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\alpha(\sigma_2) \end{pmatrix}$$

$$\phi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \det \begin{pmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\alpha(\sigma_1) & \varphi_a(\mathbf{r}_2)\alpha(\sigma_2) \\ \varphi_b(\mathbf{r}_1)\beta(\sigma_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\beta(\sigma_2) \end{pmatrix}$$

$$\phi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \det \begin{pmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\beta(\sigma_1) & \varphi_a(\mathbf{r}_2)\beta(\sigma_2) \\ \varphi_b(\mathbf{r}_1)\beta(\sigma_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\beta(\sigma_2) \end{pmatrix}$$

[32.2.1]

En esta base de funciones el hamiltoniano se representa por la matriz (véase ejercicio 32.3):

$$H = \begin{pmatrix} E_a + E_b + K_{ab} - J_{ab} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_a + E_b + K_{ab} & -J_{ab} & 0 \\ 0 & -J_{ab} & E_a + E_b + K_{ab} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_a + E_b + K_{ab} - J_{ab} \end{pmatrix} \quad [32.2.2]$$

donde

$$K_{ab} = \iint |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2$$

y

$$J_{ab} = \iint \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2$$

siendo

$$r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$$

Para obtener los valores de la energía tenemos que diagonalizar esta matriz, esto es, resolver la ecuación secular

$$\det(H - \lambda I) = 0$$

que nos da dos autovalores

$$E_s = E_a + E_b + K_{ab} + J_{ab}$$

$$E_t = E_a + E_b + K_{ab} - J_{ab}$$

Luego el hamiltoniano diagonalizado será

$$\begin{pmatrix} E_a + E_b + K_{ab} - J_{ab} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_a + E_b + K_{ab} - J_{ab} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_a + E_b + K_{ab} - J_{ab} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_a + E_b + K_{ab} - J_{ab} \end{pmatrix}$$

El estado fundamental será un triplete de energía

$$E_a + E_b + K_{ab} - J_{ab}$$

o bien un singlete de energía

$$E_a + E_b + K_{ab} + J_{ab}$$

Como vemos, la diferencia entre que el estado fundamental de dos electrones en un núcleo Ze sea un triplete o un singlete está determinada por el valor de

$$J_{ab}$$

Este término se conoce con el nombre de término de canje, y en este caso elemental de dos electrones en el mismo núcleo es positivo.

Por tanto, la diferencia en energía entre los dos espines paralelos o antiparalelos viene dada por la energía de canje. En el caso que estamos considerando el estado fundamental será el estado triplete, esto es, con los dos espines paralelos; es decir, un ordenamiento de tipo ferromagnético.

El siguiente paso lo da Dirac, quien encuentra un hamiltoniano, en función de los operadores de espín, que produce los mismos autovalores que el hamiltoniano de partida. Este hamiltoniano es

$$H = \frac{1}{4}(E_s + E_t) - \frac{1}{4}(E_s - E_t)\sigma_1 \cdot \sigma_2$$

que podemos escribir como

$$H = A - \frac{1}{4}J_{12}\sigma_1 \cdot \sigma_2$$

siendo (véase ejercicio 32.5)

$$\sigma_1 \cdot \sigma_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad [32.2.3]$$

Lo siguiente que tenemos que hacer es estudiar el sistema formado por dos electrones en dos núcleos diferentes. Este caso es bastante más complicado y se escapa del marco de este libro. Ahora bien, para lo que sigue, no tenemos más remedio que utilizar uno de los resultados que se obtienen. De una manera natural aparece la importancia del solapamiento entre las funciones de onda de los dos electrones. Los dos electrones no tienen que estar muy alejados, el solapamiento debe ser distinto de cero.

Todo lo que antecede parece una simplificación muy importante respecto al caso real que corresponde a un gran número de electrones en un gran número de átomos, pero a pesar de su simplicidad nos indica las líneas maestras para poder construir la teoría del canje directo de Heisenberg-Dirac.

Resumiendo y generalizando lo visto hasta ahora, si consideramos la interacción coulombiana de que las funciones de onda tienen que ser antisimétricas y debe existir solapamiento, podemos escribir un término en el hamiltoniano que es de la forma

$$-2 \sum_{a \neq b} J_{ab} \mathbf{S}_a \mathbf{S}_b$$

Entonces el criterio de Heisenberg-Dirac, para poder determinar si el estado fundamental va a tener los espines paralelos o antiparalelos, vendrá dado por el signo de la interacción de canje. Si ésta es negativa, se tiene el estado fundamental con los espines antiparalelos (antiferromagnetismo). Si, por el contrario, es positiva, se tendrán espines paralelos (ferromagnetismo). El problema principal no está en que este criterio sea una simplificación. La dificultad está en que los materiales reales no cumplen las condiciones necesarias para poder aplicar el criterio de Heisenberg-Dirac. Baste con poner un par de ejemplos:

El primer ejemplo son las tierras raras. Como veremos en la sección siguiente, las tierras raras presentan casi todas ellas orden magnético espontáneo. Concretando, el Gd es ferromagnético en invierno y paramagnético en verano, y tiene una temperatura de Curie de 18 °C. El orden magnético del Gd viene dado por los momentos magnéticos que se forman en sus capas incompletas, que son las 4f. Estas capas 4f son capas muy profundas; la última capa en esta serie es la 6s. Las capas de donde provienen los momentos magnéticos están muy apantalladas. El solapamiento (condición necesaria para poder hablar de canje directo) entre ellas no existe. Otro ejemplo extremo puede ser la otra serie donde aparece orden magnético espontáneo en el sistema periódico, la serie de transición 3d. Por ejemplo, en el Mn, que es antiferromagnético, se tiene que los momentos magnéticos provienen de la capa incompleta 3d. En la serie de transición 3d ocurre lo contrario que en el caso del Gd, los electrones responsables del momento magnético del átomo pueden en parte no estar localizados, son electrones de capas externas en un metal. En el caso de la teoría de Heisenberg-Dirac nos hemos movido en el marco de la llamada aproximación de Heitler-London, donde se construyen las funciones de onda para electrones localizados a partir de los orbitales atómicos, que en nuestro caso se han representado por φ_a y φ_b , como se indicó unas líneas más arriba.

Resumiendo, en ninguna de las dos series del sistema periódico que presentan orden magnético espontáneo, que son la serie de transición del Fe y la de las tierras raras, se puede estudiar el criterio del canje directo de Heisenberg-Dirac. En un caso porque los portadores de momento magnético están muy poco localizados (Fe), y en el otro precisamente por lo contrario, por estar demasiado localizados (Gd).

Como fácilmente se puede ver el aplicar las teorías cuánticas a la realidad, es algo que está muy lejos de ser trivial, la Naturaleza es mucho más sutil de lo que parece.

Ahora bien, resulta poco adecuado prescindir de las ideas basadas en la teoría de canje. Entre otras cosas, por ejemplo, se tiene un criterio claro para decidir si el orden va a ser de tipo ferro (canje positivo) o antiferro (canje negativo), se tiene una interacción cuántica del orden de magnitud adecuado (el canje es del orden de 1 eV), cosa imposible con interacciones magnéticas dipolo-dipolo (véase ejercicio 32.6), etc.

No se va a entrar en detalle, dada su gran complejidad, en los mecanismos que permiten explicar el orden magnético en la gran variedad de elementos, compuestos y aleaciones en los que aparece. Baste decir que mediante los modelos de canje indirecto, basados todos ellos en las ideas expuestas en las líneas anteriores sobre canje directo, se puede explicar, dentro de unas ciertas condiciones, el ferromagnetismo de las ferritas, el de las aleaciones de Heusler (AlCu_2Mn), el del Gd, el antiferromagnetismo del MnO , del Nd, etc.

Existen tres teorías de canje indirecto que cubren distintos tipos de materiales. Los aislantes, en general óxidos y sales que presentan orden magnético espontáneo por debajo de una cierta temperatura, se pueden explicar por la teoría de canje indirecto llamada supercanje. Esta teoría fue desarrollada por Kramers y Anderson. Nos encontramos con que existen materiales aislantes donde se ordenan los momentos magnéticos. Estos momentos magnéticos suelen estar situados en los cationes. Tenemos momentos magnéticos localizados y muy separados unos de otros. La teoría de Kramers-Anderson utiliza el enlace químico y los orbitales (generalmente de tipo p y d) que contribuyen a este enlace para establecer un canje indirecto entre los cationes portadores de momento magnético. Para hacerse una idea de lo complicada que resulta la teoría, baste decir que en el desarrollo formal se necesita calcular teoría de perturbaciones hasta cuarto orden. Con posterioridad (1951), Zener propuso un mecanismo nuevo conocido como «doble canje» similar al supercanje.

Otro grupo de materiales donde puede existir orden magnético espontáneo son los metales. En este caso es necesario distinguir, en teoría, dos casos extremos, aquel en que los momentos magnéticos están localizados en átomos determinados, caso ya citado de las tierras raras, y el extremo opuesto, en donde los momentos magnéticos provienen exclusivamente de la banda de conducción, momentos magnéticos no localizados, y, por supuesto, todas las combinaciones intermedias de metales con mezcla de momentos magnéticos localizados y no localizados (itinerantes) coexistiendo.

En metales, el primer caso que acabamos de describir, es el magnetismo de las tierras raras, momentos magnéticos localizados en un metal. La teoría de canje indirecto que da cuenta de estos materiales utiliza como vehículo para producir el canje indirecto a los electrones de conducción. Así se tiene interacción de canje indirecto entre los electrones localizados del ion 1 con los del ion 2 vía canje directo con los electrones de conducción. En el caso de las tierras raras sería interacción de la capa 4f (localizada) del ion 1 con la capa 6s (banda de conducción): canje directo; luego, tendríamos interacción de la banda de conducción (capa 6s) con los electrones localizados del ion 2 (capa 4f), lo que se puede resumir como canje directo 4f (ion 1) – 6s (banda de conducción) – 4f (ion 2) canje directo, lo cual da lugar a un canje indirecto 4f (ion 1) – 4f (ion 2). La teoría de este canje indirecto en metales con momentos magnéticos localizados vía electrones de conducción se conoce con el nombre de teoría RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida).

La teoría tiene como aspecto más sobresaliente que la interacción de canje indirecto depende de la distancia entre los iones cambiando de signo (ferro o antiferro) y decreciendo muy rápidamente con la distancia.

La interacción de canje indirecto RKKY se puede escribir, salvo términos constantes, como

$$\frac{J^2 k_F^3}{E_F} \left(\frac{\text{sen } 2k_F r - 2k_F r \cos 2k_F r}{k_F r^4} \right) \mathbf{S}_\alpha \mathbf{S}_\beta \quad [32.2.4]$$

donde J es la interacción de canje directo, k_F el vector de Fermi y $\mathbf{S}_\alpha, \mathbf{S}_\beta$ los espines de los dos iones.

Por último, queda el otro caso extremo en metales, cuando se tienen interacción de canje con momentos totalmente deslocalizados, es decir, en la banda de conducción, lo que se llama magnetismo itinerante. Ésta es la teoría de Vonsovskii-Stoner. La condición para que una banda de conducción por debajo de una temperatura se desdoble de una manera espontánea en dos subbandas con espines opuestos y con poblaciones distintas se llama criterio de Stoner, y es

$$2N(E_F)J > 1$$

donde $N(E_F)$ es la densidad de estados en el nivel de Fermi y J es la interacción de canje. Cuando esto se cumple, se tiene que aparece una imanación en el material debida exclusivamente a la banda de conducción. Un caso de ferromagnetismo itinerante puro es el Zn_2Zr .

Resumiendo, existen tres teorías de canje indirecto que dan criterios para saber cuándo se tiene magnético espontáneo y de qué tipo (ferro o antiferro), una para el caso de aislantes (supercanje) y dos para metales, que consideran los dos casos extremos, metales con momentos magnéticos localizados (RKKY) y metales con momentos magnéticos itinerantes (Stoner). Por supuesto que en la realidad existe un gran número de casos intermedios entre todas estas teorías. Es algo parecido a lo que existe con el enlace químico; no se puede decir que sea puro iónico o puro covalente, hay que hablar de predominio de uno o del otro. Un resumen general se presenta en la figura 32.4.

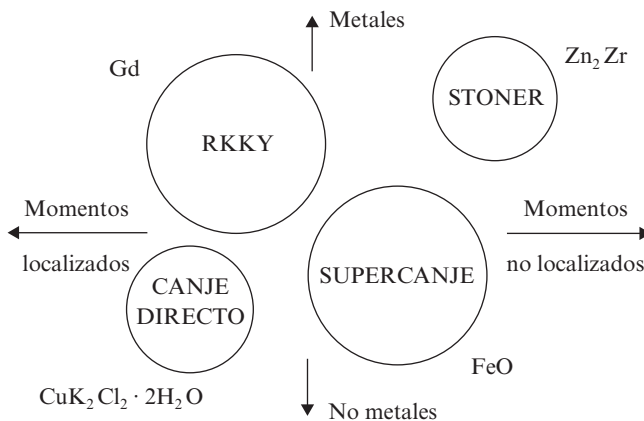


Figura 32.4. Mapa de las distintas teorías de canje.

32.3. MAGNETISMO DE LOS ELEMENTOS DE TRANSICIÓN Y DE LAS TIERRAS RARAS

Entre los numerosos grupos de materiales que presentan orden magnético espontáneo, como ya se ha indicado en las líneas anteriores, existen todo tipo de materiales, por ejemplo: 1. Aislantes y metales; 2. Elementos, aleaciones (sólido metálico formado por la disolución íntima de dos o más elementos, uno de ellos siempre un metal, y el que aparece en menor proporción puede ser un metal o un semimetal, como Se, As, o bien un no metal como P, C) y compuestos (combinación de dos o más elementos que puede expresarse en los términos que una fórmula estequiométrica y, además, están perfectamente ordenados en la red cristalina, sin que se puedan intercambiar sus posiciones).

Como es fácil ver, es tal la variedad de materiales donde aparece orden magnético espontáneo que resulta utópico hacer una valoración global. Hay que estudiar casi caso por caso, y a la luz de las ideas del canje determinar por qué aparece el orden magnético en un material o en un grupo de materiales. El grupo más fácil y más importante de estudiar es el de los elementos del sistema periódico.

En el sistema periódico, como ya se ha indicado en la sección anterior, existen tan sólo dos series que presentan orden magnético espontáneo por debajo de ciertas temperaturas. En la figura 32.5 se representa el sistema periódico, donde se indican los elementos y la temperatura a la que aparece el orden magnético (temperatura de Curie para ferro y ferri y de Néel para antiferro). Hay que hacer la salvedad de que las tierras raras pesadas (del Gd en adelante) presentan órdenes magnéticos complicados, incluso algunas tienen hasta tres ordenamientos distintos según se va disminuyendo la temperatura.

Las dos series que presentan elementos con orden magnético son la serie de transición 3d y la serie de los lantánidos.

La estructura electrónica de las últimas capas de la serie 3d de los elementos que nos interesan, que son del Cr al Ni, es la siguiente Cr ($3d^5 4s^1$); Mn ($3d^5 4s^2$); Fe ($3d^6 4s^2$); Co ($3d^7 4s^2$); Ni ($3d^8 4s^2$), y, finalmente, tenemos el Cu ($3d^{10} 4s^1$, el Zn ($3d^{10} 4s^2$). Teniendo en cuenta que la capa 4s constituye la banda de conducción, su contribución, por tanto, a la formación de momentos magnéticos permanentes y al orden magnético es indirecta; se tiene que la capa incompleta 3d es la responsable de la formación de momentos magnéticos permanentes en esta serie.

En cuanto a los lantánidos, se tiene que la estructura electrónica del primer elemento de la serie, el La, es ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$), y la del último, el Lu, es ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$). Como se ve claramente, en los lantánidos la capa incompleta, portadora de los momentos magnéticos, es la capa 4f, estando la última capa, que forma la banda de conducción, la 6s, muy alejada. Los elementos que presentan orden magnético tienen la siguiente estructura electrónica en las capas de interés: Ce ($4f^2, 6s^2$); Nd ($4f^4, 6s^2$); Sm ($4f^6, 6s^2$); Eu ($4f^7, 6s^2$); Gd ($4f^7, 5d^1, 6s^2$); Tb ($4f^9, 6s^2$); Dy ($4f^{10}, 6s^2$); Ho ($4f^{11}, 6s^2$); Er ($4f^{12}, 6s^2$); Tm ($4f^{13}, 6s^2$).

Las tierras raras (TR en lo que sigue) se clasifican en dos grupos, según que la capa 4f tenga menos de 7 electrones (TR ligera) o 7 o más electrones (TR pesada). Las TR tienen escaso interés en general. Basta darse cuenta de que la mayoría de las propiedades

dependen de los electrones externos y en este caso todos los elementos de la serie son iguales, es decir, las propiedades físicas y fisico-químicas, en general, no presentan variación entre dos TR. Sólo existe una excepción: las propiedades magnéticas. Todas las TR tienen propiedades de orden magnético, salvo el Pm, que es radioactiva, y el Pr, cuyos cristales, por razones en las que no vamos a entrar, no tienen momento magnético permanente en el estado fundamental.

Desde el punto de vista del magnetismo, la división entre TR ligeras y pesadas corresponde a dos comportamientos distintos. Todas las TR ligeras tienen la misma estructura cristalina y todas ellas son antiferromagnéticas. Todas las TR pesadas tienen la misma estructura cristalina, diferente de la anterior, y todas ellas presentan estructuras magnéticas muy complicadas con diferentes órdenes magnéticos, que se separan muchas veces de los conocidos hasta ahora (ferro, ferri y antiferro); por ejemplo, en algunas de ellas existe un ordenamiento de tipo helimagnético con los momentos magnéticos siguiendo una hélice.

A pesar de la complicación que parece tener el magnetismo de las TR, se entiende su origen microscópico, ya que tenemos momentos magnéticos muy localizados en metales, por tanto, estamos dentro del esquema de la teoría RKKY. Hay canje indirecto de los electrones 4f vía los electrones de conducción 6s. Este canje, que, como se veía someramente en la sección anterior, puede ser positivo (ferro) o negativo (antiferro), dependiendo de la distancia entre los iones, unido a la fuerte anisotropía magnetocristalina que tienen estos elementos, puede explicar sus diferentes estructuras magnéticas.

La única modificación que hay que hacer en la teoría RKKY para poder aplicarla a los elementos de las TR es que, en este caso, ha y que sustituir los operadores de espín por las proyecciones de los operadores del momento angular total sobre el espín J_α, J_β , quedando la expresión del canje RKKY como:

$$\frac{J_{sf}^2 k_F^3 (g_J - 1)^2}{E_F} \left(\frac{\sin 2k_F r - 2k_F r \cos 2k_F r}{k_F r^4} \right) J_\alpha J_\beta$$

donde g_J es el factor de Landé.

Al contrario que en el caso de las TR, en el de los elementos de transición (ET) Cr, Mn, Fe, Co y Ni no existe una teoría de canje indirecto que se pueda aplicar de una forma clara, como pasaremos a ver a continuación.

Experimentalmente, Cr y Mn son antiferromagnéticos, mientras que Fe, Co y Ni son ferromagnéticos. Según veíamos, son un grupo de elementos con una capa incompleta 3d que da lugar a momentos magnéticos permanentes, y estos momentos, por debajo de una cierta temperatura, se ordenan espontáneamente. También sabemos que por encima de la capa 3d está la banda de conducción 4s. Lo primero que podemos hacer es aplicar la teoría RKKY al canje indirecto 3d vía los electrones 4s. Si se hace esto, resulta que la teoría predice que todos los elementos son antiferromagnéticos, algo que no es cierto. Si descartamos la teoría RKKY y recordamos el esquema de la figura 32.4, otra teoría de canje indirecto que podemos aplicar es la de Stoner. Esto indicaría que pasamos de considerar los electrones 3d localizados (RKKY) a considerarlos como itinerantes (Stoner). En prin-

cipio, la banda 3d es muy externa, y no es muy irreal suponer que sus electrones tienen un cierto carácter itinerante. Recordando la sección anterior, el criterio de Stoner es

$$N(E_F)J > 1$$

Si hacemos el cálculo para los ET, se tiene

$$N(E_F)J \approx 1$$

por tanto, tampoco se puede hablar de una contribución clara del magnetismo itinerante al orden magnético en los ET.

Si volvemos a la teoría RKKY y analizamos su comportamiento en la serie de los ET, se tiene que el primer cero de la función RKKY (recordar la expresión [32.2.1]), es decir, el paso de positivo (ferro) a negativo (antiferro), se produce cuando se cumple

$$k_F r = \text{cte} \quad [32.3.1]$$

donde cte es una cierta constante. Esto quiere decir que hay que considerar la distancia entre los próximos vecinos r y el número de onda de Fermi k_F (recordar la sección 30.2). La distancia entre los próximos vecinos está fija y k_F depende de la densidad de electrones de conducción (sección 30.2), que en este caso son los 4s. Si observamos la figura 32.6, se tiene que el canje es negativo (antiferro) para los valores de r en los ET. Esto es debido a que los valores de k_F (electrones 4s) son muy grandes, mucho más grandes de lo que sería conveniente a lo largo de toda la serie, la cual resulta ser en teoría antiferro. La única manera de que, en el eje X , pudiésemos desplazar hacia la derecha la gráfica RKKY es disminuyendo el valor de k_F , de tal forma que el valor de r (eje X), para el cual el canje cambiase de positivo a negativo (expresión [32.3.1]), fuese mayor que la distancia entre próximos vecinos, al menos para Fe, Co y Ni. El problema se reduce a encontrar unos «nuevos» electrones de conducción en la serie de ET distintos de los electrones 4s. Los únicos candidatos posibles son los electrones 3d. Tendríamos así dos tipos de electrones 3d, electrones 3d localizados y electrones 3d itinerantes, de tal forma que ahora el canje indirecto RKKY se hace 3d (localizado) – 3d (localizado) vía 3d itinerante. Por lo pronto, este canje RKKY es más intenso que el canje 3d – 4s – 3d, dado que ahora estamos tratando con funciones de onda del mismo tipo y, por tanto, (recordar la sección 32.2) el solapamiento es mayor. Asimismo, la densidad de electrones itinerantes 3d es pequeña; por tanto, los valores de k_F son también pequeños, lo cual hace que los valores de r para los que se tiene el primer cero (condición [32.3.1]) sean grandes (véase la figura 32.6). El cálculo exacto indica que si el número de electrones 3d itinerantes por átomo es menor de 0.4 por átomo (lo cual viene a ser que alrededor del 5% de todos los electrones d sean itinerantes), entonces k_F es lo suficientemente pequeña como para que el elemento sea ferro. Esto sucede a partir del Fe. El Cr y el Mn tienen demasiados electrones 3d itinerantes, por lo que son antiferro. Hasta aquí hemos sugerido una serie de argumentos para explicar el ferromagnetismo (Fe, Co y Ni) y el antiferromagnetismo (Cr y Mn) que pueden ser considerados mera especulación. Hay que buscar alguna evidencia experimental que apoye las elucubraciones anteriores. Dejando aparte la controversia de si se puede hablar con propiedad de electrones itinerantes y localizados

en una misma banda como entidades independientes, el punto clave en todo lo que antecede es la existencia de electrones itinerantes distintos de los electrones 4s en la serie de los ET. Existen evidencias experimentales de muy diverso tipo de que en la banda de conducción de la serie de los ET hay más electrones, además de los que provienen de los orbitales atómicos 4s. Está claro que esos electrones de más tienen que ser electrones que provengan de la siguiente capa, que es la 3d. Entre todas estas evidencias nos vamos a detener, por su interés didáctico, en una de ellas: la estructura de bandas de la serie de transición del Fe; en concreto, y como prototipo, vamos a referirnos al Fe. En la figura 32.7 está representada parcialmente la superficie de Fermi del Fe y el diagrama de bandas en la primera zona de Brillouin, incluyendo algunas direcciones de interés (recordar la sección 30.3, donde ya se analizó este tipo de representaciones). Lo que nos interesa en el caso del Fe es ver la forma de las bandas. Por ejemplo, si nos movemos en la figura 32.7 desde la frontera de la zona de Brillouin, desde el punto F hasta el centro de la zona, punto Γ , se distinguen perfectamente la banda 4s y las cinco bandas 3d. La banda 4s es una banda ancha y parabólica; claramente, se trata de electrones no localizados, electrones itinerantes, electrones que responden a una relación de dispersión parabólica típica de electrones libres:

$$\frac{\hbar k_F^2}{2m}$$

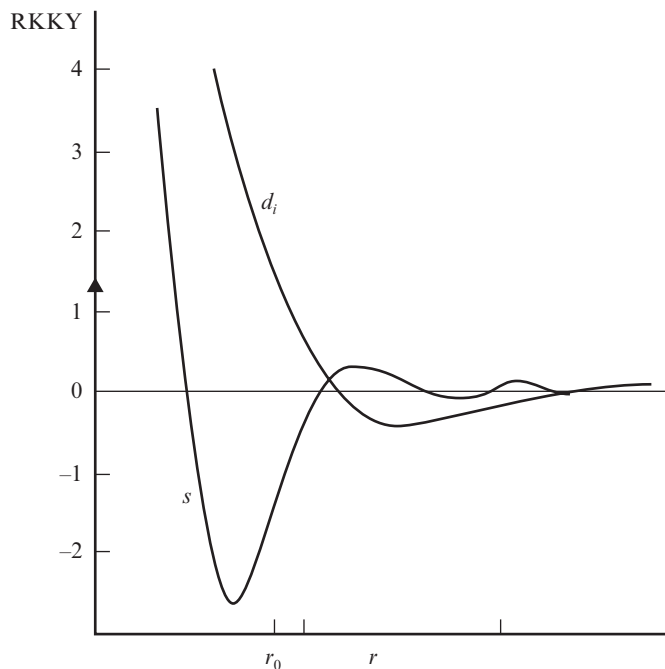


Figura 32.6. Variación con la distancia de la interacción RKKY vía los electrones s y vía los electrones d itinerantes, en unidades de la constante de red, r_0 distancia a próximos vecinos en Fe.

Lo interesante es que entre las cinco bandas de tipo 3d existe una que también es de tipo itinerante. Esto quiere decir que del cálculo de las bandas en el Fe, que está de acuerdo con el experimento, se obtiene la evidencia de la existencia de electrones itinerantes del tipo 3d. El resto de las otras bandas 3d son bandas planas de electrones localizados. Otros datos que se pueden obtener por simple inspección de la figura 32.7 son que en el centro de la zona de Brillouin las bandas 3d están doblemente y triplemente degeneradas.

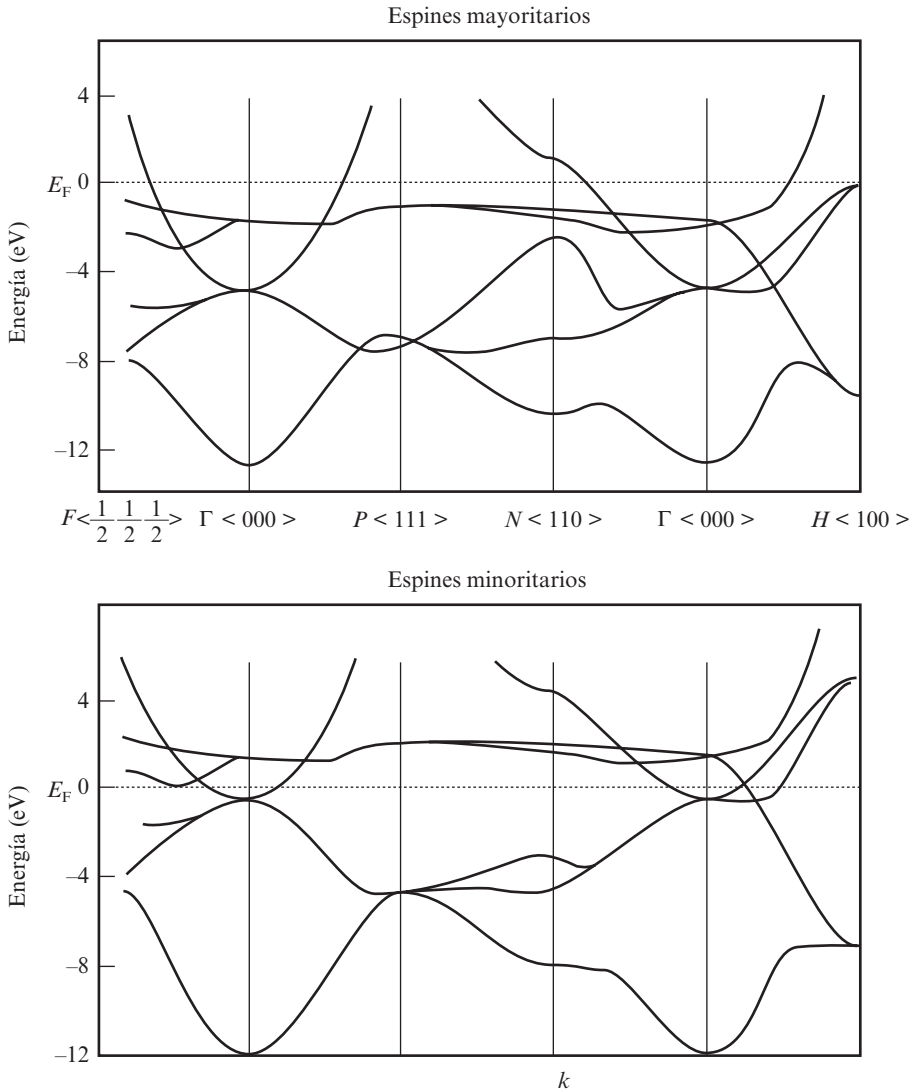


Figura 32.7. Representación parcial de las superficies de Fermi de las dos subbandas del Fe y de las estructuras de las bandas d y s en la primera zona de Brillouin.

Hemos visto lo complicado que resulta explicar por qué en la serie de los ET 3d se pasa de antiferro a ferro. Mucho más complicado, y fuera del contexto de este libro, sería explicar por qué precisamente es en esta serie en la única en que se produce el orden magnético espontáneo y concretamente a partir del Cr (elemento que por sí solo presenta unas peculiaridades que le hacen distinto a todos los demás). Lo único que podemos añadir es que un adecuado balance de varias interacciones y parámetros, que sólo se producen en estos elementos, es el que posibilita la aparición del orden magnético espontáneo. Es curioso observar que el origen de las propiedades magnéticas del Fe, conocidas desde hace muchos siglos, siga siendo demasiado complicado como para poderse explicar en unas pocas líneas.

EJERCICIOS

32.1. Demostrar, utilizando la estadística clásica de Boltzmann, que un conjunto de partículas cargadas en equilibrio térmico a las que se les aplica un campo magnético exterior tienen imanación nula.

32.2. Demostrar que las funciones ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_3 y ϕ_4 , dadas por las expresiones [32.2.1], son ortonormales.

32.3. Obtener la representación del hamiltoniano [32.2.2] a partir de las funciones base cuya expresión viene dada por las expresiones [32.2.1].

32.4. Escribir la parte de espín y calcular los números cuánticos S y m_s de las cuatro funciones de onda del singlete y del triplete del estado fundamental de dos electrones en un núcleo.

32.5. Conociendo los operadores de espín σ_1 y σ_2 , calcular la expresión [32.2.3].

32.6. Dar un orden de magnitud de la interacción dipolar magnética entre dos electrones separados una distancia de 2 \AA y compararla con la energía de tipo térmico a la temperatura de Curie del Fe (1.043 K).

33

Superconductividad

José Luis Vicent

33.1. FENOMENOLOGÍA DE LA SUPERCONDUCTIVIDAD

Uno de los efectos más espectaculares de la física del estado sólido es el efecto superconductor. La superconductividad produce efectos cuánticos macroscópicos, siendo un campo perfecto para estudiar aspectos básicos en la física cuántica.

Empezaremos este capítulo describiendo los fenómenos que caracterizan un superconductor.

En 1911, Kamerlingh Onnes descubre que el Hg conduce sin resistencia cuando se enfría a temperatura del He líquido (4.2 K). Kamerlingh Onnes fue el primer físico que licuó el He. Poco tiempo después de esto, midiendo resistividades de distintos metales a estas bajas temperaturas en su laboratorio, se encontró que el Hg a 4.2 K conduce sin resistencia, no con una resistencia despreciablemente pequeña, sino con resistencia cero.

Una primera característica de la superconductividad es la nula resistividad por debajo de una cierta temperatura.

Aunque se pudiera pensar que esto es una excepción, resulta que el número de elementos y materiales superconductores es muy grande. El sistema periódico está lleno de elementos que, si se disminuye suficientemente la temperatura, se convierten en superconductores. En realidad, la pregunta no sería por qué un elemento es superconductor, más bien hay que preguntarse por qué no lo es. Ahora bien, las temperaturas a las cuales ocurre el efecto son extraordinariamente bajas. La mayoría de los superconductores tienen temperaturas de transición que están en el rango del He líquido (4.2 K), lo cual quiere decir que el efecto es muy débil. Esto hay que matizarlo a la vista de los superconductores recientemente descubiertos (1986), llamados de alta temperatura (véase apéndice I). En este capítulo no haremos ninguna referencia a estos nuevos superconductores.

Ahora bien, un superconductor es bastante más que un conductor perfecto. En 1913 se comprobó que si se aplica un campo magnético exterior al material en estado superconductor, se terminaba por destruir el estado de conducción perfecta. Este campo, cuyo valor depende de la temperatura, se llama campo crítico. Tenemos así el primer indicio de que la interacción superconductividad-magnetismo desempeña un papel primordial en los fenómenos superconductores.

La siguiente característica fundamental de un superconductor consiste en que cuando el campo magnético aplicado no es mayor que el campo crítico, un superconductor actúa como un diamagnético perfecto. Esto es $\chi = -1$. Por tanto, no existen líneas de campo

magnético en el interior de un material superconductor, salvo en una pequeña zona próxima a la superficie. Este efecto se conoce con el nombre de efecto Meissner-Ochsenfeld.

Así, la segunda característica del efecto superconductor es el diamagnetismo perfecto (efecto Meissner).

Otra característica típica de la superconductividad es que el flujo del campo magnético que atraviesa un anillo superconductor está cuantizado. Es decir, el flujo que atraviesa un superconductor vale un número entero de veces una unidad de flujo elemental llamada fluxoide Φ_0 cuyo valor es $\Phi_0 = hc/2e$, donde h es la constante de Planck, c la velocidad de la luz y e la carga del electrón.

Por tanto, la tercera característica de la superconductividad es que el flujo magnético que atraviesa un superconductor está cuantizado.

Existe otro efecto cuántico macroscópico asociado a la superconductividad, conocido como efecto Josephson. Éste es un efecto túnel muy especial. Si se separan dos superconductores distintos, o bien el mismo superconductor, por una barrera, por ejemplo, un aislante o un estrechamiento en el superconductor (lo que se conoce como una unión débil), se tiene paso de corriente por la barrera sin que aparezca caída de potencial a ambos lados de ella.

La cuarta característica de la superconductividad es el efecto Josephson, esto es, la existencia de un efecto túnel superconductor.

Existen otros efectos que completan el panorama experimental de la superconductividad, pero los básicos que aparecen siempre son los señalados unas líneas arriba. El resto de fenómenos experimentales superconductores se detallan en la siguiente sección.

33.2. LA TEORÍA BCS

En 1957, John Bardeen, Leon Cooper y J. Robert Schrieffer encontraron la llave para poder explicar, desde un punto de vista microscópico, la superconductividad. Realmente existen bastantes materiales que se desvían de la teoría estricta BCS, como pueden ser aleaciones, compuestos y algunos elementos (el mismo Hg, donde se descubrió la superconductividad, es un ejemplo de superconductor que no cumple los estrictos requisitos de la teoría BCS).

Esto no significa que la teoría sea incorrecta, tan sólo que es algo incompleta y para tratar algunas situaciones hay que recurrir a levantar alguna de las aproximaciones que esta complicada teoría lleva consigo.

Empezaremos por repasar alguno de los hechos experimentales en que se basa la teoría y señalar algún otro que hasta el momento no ha sido mencionado.

En principio lo más característico de la superconductividad, como ya hemos repetido varias veces, es que por debajo de una cierta temperatura, y en ciertas condiciones de densidad de corriente eléctrica y campo magnético aplicado, no se tiene resistencia, es decir, que los electrones de conducción no cambian su momento, su k . Pero no es ésta la única característica fundamental de un superconductor, también sabemos que un superconductor es un diamagnético perfecto y este efecto, conocido como efecto Meissner, nos

indica que un superconductor es mucho más que un conductor perfecto. Si recordamos en qué consiste el efecto Meissner, tenemos que cuando enfriamos un superconductor por debajo de la temperatura crítica en presencia de un campo magnético menor que el crítico, el campo magnético es excluido del superconductor y este estado es de equilibrio termodinámico. En un conductor perfecto el campo magnético quedaría atrapado en el material sin que haya ninguna razón para que sea expulsado, basta con recordar las ecuaciones de Maxwell para verlo.

Por tanto, estamos en una situación bastante especial. Como veremos en su momento, a un superconductor lo que le caracteriza es una función de onda macroscópica que da lugar a una corriente cuántica macroscópica, y el efecto Meissner es justamente la expulsión del flujo magnético por esta corriente cuántica. No vamos a decir nada más acerca del efecto Meissner desde el punto de vista microscópico, dado lo complicado que es. Por el contrario, la conducción sin resistencia eléctrica se puede deducir de una manera mucho más sencilla con el formalismo de la teoría microscópica BCS.

Como se ha señalado unas líneas más arriba, aparte de estos dos hechos fundamentales del efecto superconductor (conducción eléctrica sin resistencia y diamagnetismo perfecto) hay otros fenómenos experimentales propios de los superconductores que son cruciales y marcan la pauta a la teoría BCS, como es el efecto isotópico, efecto con el que empezaremos.

Se observa experimentalmente que la temperatura crítica T_c superconductor, por ejemplo, en el Hg (primer superconductor y primer efecto isotópico encontrado), depende de la masa de los iones en el metal. Dado que existen varios isótopos del Hg, se pudieron preparar varias muestras, y se comprobó experimentalmente que si M es la masa del ion, se tiene que $T_c \propto M^{-\alpha}$, donde el exponente α es del orden de 0.5 para metales que no son de transición y puede ser menor que este valor para metales de transición; incluso existen casos especiales, como es el Os, donde vale cero, no existiendo efecto isotópico para esta excepción. Este efecto experimental tiene una interpretación bien sencilla: los iones de la red desempeñan un papel fundamental en la superconductividad.

Existe otro grupo de fenómenos experimentales asociados al estado superconductor que pasaremos a describir a continuación, todos ellos con el mismo origen:

1. El calor específico electrónico de un metal no superconductor a muy baja temperatura varía linealmente con la temperatura. En un metal existen dos contribuciones al calor específico, una de ellas es la normal de la red (recordar la sección 29.3). Esta contribución varía como T^3 y prácticamente desaparece a bajas temperaturas (ver de nuevo la sección 29.3). Existe otra contribución al calor específico propia de los metales. A esta contribución, que es la predominante a bajas temperaturas, es a la que nos referimos, y varía como T .
2. Un metal en estado normal no es transparente a la radiación visible e infrarroja.

Por el contrario, en un metal en el estado superconductor se tiene:

1. La variación del calor específico en función de la temperatura sigue una ley exponencial.

2. En un metal en estado superconductor existe, en el rango del infrarrojo lejano, una frecuencia de corte para la cual el metal es transparente a esa radiación.

Estos dos efectos en superconductores son la clara señal de que en un superconductor existe una zanja prohibida de energía que, como veremos en su momento, no es del mismo tipo que la que existe en semiconductores. Otra comprobación experimental de este hecho son las anomalías en el efecto túnel, conocido como túnel Giaver (véase la sección 33.3).

Resumiendo, existen dos hechos experimentales cruciales para entender la superconductividad. Uno de ellos es que la masa de los iones desempeña un papel fundamental (efecto isotópico). El segundo es que en un superconductor existe una zanja prohibida de energía, esto es, que mientras que en un metal en estado normal no se necesita una energía umbral para tener estados excitados por encima del estado fundamental, en un metal en estado superconductor se necesita comunicar una cierta energía por encima de un cierto valor, el valor de la zanja, para tener a los electrones en estados excitados de energía.

Por tanto, simplificando, cualquier teoría microscópica de la superconductividad tiene que dar cuenta de:

1. Conductividad infinita, esto es, ausencia de resistividad.
2. Intervención de los iones de la red cristalina, más precisamente de sus masas, esto es, de los fonones, es decir, de las diferentes vibraciones de la red cristalina.
3. La existencia de una zanja de energía en la banda de conducción.

A partir de ahora solamente vamos a centrarnos en descubrir la posible interacción responsable de que un metal conduzca sin resistencia eléctrica por debajo de una cierta temperatura.

Lo primero de todo es recordar lo visto en la sección 31.2, esto es, en qué consiste la resistividad. Allí veíamos que los electrones de conducción, por su movimiento al azar en una red cristalina, donde los iones están vibrando (fonones), cambian su momento, \mathbf{k} , esto es, la interacción electrón-fonón es la que produce la resistividad. Que un metal conduzca sin resistencia eléctrica querrá decir que los electrones de conducción en su movimiento en el cristal no cambian su vector \mathbf{k} .

Se trata, por tanto, de encontrar una interacción en los electrones de conducción que nos produzca este efecto. En un cristal contamos aparentemente con pocos recursos; por un lado tenemos electrones de conducción e iones que forman la red cristalina y que están vibrando de otra forma con electrones y fonones y con una interacción fundamental entre estas cargas eléctricas, que es la interacción coulombiana. Pues bien, son estos únicos ingredientes los necesarios para construir la teoría BCS, electrones, fonones e interacción coulombiana.

La interacción coulombiana electrón de conducción-red cristalina (iones) se puede ver esquemáticamente de la siguiente forma. Supongamos un electrón de conducción que se mueve por el cristal y fijémonos en un punto concreto de la red, formada por iones positivos (cationes). Al pasar el electrón por ese punto, la red, por interacción coulombiana, se sentirá atraída por ese electrón y se deformará localmente. Ya que las frecuencias de vibración de la red (de los fonones) son del orden de 10^{-13} s^{-1} y las velocidades de los

electrones de conducción son del orden de 10^{16} $\text{\AA}/\text{s}$, ocurrirá que cuando la red vuelva a su posición de equilibrio el electrón que la ha deformado se encontrará muy lejos, del orden de 10^3 \AA , esto es, del orden de varios cientos de parámetros de la red del ion que ha dejado fuera de su posición de equilibrio. Esto es así porque las velocidades de los electrones de conducción en su movimiento al azar, velocidades de Fermi, son muy grandes comparadas con los tiempos de relajación de la red, ligados a las frecuencias de los fonones. El segundo paso en este mecanismo es muy sencillo: mientras que la red está deformada, por sus cercanías pasan muchos otros electrones de conducción, que se sienten más «cómodos», más atraídos por la red, que si ésta no estuviera deformada. En resumen, se puede establecer una cierta conexión, una cierta interacción atractiva, entre los electrones de conducción vía los fonones (vibraciones de la red), esto es, un electrón de conducción deforma la red y un segundo electrón de conducción se siente atraído por esta deformación y en cierta manera «ligado» al primer electrón, electrón que puede estar físicamente muy alejado del primero. Esta idea de cómo una interacción de corto alcance electrón-fonón puede dar lugar a una interacción de largo alcance electrón-electrón se debe a Fröhlich (1950), y es la base de la teoría de la superconductividad.

En principio, tenemos un posible mecanismo de interacción atractiva entre electrones de conducción vía fonones que, de momento, no parece que tenga mucho que ver con la superconductividad. Antes de seguir avanzando hay que recordar el papel que tiene la interacción coulombiana repulsiva directa entre los electrones de conducción. Ahora bien, esta interacción coulombiana repulsiva va como $1/r^2$, siendo r la distancia entre los electrones, es decir, que disminuye rápidamente con la distancia. Luego se tendrá que la interacción neta entre los electrones de conducción será la suma de estas dos interacciones, una repulsiva, que es la que podríamos decir normal, y otra vía fonón, que es atractiva. La interacción neta será atractiva solamente cuando estemos haciendo el balance entre electrones cuya interacción coulombiana repulsiva sea muy pequeña, es decir, entre electrones muy alejados unos de otros. Este caso se puede dar, como hemos resaltado unas líneas más arriba, ya que todavía se puede tener una ligadura vía fonones entre electrones muy alejados, varios cientos de parámetros de red con interacción repulsiva coulombiana muy pequeña.

Una vez entendido lo que antecede, lo que sigue es muy sencillo. El siguiente paso lo da Cooper, que demuestra que si se tienen dos electrones que interactúan con una interacción atractiva neta, es decir, negativa, aunque ésta sea todo lo pequeña que se quiera, el mar de Fermi de los electrones de conducción es inestable y se produce un estado ligado con momentos \mathbf{k} y espines opuestos, llamado par de Cooper. Bardeen, Cooper y Schrieffer, trabajando juntos, escriben un hamiltoniano y el estado fundamental formado por la condensación de parejas de electrones, pares de Cooper, de tal manera que son capaces de desarrollar expresiones para la temperatura crítica superconductor, deducen la existencia de una zanja de energía en los superconductores, tal que para romper una pareja de electrones ligados vía la interacción con los fonones de la red hay que suministrar una energía superior o igual a la de esa zanja, y, asimismo, deducen el efecto isotópico. Por último, queda ver de dónde se obtiene conducción eléctrica sin resistencia con esta teoría, es decir, sin que los electrones de conducción cambien de momento (esto es, \mathbf{k}). Hay que señalar que el estado fundamental propuesto por la teoría BCS no está formado

por un conjunto de parejas de Cooper cualesquiera, es algo muy complicado, de tal manera que la interacción atractiva entre electrones, que produce una inestabilidad en el mar de Fermi, hace que se condensen pares de Cooper, estando la función de onda superconductor formada por todos los pares de Cooper. Los pares no actúan independientemente unos de otros, y para romper un par, esto es, para convertir a los dos electrones en electrones, digamos, «normales», hay que suministrar energía (la correspondiente a la zanja) de tipo térmico, subiendo la temperatura, o bien de tipo magnético, aplicando un campo magnético, etc. Mientras no se suministre una energía superior a la de la zanja, los electrones superconductores están formando pares de Cooper, es decir, se mueven con momento k bien determinado y no lo cambian, esto es, conducen sin resistencia, a no ser que se rompan los pares, que, no lo olvidemos, no son independientes. Ahora bien, estos electrones se están moviendo en un sólido, en una red cristalina, que estará a una cierta temperatura (por debajo, por supuesto, de la temperatura crítica) que no es suficiente para romper los pares. Por tanto, verán fonones e interaccionarán con ellos. ¿Cómo es posible que un electrón de una pareja que interacciona con un fonón (de energía menor de la necesaria para romper el par) no cambie su momento? Esto es debido a que los pares están interrelacionados y el resto se acomoda para hacer posible que en su conjunto la k no varíe. Aquí se puede utilizar una imagen debida a Schrieffer. Supongamos que tenemos un conjunto de esquiadores, la mitad hombres y la mitad mujeres, que bajan una pendiente cogidos de la mano, hombre con mujer (aquí tenemos los pares de Cooper); pero estas parejas no bajan cada una por su lado, sino que lo hacen al mismo tiempo y de alguna manera enlazadas, de tal forma que si algún miembro de una pareja se encuentra en el camino un obstáculo (un fonón), siempre que no sea muy importante (de energía menor que la de la zanja), el conjunto de pares aguantará el golpe y hará posible que se siga bajando sin perder velocidad, sin cambiar k , sin resistencia.

Resulta llamativo que la interacción electrón fonón sea el origen de la resistividad y que la interacción electrón-fonón-electrón que acabamos de bosquejar resulte el origen de la superconductividad.

No resulta nada simple desarrollar, utilizando el formalismo adecuado, las ideas expuestas en las líneas anteriores, pero, por ejemplo, la función de onda superconductor y algunos otros detalles se pueden tratar explícitamente en el marco de este capítulo.

Sin duda existen aspectos que pueden parecer caprichosos en la descripción que acabamos de hacer. Uno de ellos es que las parejas de Cooper estén formadas por electrones con momentos opuestos y con espines también opuestos. Esto es muy fácil entenderlo.

El esquema de la teoría BCS, en sus primeros pasos, es bien simple. Se parte de considerar como el núcleo de la teoría la interacción electrón-fonón-electrón. Esto se puede representar de la siguiente forma: el primer electrón llega a un punto de la red, la atrae y hace que «vibre»; esto en nuestro lenguaje se dice que emite un fonón. El segundo electrón «ve» este fonón y lo absorbe, acoplándose así con el primer electrón, es decir, los electrones se acoplan intercambiando un fonón. Esto se puede representar con uno de los típicos diagramas de Feynman, como se ve en la figura 33.1. Este tipo de esquemas se encuentra en otras interacciones en la Naturaleza. Por ejemplo, en el núcleo atómico tenemos este mismo caso en el intercambio de mesones π virtuales que produce atracción entre nucleones.

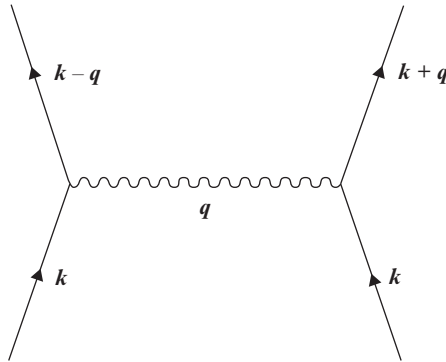


Figura 33.1. Diagrama de Feynman de la interacción electrón-fonón-electrón.

Ahora, ¿cuál será el tipo de electrones y fonones que están interactuando? En principio, los electrones, claramente, son los de la banda de conducción, con energías del orden de unos pocos electrón voltio. Los fonones disponibles tienen unas energías que son como máximo del orden de la energía de Debye (recordar la sección 29.3). Dado que la temperatura de Debye suele ser del orden de algo más del 100 K, se tiene que las energías de los fonones disponibles son de unos pocos milielectrón voltio, esto es, muy pequeñas comparadas con la de los electrones. Se tiene que la capa de los electrones de conducción en la esfera de Fermi que intercambian fonones, según este esquema, es una franja muy estrecha.

Si llamamos $\hbar k$, $\hbar k'$ y $\hbar k_1$, $\hbar k'_1$ a los momentos de los electrones antes y después de la interacción, la ley de conservación del momento nos dice que

$$\hbar k_1 + \hbar k'_1 = \hbar k + \hbar k' = \hbar K$$

donde hemos llamado K al momento del centro de masas de los electrones. Conviene aprovechar este punto para indicar el convenio habitual en cuanto al signo de la energía de los electrones. Se toman como energías positivas los valores de la energía superiores a la energía de Fermi y como energías negativas los valores inferiores a la energía, E_F , de Fermi, es decir, que ε_k será negativa si k está dentro de la superficie de Fermi, y positiva en caso contrario. Está claro que los únicos electrones que pueden intervenir en todo este proceso son los que tienen energías próximas a la de Fermi, dado que solamente estos electrones pueden tener estados libres accesibles sin violar el principio de exclusión de Pauli. Por tanto, solamente estamos considerando como candidatos a electrones superconductores unos pocos de todos los de la esfera de electrones de conducción de Fermi, aquellos que están en una estrecha franja de espesor $\hbar\omega_D$, donde ω_D es la frecuencia de Debye, por tanto, del orden de unos pocos milielectrón voltio de la energía de Fermi. En esta situación se conserva el momento $\hbar K$ del centro de masas de los dos electrones. En la figura 33.2 se representa gráficamente todo lo que acabamos de decir. Además, se observa en esta figura que son, dentro de la estrecha franja, muy pocos los electrones que cumplen

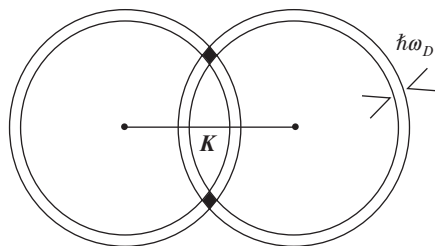


Figura 33.2. Construcción geométrica de los posibles electrones candidatos para formar pares de Cooper, siendo $\hbar\mathbf{K}$ el momento del centro de masas.

todas las condiciones y, por tanto, pueden ser candidatos a formar pares de Cooper. Solamente los electrones cuyos momentos caen en la intersección de las dos capas esféricas son los posibles electrones superconductores. Es fácil ver que si disminuimos el valor del momento del centro de masas del sistema, la intersección aumentará, y se hará máxima si hacemos $\mathbf{K} = 0$, donde toda la franja está formada por posibles pares de Cooper. Es decir, los pares de Cooper se forman con electrones de momentos opuestos, como ya habíamos anticipado unas líneas más arriba, esto es

$$\mathbf{k}, -\mathbf{k}$$

Además, este argumento que acabamos de desarrollar está apoyado en que la energía del sistema disminuye al ir formándose pares, lo que se puede demostrar, pero no de una manera fácil.

Otro aspecto de los señalados anteriormente que podemos abordar ahora es que los pares estaban formados por electrones no sólo con momentos opuestos, sino también con espines opuestos. Esta última característica es ahora muy fácil de tratar, dado que los electrones son fermiones, es decir, cumplen el principio de exclusión de Pauli y tienen funciones de onda antisimétricas. Se puede demostrar que la parte orbital (es decir, olvidándose de la parte de espín) de la función de onda de los pares de Cooper depende tan sólo del módulo del momento. Por tanto, frente al intercambio de la posición de los dos electrones del par se tiene una función simétrica. Luego la parte de espín debe de ser antisimétrica, es decir, los espines de la pareja son opuestos. Se tiene que un par de Cooper está formado por dos electrones, tales que

$$\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow$$

En este punto surge uno de los peligros típicos de la teoría BCS que pone de manifiesto la gran cantidad de sutilezas que encierra. Dado que un par de Cooper es una entidad cuyo espín es cero (si recordamos el capítulo 16, partículas con espín cero son bosones), es fácil caer en la tentación de tratar a los pares de Cooper como bosones. Además, hemos indicado que un número creciente de pares de Cooper es energéticamente favorable. Ahora bien, el principio de Pauli sigue vigente: así, el estado formado, por

ejemplo, por $k\uparrow, -k\downarrow$ no puede estar ocupado por más de un par de electrones al mismo tiempo. En la figura 33.3 se representa la situación del estado fundamental para tres pares de Cooper. Además, entrando en detalles más técnicos, los operadores con los que se construye el hamiltoniano de la teoría BCS no siguen las reglas de conmutación de los operadores de bosones. De todas formas, resulta llamativo, y conviene resaltarlo, que la electrodinámica bosónica reproduce muy bien el comportamiento superconductor; por ejemplo, la teoría clásica de la superconductividad de London (que no hemos tratado en este capítulo) se puede deducir de un gas cargado de bosones y de allí se puede extraer de una manera natural el efecto Meissner. Resumiendo, los pares de Cooper no son bosones.

Pasaremos a continuación a describir de la manera más sencilla posible la función de onda del estado fundamental superconductor y algunas de las expresiones de la teoría BCS.

La función de onda del estado fundamental de N electrones, según la propone la teoría BCS, es el producto de funciones de onda de pares convenientemente antisimetrizadas, que se puede representar por

$$\phi(1, 2, \dots, N) \propto \phi(1, 2)\phi(3, 4) \cdots \phi(N - 1, N)$$

Si no escribimos explícitamente la parte de espín y sólo lo hacemos con la parte orbital, tendríamos

$$\phi(1, 2, \dots, N) \propto \sum_{k_1} \sum_{k_2} \cdots \sum_{k_{N/2}} g_{k_1} \cdots g_{k_{N/2}} e^{i(k_1 r_1 - r_2 k_2 + \cdots + k_{N/2} r_{N-1} - k_{N/2} r_N)}$$

donde cada término de esta función de onda describe una configuración donde los N electrones se agrupan en $N/2$ pares, que son

$$(k_1, -k_1) \cdots (k_{N/2}, -k_{N/2})$$

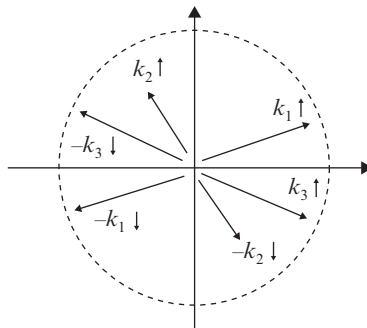


Figura 33.3. Representación de tres pares de Cooper.

La parte de espín es inmediata y cada electrón de cada par tiene espines opuestos. Como vemos, la función de onda es una función complicada que abarca todos los pares relacionados entre ellos. También se puede escribir de una manera más compacta como

$$\phi = \prod_k \phi_k$$

Antes de continuar merece la pena señalar algún otro aspecto de los pares de Cooper. Estos pares están fuertemente relacionados entre sí, de tal manera que se puede decir que del orden de un millón de pares tienen sus centros de masas dentro del espacio en el que se extiende un par dado, esto es, los pares de electrones que forman un par de Cooper están muy alejados uno del otro, estando fuertemente correlacionados unos pares con otros. Se puede demostrar que la disminución de la energía en la fase superconductora respecto al estado normal, debida a la interacción entre pares, depende de cómo se elijan esos pares. El conjunto de pares de Cooper no son independientes unos de otros, están muy correlacionados.

Otro punto que hay que aclarar en lo anterior es que estamos considerando el caso en que no tenemos corriente eléctrica neta, ya que los electrones apareados tienen momento total cero. Los estados portadores de corriente superconductora son aquellos en que los pares tienen momentos que serán

$$\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2} \uparrow, -\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2} \downarrow \right)$$

y los electrones tendrán una velocidad de arrastre neta, que será

$$v_a = \frac{\hbar \mathbf{q}}{2m}$$

Otro aspecto importante de la teoría BCS es que predice la existencia de una zanja de energía Δ , zanja que se puede medir experimentalmente y que está relacionada con la temperatura crítica por la ecuación BCS, que escribiremos como final de esta sección. Este parámetro Δ es el parámetro crucial de la teoría BCS de la superconductividad y es precisamente el valor de la zanja prohibida de energía que acompaña la aparición del estado superconductor.

Hay que resaltar que esta zanja reúne unas características muy particulares. Por lo pronto, se diferencia claramente de las zanjás que desempeñan un papel importante en sólidos, especialmente en los semiconductores. En superconductores, tenemos una zanja que está situada en la banda de conducción y que tiene una marcada dependencia con la temperatura. Asimismo, mientras que en un semiconductor se necesita excitar por encima de la zanja a los electrones para tener conducción eléctrica, en un superconductor se tiene

la supercorriente sin necesidad de tener estados excitados, se tiene conducción eléctrica por debajo del nivel de Fermi, esto es, por debajo de la zanja que existe en la banda de conducción.

Este parámetro Δ aparece en la sencilla e importante relación que se obtiene en la teoría BCS

$$2\Delta(0) = 3,52k_B T_c$$

donde T_c es la temperatura crítica superconductor.

Para finalizar, un resumen general de la teoría BCS.

1. Interacción atractiva entre electrones.
2. Mar de Fermi inestable.
3. Posible formación de estados ligados de dos electrones.
4. Condensación de parejas de electrones, pares de Cooper ($\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow$).
5. Aparición de una zanja de energía (para romper los pares hay que suministrar esa energía).
6. Temperatura crítica superconductor BCS ligada al valor de la zanja de energía prohibida.

33.3. EFECTOS CUÁNTICOS MACROSCÓPICOS EN SUPERCONDUCTOR: CUANTIZACIÓN DEL FLUJO MAGNÉTICO Y EFECTO JOSEPHSON

La superconductividad es un campo de la Física donde las leyes cuánticas que gobiernan el comportamiento de la Naturaleza se pueden observar a escala macroscópica. El origen de este espectacular efecto veremos que es único, pero existen dos aspectos experimentales en los que se manifiesta. Uno de ellos está ligado a efectos magnéticos y el otro a fenómenos en la densidad de corriente superconductor. El primero de ellos es la cuantización del flujo magnético y el segundo el efecto Josephson. Empezando por el primero de estos efectos cuánticos macroscópicos, se tiene que el flujo magnético es siempre un número entero de veces el valor de un flujo elemental, conocido con el nombre de fluxoide. Es decir, que el flujo que atraviesa un material superconductor es siempre 1, 2 o 500 fluxoides, pero nunca puede ser una cantidad cualquiera, siempre un número entero de fluxoides.

Pasemos a continuación a demostrar este efecto y encontrar el valor del fluxoide.

En la teoría de Ginzburg-Landau de las transiciones de fase se introduce el concepto de parámetro de orden, que es una magnitud que aparece acompañando a la transición. Un ejemplo típico de parámetro de orden es la imanación de saturación, que es la magnitud que aparece cuando se tiene la transición de fase del estado paramagnético al ferromagnético. En el caso de una transición superconductor, el parámetro de orden es una función compleja cuyo módulo al cuadrado nos da la densidad de electrones superconductores que aparecen al pasar el metal del estado normal al superconductor. En el estado

normal, el parámetro de orden (densidad de electrones superconductores) se desvanece, desaparece.

Esta función compleja se escribe

$$n_s = |\psi|^2$$

donde n_s es la densidad de electrones superconductores.

Se puede escribir explícitamente el módulo y la fase de esta función

$$\psi = |\psi|e^{i\varphi}$$

Por otro lado, sabemos que la cantidad de movimiento de una partícula de masa m^* y carga e^* en presencia de un campo magnético representado por su potencial vector \mathbf{A} , se escribe como

$$\mathbf{p} = m^*\mathbf{v} + \frac{e^*}{c}\mathbf{A}$$

Si tenemos una densidad de partículas, todas ellas teniendo la misma cantidad de movimiento \mathbf{p} , podemos escribir

$$n_s\mathbf{p} = n_s\left(m^*\mathbf{v} + \frac{e^*}{c}\mathbf{A}\right)$$

Recordando el operador cantidad de movimiento en su expresión equivalente,

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$$

tendremos

$$\mathbf{p} = \hbar\nabla\varphi = m^*\mathbf{v} + \frac{e^*}{c}\mathbf{A}$$

Recordando la expresión general de la densidad de corriente eléctrica en función de la densidad de portadores, de la carga y de la velocidad promedio, se puede escribir

$$\mathbf{J} = n_s e^* \mathbf{v}$$

que en nuestro caso será

$$\hbar\nabla\varphi = \frac{m^*}{n_s e^*} \mathbf{J} + \frac{e^*}{c} \mathbf{A}$$

Con esta expresión estamos preparados para demostrar la cuantización del flujo magnético en superconductores. Para ello, basta con recordar algo trivial, como es que el parámetro de orden superconductor sólo puede tener un único valor en cada punto, esto es, la densidad de electrones superconductores debe ser única en cada punto. Esta simple consideración se materializa en que podemos escribir

$$\varphi(2\pi) - \varphi(0) = n2\pi$$

Recordando la definición de circulación y de gradiente y siendo C un camino cerrado, la expresión anterior la podemos escribir como

$$\oint_C \nabla\varphi \, dl = n2\pi$$

Si ahora suponemos que este camino C está en el interior de un superconductor, alejado de los bordes y rodeando a un hueco, como se representa en la figura 33.4, y suponemos también que tenemos aplicado un campo magnético a este superconductor, se tiene

$$\oint_C \left(\frac{m^*}{\hbar n_s e^*} \mathbf{J} + \frac{e^*}{\hbar e} \mathbf{A} \right) dl = n2\pi$$

Dado que estamos en un camino interior al superconductor y allí no existe corriente (las únicas corrientes que existen en una situación como la que estamos describiendo, están apantallando el campo magnético y situadas cerca de los bordes, tanto de la cavidad como de la superficie del material superconductor), tendremos

$$\oint \mathbf{A} \, dl = \frac{nhc}{e^*}$$

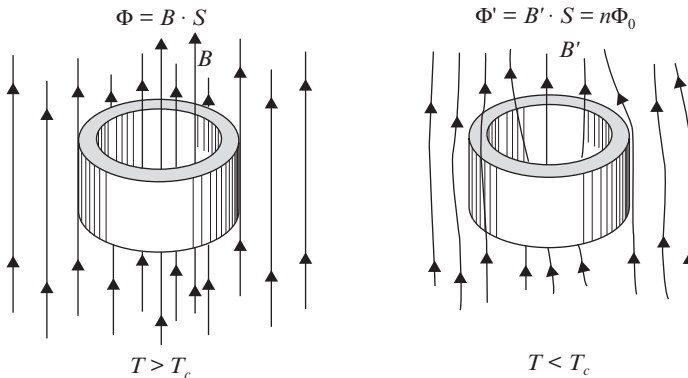


Figura 33.4. Cuantización del flujo magnético.

Recordando el teorema de Stokes, se tiene

$$\oint_C \mathbf{A} d\mathbf{l} = \iint_S \mathbf{B} d\mathbf{s} = \Phi$$

que en nuestro caso será

$$\Phi = n\Phi_0$$

expresión que nos indica que el flujo magnético que encierra la cavidad es un número entero de un flujo elemental conocido con el nombre de fluxoides, cuyo valor es

$$\Phi_0 = \frac{hc}{2e} = 2.07 \cdot 10^{-7} \text{ gauss} \cdot \text{cm}^2$$

siendo e^* la carga del portador de corriente, el par de Cooper $e^* = 2e$.

Este efecto fue encontrado experimentalmente de forma simultánea en 1961 por Deaver-Fairbanks y por Döll-Nabauer.

El efecto túnel es un efecto típico del carácter cuántico de los electrones; desde el punto de vista de la Física clásica es completamente imposible que se produzca el efecto que vamos a discutir.

Los electrones se pueden representar por funciones de onda, de tal manera que existe una cierta probabilidad de que un electrón pueda ir de un metal a otro atravesando una barrera aislante estrecha, que puede ser el vacío o un óxido. La función de onda del electrón decae de una manera exponencial fuera de la superficie del metal; la amplitud de la onda no es totalmente nula fuera del metal, es como si el electrón se desparramase fuera de la superficie. Si situamos un metal junto a otro, separados tan sólo por una barrera, como puede ser, por ejemplo, el óxido de la superficie, existe una probabilidad pequeña, pero no nula, de que el electrón atraviese ese túnel y aparezca al otro lado, en el otro metal.

Antes de seguir hay que hacer notar que la energía necesaria para hacer pasar un electrón que está en el nivel de Fermi de un metal al vacío (función de trabajo del metal) es mayor que la energía necesaria para transferir ese electrón a un aislante.

Por razones de simplicidad vamos a hacer toda la discusión siguiente, salvo cuando se diga expresamente lo contrario, para temperatura de 0 K. La figura 33.5 nos indica la situación entre dos partes del mismo metal separadas por un aislante. Todos los estados por debajo de la energía de Fermi están ocupados, mientras que todos los estados por encima de E_F están vacíos.

Para que se pueda tener efecto túnel hacen falta dos condiciones. La primera es que, como es lógico, los electrones solamente pueden ir de un estado ocupado a un estado desocupado, y la segunda es que se tiene que conservar la energía, es decir, que las transiciones, en la gráfica, tienen que ser horizontales. Por tanto, en la situación de la figura 33.5 no tendremos efecto túnel. No se pueden tener transiciones horizontales al no

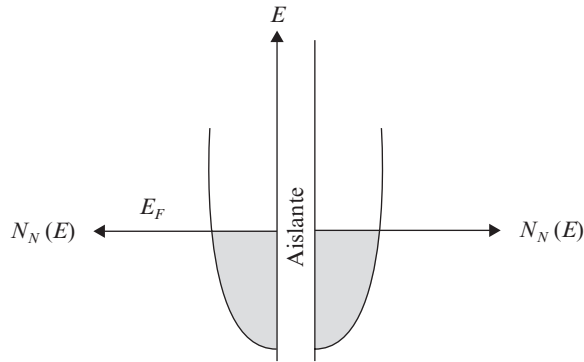


Figura 33.5. Imposibilidad de efecto túnel a través de la barrera.

existir estados vacíos. Todos los estados en el mismo nivel de energía, a ambos lados de la barrera, están ocupados.

Si aplicamos una diferencia de potencial constante a la barrera, lo que estamos haciendo es aumentar la energía de los electrones de un lado de la barrera respecto al otro y, entonces, tenemos la posibilidad de que se tenga corriente por efecto túnel (figura 33.6).

La intensidad de esta corriente túnel depende de varios parámetros. Por ejemplo, a mayor diferencia de potencial aplicada, mayor corriente. Está claro que cuantos más estados tengamos en el nivel de Fermi mayor será la probabilidad de tener corriente túnel, lo cual puede indicar que quizá con experimentos de efecto túnel podemos obtener información sobre este importante parámetro, y en general sobre la superficie de Fermi. Pero como es de esperar, la corriente túnel también depende de la anchura, la altura y la forma de la barrera, y estos parámetros son muy difíciles de determinar, lo cual hace que en metales normales del efecto túnel se obtenga una información mucho menos rica de lo que se podía esperar. Ocurre todo lo contrario con el efecto túnel cuando uno de los dos metales está en estado superconductor, como pasaremos a ver a continuación.

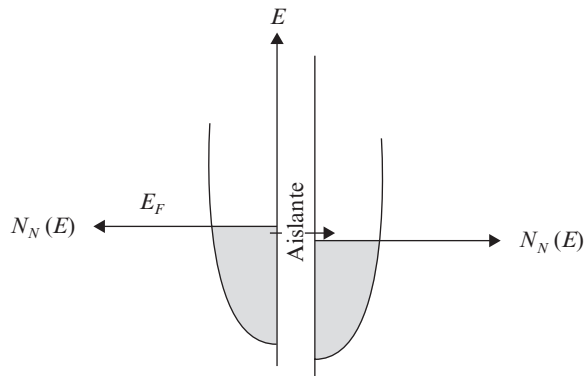


Figura 33.6. Posibilidad de efecto túnel a través de la barrera.

La existencia de una zanja de energía en el estado superconductor (véase figura 33.7) hace que el efecto túnel en una estructura formada por superconductor aislante-metal en estado normal tenga características especiales (Giaver, 1960). Es claro que necesitamos previamente disponer de electrones normales por encima de la zanja superconductor, esto es, hay que romper pares de Cooper, como primera medida, es decir, diferencias de potencial aplicadas menores que la zanja no producirán efecto túnel. Esto quiere decir que diferencias de potencial aplicadas a la barrera no producen corriente túnel, salvo que venzan un valor umbral, que es precisamente el ancho de la zanja. De entrada, ya tenemos una muy importante propiedad del efecto túnel superconductor que nos permite medir la zanja superconductor y la variación de esta zanja con la temperatura.

Otra importante propiedad del efecto túnel es lo que pasa si estudiamos el efecto túnel de dos metales en estado superconductor. Es fácil ver que, entonces, a 0 K tenemos que aplicar una diferencia de potencial para obtener corriente túnel, que será la suma de las dos zanjias de energía. Pero no es sólo esto lo que ocurre cuando separamos dos superconductores por una barrera aislante. Como veremos a continuación, aparece un nuevo efecto túnel exclusivo de los superconductores. Éste es el conocido como efecto Josephson, postulado teóricamente por Josephson (1962) y comprobado experimentalmente por P. W. Anderson y Rowell (1963) y por Shapiro (1963), casi simultáneamente. Éste es un efecto túnel de pares de Cooper entre superconductores, mientras que el efecto túnel tratado en las líneas anteriores es túnel de electrones normales entre superconductores o entre un metal normal y un superconductor. En concreto, la sugerencia de Josephson es que puede existir efecto túnel entre dos superconductores que se encuentren separados por una barrera aislante (en principio más delgada que las tratadas en el efecto túnel normal, también conocido como túnel Giaver), donde la corriente túnel sea debida exclusivamente a pares de Cooper sin que se tenga una diferencia de potencial a través de la barrera.

Se va a seguir la deducción debida a Feynman, por su sencillez y claridad, porque este efecto enunciado unas líneas arriba, que parece casi mágico, se puede deducir en unas pocas líneas.

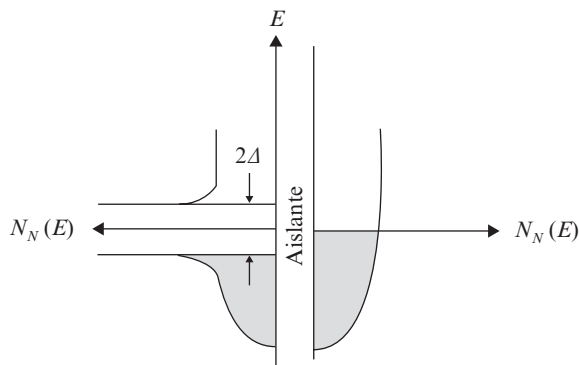


Figura 33.7. Efecto túnel entre un metal y un superconductor (efecto Giaver).

Supongamos que tenemos un superconductor separado en dos partes por un aislante lo suficientemente estrecho como para que la función de onda superconductor a un lado de la barrera penetre algo al otro lado. Sean ψ_1 y ψ_2 las funciones de onda superconductoras a los dos lados de la barrera (1) y (2).

El túnel de pares del lado (2) al (1) aumenta la amplitud ψ_1 de la función de onda de los pares en el lado (1). Supongamos que el ritmo de crecimiento de ψ_1 es proporcional a ψ_2 , amplitud de la función de onda de los pares en el lado (2). Podemos escribir el ritmo de cambio de ψ_1 de la forma

$$A\psi_2$$

donde A es una característica de la barrera y nos da información de la probabilidad de transferencia de pares del lado (2) al lado (1). En realidad, lo que nos dice esta ecuación es que el ritmo de filtración en el lado superconductor (1) es proporcional a ψ_2 .

Podemos escribir la ecuación de Schrödinger para el lado superconductor (1) teniendo en cuenta lo que acabamos de argumentar, como

$$\frac{-\hbar}{i} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = E_1 \psi_1 + A\psi_2$$

donde E_1 es la energía del estado más bajo de energía del superconductor del lado (1).

Análogamente, podemos escribir, para el superconductor del lado (2)

$$\frac{-\hbar}{i} \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = E_2 \psi_2 + A\psi_1$$

Escribiendo explícitamente la función de onda superconductor, tenemos

$$\psi = n_s^{1/2} e^{i\varphi}$$

donde, como ya vimos, n_s es la densidad de electrones superconductores.

Por tanto, las ecuaciones anteriores las podemos escribir como

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar}{i} \frac{1}{2n_{s1}^{1/2}} \frac{\partial n_{s1}}{\partial t} + \hbar \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} n_{s1}^{1/2} &= E_1 n_{s1}^{1/2} + A n_{s2}^{1/2} e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)} \\ \frac{-\hbar}{i} \frac{1}{2n_{s2}^{1/2}} \frac{\partial n_{s2}}{\partial t} + \hbar \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} n_{s2}^{1/2} &= E_2 n_{s2}^{1/2} + A n_{s1}^{1/2} e^{i(\varphi_1 - \varphi_2)} \end{aligned}$$

Si ahora igualamos las partes reales y las partes imaginarias de estas ecuaciones, tenemos

$$\hbar \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} = A \left(\frac{n_{s2}}{n_{s1}} \right)^{1/2} \cos(\varphi_2 - \varphi_1) + E_1$$

$$\hbar \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} = A \left(\frac{n_{s1}}{n_{s2}} \right)^{1/2} \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + E_2$$

$$\frac{\partial n_{s1}}{\partial t} = \frac{-2A}{\hbar} (n_{s1}n_{s2})^{1/2} \sin(\varphi_2 - \varphi_1)$$

$$\frac{\partial n_{s2}}{\partial t} = \frac{2A}{\hbar} (n_{s1}n_{s2})^{1/2} \sin(\varphi_2 - \varphi_1)$$

Si definimos

$$\delta = \varphi_2 - \varphi_1 \quad \text{y} \quad j_0 = \frac{2A}{\hbar} (n_{s1}n_{s2})^{1/2}$$

teniendo en cuenta que el significado de la variación con el tiempo de la densidad de electrones superconductores no es ni más ni menos que una corriente eléctrica a través de la barrera

$$j = j_0 \sin \delta$$

Como hemos hecho todo el cálculo para un mismo superconductor, podemos simplificar $n_{s1} = n_{s2}$. En realidad, todo lo anterior es igualmente válido si tuviésemos a cada lado de la barrera dos superconductores distintos.

Una vez completada la parte de cálculo, podemos pasar ahora a considerar aspectos generales de estas uniones Josephson, que es el nombre con el que se las conoce. De momento existe una clara diferencia entre este efecto túnel y el considerado al principio. En este caso de efecto Josephson tenemos túnel de pares de Cooper, mientras que en el caso anterior el túnel era de electrones individuales. En el efecto Josephson son bastante estrechas del orden o menores que la longitud coherente (tamaño de los pares de Cooper). En realidad, el aislante actúa como un mal superconductor y las funciones de onda de ambos lados se pueden solapar, existiendo una diferencia de fase a ambos lados de la barrera; como resultado de todo esto se establece una corriente continua a través de la barrera. En realidad, se puede demostrar que el mínimo de energía se alcanza cuando las fases se igualan y, por tanto, no se tiene corriente a través de la barrera. Pero basta con aplicar una corriente de una fuente externa, siempre menor que I_0 , para que las fases dejen de ser iguales. Y si esta desigualdad no varía con el tiempo, se tiene, a través de la barrera, una

corriente constante sin que se tenga caída de potencial. No hace falta colocar un óxido, un aislante; para que actúe de barrera se puede utilizar un estrechamiento en el superconductor, producido mediante una técnica conocida como fotolitografía, o cualquier otra técnica que nos produzca que una parte del superconductor esté unida a otra mediante un estrangulamiento lo suficientemente estrecho como para ser una unión débil. También se puede obtener este tipo de uniones débiles con contactos entre superconductores de tipo puntual, o bien separando dos superconductores por una capa delgada de un metal en estado normal. Como acabamos de mencionar, el tamaño de los pares de Cooper es una indicación del orden de magnitud de esta unión débil.

Los órdenes de magnitud de los parámetros que intervienen en el efecto Josephson, para una unión de 1 mm^2 de área $R = 1\Omega$, $I_0 = 1 \text{ mA}$ y $\Delta = 1 \text{ meV}$. Normalmente, las densidades de corriente a través de las uniones son del orden de un millón de veces menores que las densidades de corriente crítica superconductor en un superconductor. Es decir, en general, en un superconductor se tiene que pasar de la densidad de corriente crítica para hacer desaparecer la superconductividad, pero si el superconductor tiene en algún punto una unión débil de densidades de corriente un millón de veces menores, hacen que se tenga caída de potencial en el paso de corriente por la unión.

Si hacemos pasar una corriente mayor que I_0 , aparece una diferencia de potencial, y teniendo en cuenta que al mismo tiempo que este efecto túnel (Josephson) de pares podemos tener el efecto túnel normal (Giaver) de electrones, el resultado se puede ver en la figura 33.8, donde se representa la curva característica I, V . Como sea, la conexión en la realidad entre estos dos túneles depende de las características de la unión y del circuito exterior.

Finalmente, hay que considerar lo que ocurre si aplicamos a la unión Josephson una diferencia de potencial externa constante, V , o, lo que es lo mismo, tenemos una intensidad pasando por la barrera superior a I_0 . El cálculo es análogo al anterior, muy sencillo, y nos conduce a que la intensidad a través de la barrera tiene la expresión

$$I = I_0 \text{ sen } [(\varphi_2 - \varphi_1) + \omega t] = I_0 \text{ sen } [\delta + \omega t]$$

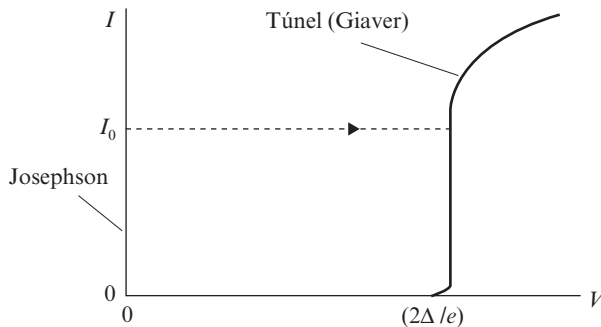


Figura 33.8. Representación de la curva característica a través de una unión entre dos superconductores (efecto Josephson y efecto Giaver).

donde

$$\omega = \frac{2eV}{\hbar}$$

En realidad, el punto de partida de esta deducción es la dependencia con el tiempo de la fase; una diferencia de potencial aplicada a la unión lo que hace es variar en el tiempo la fase, y el ritmo de variación de la fase viene dado por la ecuación

$$\frac{d\delta}{dt} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{qV}{\hbar} = \frac{2eV}{\hbar}$$

Esto en una diferencia de potencial constante aplicada a una barrera Josephson produce una corriente alterna de pares (una supercorriente); por ejemplo, una diferencia de potencial del orden de $1 \mu\text{V}$ da lugar a una corriente que oscila con una frecuencia de 484 MHz. Además de esta corriente de pares tenemos la corriente debida al efecto túnel normal de los electrones individuales. Ahora podemos volver a la figura 33.8, donde tendremos que hasta que se alcanza el valor I_0 tenemos paso de corriente por la unión sin caída de potencial. Una vez que $I > I_0$, entonces aparece un voltaje y nos situamos en un punto de la gráfica del efecto túnel de electrones normales (Giaver). Tenemos una diferencia de potencial aplicada, luego existe túnel normal y además, esto no está representado en la gráfica, tenemos una supercorriente (corriente de pares de Cooper) que está oscilando.

Antes de terminar esta sección, unas palabras acerca de este sorprendente descubrimiento. Como dijimos al principio, el hecho de que una diferencia de fase de una entidad puramente cuántica pueda determinar un efecto macroscópico tan claro como es la aparición de corriente eléctrica no fue descubierto experimentalmente. Fue calculado de una manera completa, incluso indicando la forma de hacer la comprobación experimental, por Brian D. Josephson a la edad de 22 años, cuando estaba empezando a trabajar bajo la dirección de Brian Pippard en su tesis doctoral en el Cavendish Laboratory de la Universidad de Cambridge. Pocos años después, Josephson pasó a engrosar la larga lista de premios Nobel en Física por descubrimientos relacionados con la superconductividad. Su descubrimiento ha tenido numerosas aplicaciones en campos tan distintos como pueden ser desde Astronomía a Medicina.

EJERCICIOS

33.1. Sabiendo que la frecuencia de vibración de los iones de la red cristalina es del orden de 10^{13} s^{-1} y que la velocidad de un electrón de conducción es del orden de 10^8 cm s^{-1} , calcular un valor estimado del tamaño de un par de Cooper para un superconductor de temperatura crítica 5 K.

- 33.2.** Si en un superconductor, a una temperatura $T < T_c$, el campo crítico termodinámico es 100 Oe, calcular por unidad de volumen la diferencia de energía entre el estado normal y el estado superconductor.
- 33.3.** Escribir la función de ondas para cuatro pares de Cooper.
- 33.4.** Calcular el campo magnético mínimo que se puede medir con una sonda SQUID (anillo superconductor) de 1 mm^2 de área.
- 33.5.** Sabiendo que la temperatura crítica superconductor es de 5 K, calcular la mínima diferencia de energía entre un electrón en estado normal y un electrón en estado superconductor.
- 33.6.** Sea un cilindro de sección 1 cm^2 y de longitud 1 m de un material superconductor que está a una temperatura superior a la temperatura crítica. Este cilindro está en presencia de un campo magnético de $3,5 \cdot 10^{-7}$ gauss. Suponiendo que el cilindro se puede asimilar a un conjunto de 105 espiras (solenoides) y que se disminuye la temperatura por debajo de la crítica, calcular la intensidad de corriente superconductor que aparece en el cilindro.

Soluciones a los ejercicios (capítulos 29 a 33)

29.1. $\lambda = \frac{\hbar}{mv}$; $v = \sqrt{2E/m} \approx 1.2 \cdot 10^8 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$

$$\lambda \approx 6 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 6 \text{ \AA}$$

29.2. Recíprocos de las intersecciones

$$1(X) \quad \frac{1}{2}(Y) \quad \frac{1}{3}(Z)$$

Índices de Miller (6, 3, 2).

29.3. $\varepsilon = 3k_B T$ (energía por átomo).
 $E = 3N_A k_B T$ (N_A número de Avogadro).

29.4. Utilizar la expresión de C (sección 29.3):

1. $\lim_{T \rightarrow 0} C = 0$.
2. Desarrollando en serie las exponenciales ($T \gg \theta_E$) $C \approx 3k_B N_A$.

29.5. $g(\omega) d\omega$ por definición: número de modos cuyas frecuencias están comprendidas entre ω y $\omega + d\omega$. Hay que calcular el número de modos q comprendidos entre q y $q + dq$ y luego utilizar la relación de dispersión $\omega(q)$ correspondiente.

En tres dimensiones, la expresión de una onda elástica que se propaga con vector de onda \mathbf{q} es

$$Ae^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

Recordando qué condiciones frontera periódicas conducen a

$$e^{i(q_x L + q_y L + q_z L)} = 1$$

luego

$$(q_x, q_y, q_z) = \left(\frac{2\pi}{L} n, \frac{2\pi}{L} m, \frac{2\pi}{L} p \right)$$

siendo n, m, p enteros. Siendo el volumen que le corresponde a cada punto \mathbf{q} de

$$\left(\frac{2\pi}{L} \right)^3$$

El número de modos en una esfera de radio q será

$$\left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{4\pi}{3} q^3$$

De aquí se obtiene el número de modos q comprendidos entre q y $q + dq$, que es

$$\frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 dq$$

donde V es el volumen de la muestra.

- 29.6.** Utilizar el resultado anterior para una esfera de radio el de Debye q_D y teniendo en cuenta que en el modelo de Debye la red vibra como un medio continuo, por tanto, con relación de dispersión

$$\omega = v_s q$$

siendo v_s la velocidad del sonido en el medio. Recordando el ejercicio anterior y las expresiones [29.3.2] y [29.3.1], queda

$$E = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega^3}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} d\omega$$

y haciendo el cambio de variable

$$x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$$

y derivando respecto a T , se obtiene la expresión del calor específico de Debye (véase sección 29.3).

29.7. Rayos X $\left(\varepsilon = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \right)$

$$\lambda(\text{\AA}) = \frac{12.4}{\varepsilon(\text{KeV})} = 0.62 \text{\AA}$$

Neutrones $\left(\varepsilon = \frac{p^2}{2M} = \frac{h^2}{2M\lambda^2} \right)$

$$\lambda(\text{\AA}) = \frac{0.28}{[\varepsilon(\text{eV})]^{1/2}} = 1.6 \text{\AA}$$

Electrones $\left(\varepsilon = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \right)$

$$\lambda(\text{\AA}) = \frac{12}{[\varepsilon(\text{eV})]^{1/2}} = 1.2 \text{\AA}$$

29.8. $2d \sin \theta_n = n\lambda$

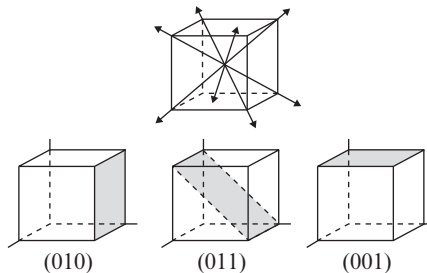
$d = 2.4 \text{\AA}$	$\lambda = 1.54 \text{\AA}$
$n = 1$	$\theta_1 = 18.7^\circ$
$n = 2$	$\theta_2 = 39.9^\circ$
$n = 3$	$\theta_3 = 74.2^\circ$

29.9. $k = \frac{2\pi}{\lambda} \approx 10^5 \text{ cm}^{-1}$ fotón.

Tamaño de la Z.B. $10^8 \text{ cm}^{-1} = q_{\text{Z.B.}}$.

Por tanto, la relación es de 10^3 , es decir, solamente fonones de longitud de onda larga, esto es, fonones de q de orden de mil veces más pequeña que $q_{\text{Z.B.}}$; sólo fonones del centro de la Z.B. pueden interaccionar con la luz visible.

29.10. $\langle 111 \rangle$ Diagonales del cubo



- 29.11.** 1/8 de cada átomo en los vértices del cubo y 1/2 de cada átomo en las caras del cubo pertenecen a una celda unidad, luego

$$\frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 6 = 4$$

30.1. $\Psi(x) = \Psi(x + L)$
 $|\Psi(x)|^2 = |\Psi(x + pa)|^2$

donde p es un número entero. Luego

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

por tanto,

$$\Psi(x + pa) = C^p\Psi(x)$$

C es un número complejo tal que

$$CC^* = 1$$

Dado que la densidad de carga es proporcional a $\Psi\Psi^*$, se tiene

$$\Psi(x + Na) = C^N\Psi(x) = \Psi(x)$$

$$C^N = 1$$

Es decir, C es una de las raíces de la unidad

$$C = \exp(2\pi ip/N)$$

donde $p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Finalmente

$$\Psi(x + a) = \exp(2\pi ip/N) \Psi(x)$$

30.2. $E_F(\text{Na}) = 3.14 \text{ eV}$; $E_F(\text{Cu}) = 11.1 \text{ eV}$
 $E_F(\text{Al}) = 11.6 \text{ eV}$.

30.3. $E = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} E(k) 4\pi k^2 dk = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} dk = \frac{V}{10\pi^2} \frac{\hbar^2}{m} k_F^5$

30.4. $G = n_1 \mathbf{a}^* + n_2 \mathbf{b}^* + n_3 \mathbf{c}^*$
 $R = m_1 \mathbf{a} + m_2 \mathbf{b} + m_3 \mathbf{c}$

Recordando que

$$\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a} = 2\pi \quad ; \quad \mathbf{a}^* \times \mathbf{b} = 0$$

queda

$$\mathbf{G} \times \mathbf{R} = (n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3) 2\pi$$

Por tanto

$$e^{i\mathbf{G}\mathbf{R}} = e^{ip2\pi} = 1$$

siendo p un entero.

30.5. $\phi_k(x) = e^{ikx} u_k(x) \quad ; \quad [u_k(x+L) = u_k(x)]$

Imponiendo condiciones de contorno periódicas, los valores permitidos de k serán

$$k = n \frac{2\pi}{L} \quad ; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$$

Los valores de k permitidos están separados entre sí una distancia $2\pi/L$.

Si a es el radio de la celda unidad en el espacio real, $2\pi/a$ lo será en la primera Z.B. Entonces el número de estados k dentro de la primera Z.B. será

$$\left(\frac{2\pi}{a}\right) \Big/ \left(\frac{2\pi}{L}\right) = \frac{L}{a} = N$$

siendo N el número de celdas unidad en el cristal de longitud L . (El paso a tres dimensiones es inmediato.)

30.6. a) Masas efectivas: A y B negativas
 C y D positivas

b) Velocidades: A y C negativas
 B y D positivas

30.7. $n_{\text{átomos}} = 5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

$n_{\text{huecos}} = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

$n_{\text{electrones}} = 2.25 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$.

31.1. 26%.

31.2. $\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_p b_p(t) \phi_p(\mathbf{r})$.

donde ϕ_p son las autofunciones.

Recordando que la amplitud de probabilidad de encontrar el sistema en el estado ϕ_n en el tiempo t es

$$a_n(t) = \sum_p b_p(t) \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \phi_p(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

[NOTA: Las funciones ϕ_n están normalizadas y son ortogonales; queda $a_n = b_n$.]
Teniendo en cuenta la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H\psi(\mathbf{r}, t)$$

esto es

$$i\hbar \sum_p \frac{db_p}{dt} \phi_p(\mathbf{r}) = \sum_p b_p H \phi_p(\mathbf{r})$$

Multiplicando en esta ecuación ambos miembros por $\phi_n^*(\mathbf{r})$ y recordando las propiedades de conmutación del hamiltoniano

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_p b_p \int \phi_p(\mathbf{r}) H \phi_n^*(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

donde la función $H\phi_n^*(\mathbf{r})$ se puede escribir como

$$H\phi_n^*(\mathbf{r}) = \sum_m E_{nm} \phi_m^*(\mathbf{r})$$

y sustituyendo finalmente, se tiene

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_p \sum_m E_{nm} b_p \int \phi_p(\mathbf{r}) \phi_m^*(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \sum_m E_{nm} a_m$$

31.3. Sustituyendo en la expresión 31.4.2 n y N por sus valores, queda

$$\frac{dn}{dt} = -2N_+P_{\uparrow} + 2N_-P_{\downarrow}$$

Escrita de esta forma es bien simple obtenerla y encontrar el significado de cada término. $\frac{dn}{dt}$ no es nada más que la diferencia entre el ritmo de variación de la población N_+ menos el ritmo de variación de la población N_- . Estas dos expresiones son muy fáciles de escribir, $\frac{dN_+}{dt}$, depende de lo que aumenta la población de N_+ menos lo que disminuye la población N_+ .

Lo que aumenta la población N_+ depende a su vez del número de posibles estados que pasen a ser N_+ , esto es, depende de la población N_- y de la probabilidad de que exista una transición del estado de población N_- al estado de población $N_+(P_{\downarrow})$.

Lo que disminuye la población N_+ depende del número de estados que pueden pasar de ser N_+ a ser N_- , esto es, de N_+ y de la probabilidad de que esto ocurra, que es P_{\uparrow} . Resumiendo

$$\frac{dN_+}{dt} = N_-P_{\downarrow} - N_+P_{\uparrow}$$

Los mismos argumentos llevan a

$$\frac{dN_-}{dt} = N_+P_{\uparrow} - N_-P_{\downarrow}$$

Restando estas dos expresiones se tiene la expresión [31.4.2].

31.4. $\omega = \frac{eH}{mc}$; $m = 6m_0$,

siendo m_0 la masa del electrón en reposo.

31.5. $\frac{mv}{r} = \frac{e}{c} H$

$$r = 10^3 \text{ cm}$$

$$2\pi r = 6.2 \cdot 10^{-3} \text{ cm}$$

En total, recorre 1.6 vueltas antes de ser dispersado.

$$32.1. \quad m = -\frac{\partial F}{\partial B}$$

$$Z = e^{-\frac{1}{k_B T} F} = \int e^{-\frac{1}{k_B T} H(\mathbf{r}, \mathbf{p})} d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{p}$$

$$H = V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2$$

$$Z = \int d\mathbf{r}^3 d^3 \mathbf{p} e^{-\frac{1}{k_B T} \left[V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \right]}$$

Haciendo el cambio de variable

$$\mathbf{q} = \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$$

$$Z = \int d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{p} e^{-\frac{1}{k_B T} \left[V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} m \mathbf{q}^2 \right]}$$

$$Z \text{ no depende de } \mathbf{A} \Rightarrow \frac{\partial F}{\partial B} = 0 \Rightarrow m = 0$$

32.2. Basta con demostrar que

$$\int \phi_i^* \phi_j = 0 \quad \text{y que} \quad |\phi_i|^2 = 1$$

para lo cual hay que recordar que las ϕ_j son ortonormales.

El cálculo concreto es análogo y más simple que el desarrollo detallado del ejemplo del ejercicio siguiente (32.3).

32.3. Hay que calcular las integrales que forman los elementos de matriz

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & H_{14} \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & H_{24} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} & H_{34} \\ H_{41} & H_{42} & H_{43} & H_{44} \end{pmatrix}$$

donde

$$H_{ij} = \int \phi_i^* H \phi_j \, dr_1 \, dr_2$$

recordando que φ_a y φ_b son las funciones propias con valores de energía E_a y E_b .

Como ejemplo, se puede calcular el elemento de matriz H_{32} . Sería:

$$H_{32} = \int \phi_3^* H \phi_2 \, dr_1 \, dr_2$$

Recordando

$$\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(r_1)\varphi_b(r_2)\beta(\sigma_1)\alpha(\sigma_2) - \varphi_a(r_2)\varphi_b(r_1)\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2)]$$

$$\phi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(r_1)\varphi_b(r_2)\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) - \varphi_a(r_2)\varphi_b(r_1)\beta(\sigma_1)\alpha(\sigma_2)]$$

$$\begin{aligned} H_{32} = \frac{1}{2} \int & [\varphi_a^*(r_1)\varphi_b^*(r_2)H\varphi_a(r_1)\varphi_b(r_2)\alpha^*(\sigma_1)\beta^*(\sigma_2)\beta(\sigma_1)\alpha(\sigma_2) - \\ & - \varphi_a^*(r_1)\varphi_b^*(r_2)H\varphi_a(r_2)\varphi_b(r_1)\alpha^*(\sigma_1)\beta^*(\sigma_2)\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) - \\ & - \varphi_a^*(r_2)\varphi_b^*(r_1)H\varphi_a(r_1)\varphi_b(r_2)\beta^*(\sigma_1)\alpha^*(\sigma_2)\beta(\sigma_1)\alpha(\sigma_2) + \\ & + \varphi_a^*(r_2)\varphi_b^*(r_1)H\varphi_a(r_2)\varphi_b(r_1)\beta^*(\sigma_1)\alpha^*(\sigma_2)\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2)] \, dr_1 \, dr_2 \end{aligned}$$

El primer y cuarto sumandos son cero, pues los correspondientes productos de las partes de espín

$$\alpha^*(\sigma_1)\beta(\sigma_1)\beta^*(\sigma_2)\alpha(\sigma_2) = \beta^*(\sigma_1)\alpha(\sigma_1)\alpha^*(\sigma_2)\beta(\sigma_2) = 0$$

$$(1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 \ 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = (0 \ 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

Por otro lado, los productos de las partes de espín de los sumandos segundo y tercero valen la unidad

$$\alpha^*(\sigma_1)\alpha(\sigma_1)\beta^*(\sigma_2)\beta(\sigma_2) = \beta^*(\sigma_1)\beta(\sigma_1)\alpha^*(\sigma_2)\alpha(\sigma_2) = 1$$

$$(1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1$$

Queda finalmente

$$H_{32} = -\frac{1}{2} \int [\varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2)H\varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1) + \varphi_a^*(\mathbf{r}_2)\varphi_b^*(\mathbf{r}_1)H\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2)] d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

Ahora, dado que el hamiltoniano no cambia al hacer la sustitución $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$, queda

$$\begin{aligned} H_{32} &= -\int \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \left[H_0(\mathbf{r}_1) + H_0(\mathbf{r}_2) + \frac{e^2}{r_{12}} \right] \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ &= -\int \left[\varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2)H_0(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1) + \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2)H_0(\mathbf{r}_2)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1) + \right. \\ &\quad \left. + \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1) \right] d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \end{aligned}$$

El primer sumando es

$$\int \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2)H_0(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = E_b \int \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = 0$$

ya que φ_a y φ_b son ortogonales; por el mismo motivo se anula el segundo sumando. El tercer sumando queda

$$\int \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = J_{ab}$$

Finalmente, se tiene que

$$H_{32} = J_{ab}$$

la interacción de canje. Análogamente, se calculan los demás elementos de matriz.

32.4. Singlete

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) - \alpha(\sigma_2)\beta(\sigma_1)]$$

que también se puede representar por

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle] ; s = 0 ; m_s = 0$$

Triplete

$$\alpha(\sigma_1)\alpha(\sigma_2) \Leftrightarrow |\uparrow\uparrow\rangle ; s = 1, m_s = 1$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) + \alpha(\sigma_2)\beta(\sigma_1)] \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] ; s = 1, m_s = 0$$

$$\beta(\sigma_1)\beta(\sigma_2) \Leftrightarrow |\downarrow\downarrow\rangle ; s = 1, m_s = -1$$

32.5. Recordar que

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\sigma_1 \cdot \sigma_2$. El producto tensorial por componentes queda

$$\sigma_{1x} \cdot \sigma_{2x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_{1y} \cdot \sigma_{2y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_{1z} \cdot \sigma_{2z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1z}\sigma_{2z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

32.6. $T_c = 1043 \text{ K}$; $k_B T_c = 0.08 \text{ eV}$

$$E_d = \frac{1}{r^3} \left[(\mathbf{m}_1 \mathbf{m}_2) - \frac{3(\mathbf{m}_1 \mathbf{r})(\mathbf{m}_2 \mathbf{r})}{r^2} \right] \approx \frac{(g\mu_B)^2}{r^3}$$

El factor de Landé g para un electrón es 2; queda, por tanto,

$$E_d \sim 10^{-4} \text{ eV}$$

dos órdenes de magnitud menor que $k_B T_c$.

33.1. $l = \frac{v}{\tau} \approx 10^{-5} \text{ cm} = 1000 \text{ \AA}$

También se puede aplicar el principio de incertidumbre de Heisenberg

$$\hbar \sim l \delta p$$

$$\Delta \approx \delta E = \delta \left(\frac{p^2}{2m} \right) = \left(\frac{p_F}{m} \right) \delta p \approx v_F \delta p$$

$$l \sim \frac{\hbar}{\delta p} \approx \frac{\hbar v_F}{\Delta}$$

$$\Delta = 1.76 k_B T_c \quad ; \quad l \approx 10^{-5} \text{ cm}$$

33.2. $F_n(T) - F_s(T) = \frac{H_c^2(T)}{8\pi} = 400 \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-3}$

33.3 $\Phi_8(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5, \mathbf{r}_6, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8) = \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\Phi(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4)\Phi(\mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_6)$
 $\Phi(\mathbf{r}_7 - \mathbf{r}_8)\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2)\alpha(\sigma_3)\beta(\sigma_4)\alpha(\sigma_5)\beta(\sigma_6)\alpha(\sigma_7)\beta(\sigma_8).$

donde

$\alpha(\sigma_1)$ significa espín *up*.

$\beta(\sigma_1)$ significa espín *down*.

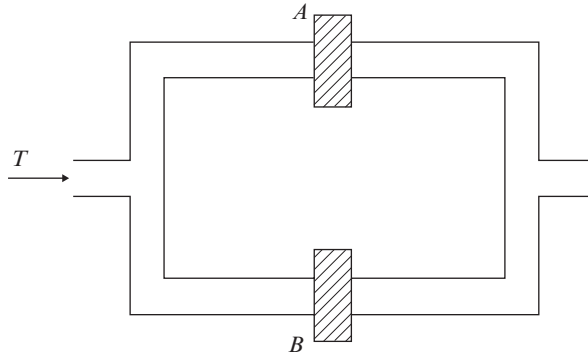
La función Φ_8 debe ser antisimétrica, lo que significa que debe aparecer un operador A que la antisimetrice. Utilizando la transformada de Fourier de la función de cada par

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_k g_k e^{ikr}$$

queda

$$\Phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{k_1} \dots \sum_{k_4} g_{k_1} \dots g_{k_4} A e^{ik_1(r_1-r_2)} \dots e^{ik_4(r_7-r_8)} \alpha(\sigma_1) \beta(\sigma_2) \dots \beta(\sigma_8)$$

- 33.4. Un SQUID (*Superconducting Quantum Interference Device*) es un anillo superconductor con dos uniones Josephson (A, B) con el que se pueden medir campos magnéticos muy débiles



$$\Phi_0 = B \cdot S \quad ; \quad \Phi_0 = \frac{hc}{2e}$$

$$B = 2 \cdot 10^{-9} \text{ gauss}$$

- 33.5. Hay que tener en cuenta que la energía para romper un par es 2Δ , siendo Δ la zanja de energía:

$$\Delta = 1.76k_B T_c = 10^{-14} \text{ erg} = 10^{-2} \text{ eV}$$

- 33.6. $\Phi_1 = B \cdot S \quad T > T_c$
 $\Phi = n\Phi_0 = \Phi + \Phi'' \quad T < T_c$
 $\Phi_0 = 2 \cdot 10^{-7} \text{ gauss cm}^2$
 $\Phi = 3.5 \cdot 10^{-7} = x\Phi_0$

$$x = 1.75 = 1 + \frac{3}{4}$$

Para $T < T_c$, se tiene que la corriente tiene que producir un flujo Φ'' tal que

$$\Phi' = n\Phi_0 = (1 + 1)\Phi_0$$

$$\Phi'' = (4 - 3.5) \cdot 10^{-7} = 0.5 \cdot 10^{-7} \text{ gauss cm}^2$$

$$B = mI \quad ; \quad m \text{ (número de espiras por unidad de longitud)}$$

$$B = 0.5 \cdot 10^{-7} = 10^3 I$$

$$I = 0.5 \cdot 10^{-7} \text{ uem de intensidad} = 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ A.}$$

PARTE SEXTA

Núcleos atómicos

- Núcleos atómicos y procesos nucleares.
- Interacción de radiaciones ionizantes con la materia.
- Estructura de los núcleos atómicos.
- Radioactividad.
- Reacciones nucleares.

BIBLIOGRAFÍA

Fermi, E. (1950). *Nuclear Physics*. Univ. of Chicago Press.

Es una recopilación de apuntes de un curso dictado por Enrico Fermi; a pesar de su antigüedad, muchos capítulos siguen vigentes y muy claros.

Segrè, E. (1972). *Núcleos y partículas*. Barcelona: Reverté.

Libro inspirado en las notas del curso de Fermi, aunque más trabajado. Además, contiene la física de partículas elementales que no se conocía en 1950. Existe una edición de 1977, más completa, pero no traducida.

Burcham, W. E. (1974). *Física nuclear*. Barcelona: Reverté.

Es un texto bastante completo y con profusión de datos. Existe otra obra, más

reducida, del mismo autor publicada en 1979.

Valentin, L. (1982). *Physique subatomique: noyaux et particules*, I. Approche élémentaire, II Développements. Paris: Hermann.

El autor proviene de la física de las partículas elementales y ello se refleja en un tratamiento que difiere de los textos ya mencionados.

Cottingham, W. N. y Greenwood, D. A. (1986). *An Introduction to Nuclear Physics*. Cambridge University Press.

Libro conciso y con orientación moderna que puede ser de utilidad como complemento a los textos más clásicos.

Krane, K. S. (1988). *Introductory Nuclear Physics*. Nueva York: John Wiley and Sons.

34 Núcleos atómicos y procesos nucleares

Carlos Sánchez del Río

34.1. EL NÚCLEO ATÓMICO: GENERALIDADES

El núcleo de un átomo es una partícula muy pequeña (unas diez mil veces menor que el átomo) con carga eléctrica positiva y cuya masa es casi tan grande como la del propio átomo.

Los núcleos atómicos están compuestos de protones (p) y neutrones (n). El protón es un núcleo de hidrógeno con carga eléctrica positiva igual en valor absoluto a la del electrón y cuya masa es unas 1836 veces mayor que la de este último. El neutrón no tiene carga eléctrica y su masa es algo mayor que la del protón. En la tabla 34.1 se muestran las principales propiedades de las dos partículas, que reciben ambas el nombre de nucleones.

El número de protones de un núcleo es igual al número atómico Z del elemento químico correspondiente, de manera que los átomos no ionizados son neutros. El número total de nucleones A se llama número másico, y es muy próximo al peso atómico del elemento en unidades SI¹. El número de neutrones del núcleo es, por tanto, $A - Z$. La especie nuclear caracterizada por los dos números atómico Z y másico A se llama nucleido. Todos los nucleidos que corresponden al mismo elemento químico (igual Z) pero que tienen distinto número másico A reciben el nombre de isótopos.

TABLA 34.1

Propiedades de protones y neutrones. La carga eléctrica está dada en culombios, la masa en $\text{MeV}c^2$ (véase apartado 34.4), el espín en \hbar y el momento magnético en magnetones nucleares

$$(1\mu_N = 5.051 \times 10^{-27} \text{ J} \times \text{T}^{-1} = 3.152 \times 10^{-12} \text{ eV} \cdot \text{G}^{-1})$$

Nucleón	Carga eléctrica (C)	Masa ($\text{MeV}c^2$)	Espín (\hbar)	Momento magnético (μ_N)
p	$+1.602 \times 10^{-19}$	938.28	1/2	2.793
n	0	939.57	1/2	-1.913

¹ La unidad SI de peso atómico es la dozava parte de la masa de un átomo de carbono-14.

Cada nucleido se representa con la siguiente nomenclatura:

$${}^A_Z[\text{Símbolo del elemento químico}]$$

Así, se escribe ${}^{12}_6\text{C}$, que se lee carbono-12, ${}^{57}_{26}\text{Fe}$ (hierro-57), ${}^{235}_{92}\text{U}$ (uranio-235), etc. Como se ve, el simbolismo es redundante porque, dado el símbolo del elemento, se sabe el número atómico sin más que mirar la tabla periódica de los elementos. Por eso frecuentemente se omite el número atómico y los nucleidos anteriores se designan por ${}^{12}\text{C}$, ${}^{57}\text{Fe}$ y ${}^{235}\text{U}$, simplemente. Algunos nucleidos ligeros se representan también con un simbolismo especial. Así, el nucleido del hidrógeno normal ${}^1\text{H}$ se designa por la letra p (protón), el del isótopo ${}^2\text{H}$ por d (deuterón) y el del isótopo ${}^3\text{H}$ por t (nucleido del tritio). El nucleido ${}^4\text{He}$ también se representa simplificada por α (partícula alfa).

La masa de un núcleo no es igual a la suma de las masas de los nucleones que lo componen porque la energía de enlace de los mismos es importante y no puede ignorarse la disminución de masa que conlleva la relación de Einstein ($E = mc^2$). Por eso la masa M de un núcleo es

$$M = ZM_p + (A - Z)M_n - B/c^2 \quad [34.1.1]$$

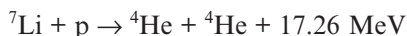
donde M_p y M_n son las masas del protón y del neutrón, respectivamente, B la energía de enlace total del núcleo (es decir, la energía necesaria para descomponerlo totalmente) y c la velocidad de la luz en el vacío.

La energía de enlace B varía de unos nucleidos a otros, pero, exceptuados los más ligeros, es aproximadamente proporcional al número másico, de modo que $B/A \approx 8 \text{ MeV}$, es decir, la energía de enlace por nucleón equivale a casi un 1% de su masa.

Cuando chocan dos núcleos, pueden reajustarse los nucleones dando lugar a nuevos núcleos. Estos procesos se denominan reacciones nucleares por su analogía con las reacciones químicas que producen nuevas moléculas. Evidentemente, para que tales reacciones ocurran, las colisiones deben ser muy violentas, excepto si intervienen neutrones, porque los núcleos se repelen fuertemente debido a su carga eléctrica positiva. Las reacciones nucleares pueden ser tales que se desprenda energía (reacciones exoenergéticas), o bien que no se produzcan, a menos que se suministre energía (reacciones endoenergéticas). Como se ve, también en este aspecto se aprecia una analogía con las reacciones químicas, pero hay una notable diferencia cuantitativa: en una reacción química entre dos átomos o moléculas se puede desprender una energía del orden de electronvoltios, mientras que en las reacciones entre núcleos intervienen energías millones de veces superiores porque las energías de enlace de los núcleos son de ese mismo orden e incomparablemente mayores que las energías de los electrones que participan en los procesos químicos.

Las reacciones nucleares más frecuentes, porque son las más fáciles de producir, ocurren empleando como proyectiles protones, neutrones, deuterones o partículas alfa, que se hacen incidir sobre núcleos diversos. Si la energía de los proyectiles no sobrepasa los 10 o 20 MeV, el resultado final suele ser un par de núcleos o un núcleo y una partícula. Veamos algunos ejemplos.

Bombardeando ${}^7\text{Li}$ con protones, puede ocurrir la reacción



que da lugar a dos núcleos de helio-4 o partículas alfa con un desprendimiento de 17.26 MeV de energía. Una nomenclatura simplificada de la reacción anterior es ${}^7\text{Li}(\text{p},\alpha){}^4\text{He}$. Si la energía del protón es suficiente, también podrá observarse la reacción



que es endoenergética y que también se designa por ${}^7\text{Li}(\text{p},\text{n}){}^7\text{Be}$. Esta reacción se utiliza para producir neutrones de baja energía. La reacción que sirvió para descubrir el neutrón fue



y sigue siendo la base de las fuentes de neutrones portátiles, que consisten en una mezcla de un emisor alfa con polvo de berilio. En forma concisa, se designa esta reacción por ${}^9\text{Be}(\alpha,\text{n}){}^{12}\text{C}$.

Muchos nucleidos no son estables, sino que emiten espontáneamente partículas o rayos X duros. Dichos nucleidos se llaman radioactivos y son mucho más abundantes que los núcleos estables. Muchos nucleidos radioactivos se encuentran en la naturaleza, en algunos minerales, mientras que otros muchos aparecen como producto de diversas reacciones nucleares.

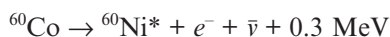
Los nucleidos radioactivos pueden emitir tres clases de radiaciones, que, por razones históricas, se designan con las tres primeras letras del alfabeto griego: alfa, beta y gamma. Las tres radiaciones descomponen los átomos o moléculas que encuentran a su paso en electrones e iones positivos, por eso se llaman radiaciones ionizantes; esta propiedad sirve para su detección mediante emulsiones fotográficas, dispositivos electrónicos u otros medios.

En los minerales de uranio, por ejemplo, se encuentra el radio-226, que se desintegra por emisión de un núcleo de helio-4 (partícula alfa) de la forma siguiente:



El producto residual es el radón-222, que es a su vez radioactivo. El asterisco a la derecha del símbolo del radón indica que dicho núcleo queda excitado y no en su estado fundamental. Los núcleos de una muestra de radio se desintegran al azar y van desapareciendo poco a poco, tan poco a poco que el número de núcleos de radio queda disminuido a la mitad cuando han transcurrido 1608 años. Este tiempo se llama período de la desintegración, que en este caso es, como vemos, muy grande.

Bombardeando cobalto-59 con neutrones lentos se obtiene cobalto-60, que se desintegra por emisión de un electrón negativo ordinario (partícula beta negativa) según el esquema:



donde e^- representa el electrón y $\bar{\nu}$ una nueva partícula llamada antineutrino, de la cual se tratará en el capítulo 37. El período de desintegración del cobalto-60 es de 5.23 años.

El níquel-60 excitado pasa rápidamente a su estado fundamental por emisión de dos fotones muy energéticos (rayos gamma) en la forma siguiente:



El período de esta desintegración es de sólo 10^{-14} segundos; la emisión de los fotones por el níquel es, por tanto, prácticamente simultánea con la emisión beta del cobalto. Estos rayos gamma (fotones de energía elevada) son los que se utilizan con fines terapéuticos en las llamadas bombas de cobalto.

Esta breve introducción general a los procesos nucleares ilustra el hecho de que los fenómenos que nos sirven para observar los núcleos atómicos son sólo de dos clases: reacciones y desintegraciones. Dedicaremos el resto de este capítulo a estudiar las probabilidades y la cinemática de ambas clases de procesos.

34.2. PROBABILIDAD DE LAS REACCIONES NUCLEARES

Dentro del término de reacción nuclear admitiremos también las colisiones entre una partícula y un núcleo que no dan lugar a la producción de nuevos núcleos o partículas. Estas colisiones pueden ser elásticas o inelásticas. En una colisión elástica, la partícula incidente sobre un núcleo fijo cambia de dirección y cede parte de su energía al núcleo blanco, que se mueve por este motivo. En una colisión inelástica, la partícula incidente se desvía y pierde más energía porque el núcleo blanco, además de adquirir energía cinética, queda excitado; normalmente, el núcleo así excitado pasa rápidamente a su estado fundamental emitiendo rayos gamma.

La probabilidad de que ocurra una colisión o reacción propiamente dicha se mide por la sección eficaz del proceso que se define de la siguiente manera. Sea un haz paralelo de I partículas por unidad de superficie incidente sobre un núcleo; la probabilidad de que ocurra un proceso determinado será proporcional a I y podremos escribir

$$\text{Probabilidad} = \sigma I \quad [34.2.1]$$

La constante de proporcionalidad σ es la sección eficaz y tiene las dimensiones de una superficie. Si se tratase de bolitas macroscópicas lanzadas contra un blanco, σ sería la superficie del blanco, pero esta imagen ingenua no es aplicable a los núcleos porque la sección eficaz se refiere a un proceso concreto y, además, en general, depende de la energía de las partículas incidentes. Obsérvese que en la definición de la sección eficaz no interviene el tiempo; claro que la fórmula anterior también es válida si I representa el número de partículas incidentes por unidad de superficie y de tiempo y la probabilidad se refiere a la unidad de tiempo.

Si la sección eficaz expresa la probabilidad de que pase cualquier cosa, se llama total, y es, obviamente, la suma de las secciones eficaces de los diversos procesos posibles:

$$\sigma_T = \sum_i \sigma_i$$

En particular, la sección eficaz referida a la dirección de salida de una partícula después de una colisión o reacción se llama sección eficaz diferencial, y se designa por $\sigma(\Omega)$, siendo Ω la dirección de salida. La sección eficaz del proceso, cualquiera que sea la dirección de salida, es, evidentemente,

$$\sigma = \int \sigma(\Omega) d\Omega$$

siendo $d\Omega$ la diferencial de ángulo sólido. Si el proceso de que se trate no da lugar a polarización (porque no depende de los espines), la sección eficaz diferencial sólo depende del ángulo θ que forman la dirección de la partícula incidente con la saliente, y la expresión anterior queda reducida a

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) \text{sen } \theta d\theta \quad [34.2.2]$$

Como los tamaños de los núcleos son del orden de 10^{-12} cm, se usa en física nuclear como unidad de sección eficaz el barn, que equivale a 10^{-24} cm² y cuyo símbolo es b. Cuando esta unidad es demasiado grande se utilizan el milibarn (mb) y el microbarn (μ b). La unidad de sección eficaz diferencial es el barn por estereorradian (b/sr).

Si el haz de I partículas por cm² incide no sobre un núcleo sino sobre N , es consecuencia de [34.2.1] que ocurrirán $N\sigma I$ procesos, siempre que los núcleos no se hagan sombra unos a otros. Esto se cumplirá siempre si los núcleos están situados en una lámina de espesor infinitesimal que sólo contenga dN núcleos, en cuyo caso el número, también infinitesimal, de procesos será $\sigma I dN$. En cambio, si las partículas inciden sobre una lámina gruesa, el haz incidente sufrirá una atenuación progresiva a medida que las partículas incidentes sean eliminadas o desviadas. El cálculo de esta atenuación es muy sencillo. Sea una lámina de espesor a situada perpendicularmente a un haz incidente de I_0 partículas por cm² que vienen en la dirección del eje ox (véase figura 34.1). Las partículas que no han sido afectadas después de penetrar hasta una distancia x de la superficie serán $I(x)$, es decir, función de dicha distancia. Para calcular esta función consideremos lo que sucede en una lámina infinitesimal de espesor dx situada a distancia x de la superficie sobre la que inciden las partículas. El número de núcleos por cm² en esa laminilla será $N dx$ si N es el número de núcleos por cm³ que contiene la lámina. La disminución $-dI$ del número de partículas por cm² del haz al atravesar el espesor dx será igual al número de procesos que ocurran en dx ; por tanto,

$$-dI(x) = \sigma I(x) N dx$$

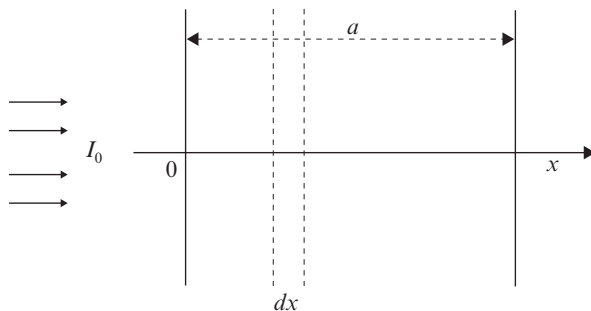


Figura 34.1. Atenuación de un haz de partículas por una lámina gruesa.

La solución de esta ecuación diferencial es

$$I(x) = I_0 e^{-N\sigma x} \quad [34.2.3]$$

siendo I_0 la constante de integración, que es el valor que toma $I(x)$ para $x = 0$. Por tanto, I_0 es el número de partículas que inciden sobre la lámina por cm^2 . Obsérvese que $I(x)$ representa el número de partículas intactas a la distancia x de la superficie, es decir, el número de partículas que no han sido capturadas, ni desviadas, ni que han cambiado de energía.

La fórmula anterior es útil para la medida de secciones eficaces totales. Si medimos I_0 con un detector, interponemos después la lámina de espesor a y volvemos a medir $I(a)$ correspondiente a las partículas que salen intactas, la relación

$$\frac{I(a)}{I_0} = e^{-N\sigma a} \quad [34.2.4]$$

nos permite determinar σ (en cm^2) si conocemos el espesor a de la lámina y el número N de núcleos por cm^3 . Este número está dado por

$$N = \frac{\rho N_A}{A} \quad [34.2.5]$$

siendo ρ la densidad (en g/cm^3), N_A el número de Avogadro ($6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$) y A el peso atómico de los átomos que forman la lámina. Si no se necesita mucha precisión, basta tomar para A el valor del número másico del nucleido de que se trate.

La fórmula [34.2.3] permite también calcular el camino libre medio \bar{x} de las partículas en un material, es decir, el valor medio de la distancia que recorren las partículas sin que

les pase algo. En efecto, $\exp(-N\sigma x)$ es la probabilidad de que a una partícula no le suceda nada hasta llegar a la distancia x , y $N\sigma dx$ es la probabilidad de que le ocurra algo al atravesar dx , de aquí que

$$\bar{x} = \int_0^{\infty} x e^{-N\sigma x} N\sigma dx = \frac{1}{N\sigma} \quad [34.2.6]$$

que nos da el camino libre medio buscado.

34.3. PROBABILIDAD DE LAS DESINTEGRACIONES NUCLEARES

Experimentalmente, se comprueba que la actividad de una muestra radioactiva, medida por el número de desintegraciones que se observan por unidad de tiempo, disminuye exponencialmente con el transcurso del tiempo. Este hecho es consecuencia de que los núcleos son sistemas cuánticos y sólo se puede predecir su futuro probabilísticamente. En efecto, aceptemos que sólo se puede conocer la probabilidad λ de que un núcleo se desintegre en un segundo y llamemos $N(t)$ al número de núcleos radiactivos que quedan en la muestra en el instante t . Durante el tiempo dt se desintegrarán $N(t)\lambda dt$, y éste será el número de núcleos radioactivos que desaparecerán de la muestra. En consecuencia

$$dN(t) = -N(t)\lambda dt$$

Esta ecuación diferencial tiene la solución

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} \quad [34.3.1]$$

siendo N_0 la constante de integración, que es el valor que toma $N(t)$ para $t = 0$. Por tanto, N_0 es el número de núcleos radioactivos de la muestra en el instante inicial.

La actividad de la muestra, es decir, el número de desintegraciones por segundo, es

$$A = \left| \frac{dN}{dt} \right| = N\lambda \quad [34.3.2]$$

que, según [34.3.1], evoluciona con el tiempo conforme

$$A(t) = A_0 e^{-\lambda t} \quad [34.3.3]$$

que es lo que se observa experimentalmente.

La probabilidad λ que hemos introducido se llama constante de desintegración o constante radioactiva, y es característica de cada proceso de desintegración radioactiva y de cada nucleido. En las tablas, sin embargo, no figura esta constante, sino otro índice relacionado con ella que es el período de la desintegración, que se define como el tiempo T necesario para que la actividad de una muestra radioactiva se reduzca a la mitad. Según [34.3.3], T cumple la relación

$$\frac{1}{2} = e^{-\lambda T}$$

de donde

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0.693}{\lambda} \quad [34.3.4]$$

Otro índice relacionado con λ es la vida media τ de un núcleo radioactivo, es decir, el promedio del tiempo durante el cual los núcleos no se desintegran. Un argumento análogo al que nos ha conducido a [34.2.6] nos muestra que

$$\tau = \bar{t} = \int_0^{\infty} t e^{-\lambda t} \lambda dt = \frac{1}{\lambda}$$

La vida media τ es, por tanto, igual a la inversa de la constante radioactiva.

La determinación experimental de cualquiera de estas tres constantes, que son equivalentes, porque conocida una se saben las otras dos, se basa en las fórmulas [34.3.2] y [34.3.3]. La primera tiene el inconveniente de que es preciso conocer el número N de núcleos radioactivos de la muestra (lo cual sólo es fácil si todos los de la muestra lo son) y medir la actividad absolutamente. Por eso sólo se usa cuando el período de desintegración es tan grande que no se nota disminución de la actividad por duradero que sea el experimento. Si los períodos son cortos, es mejor usar [34.3.3], porque basta detectar ritmos de desintegración proporcionales a las actividades (y no actividades absolutas), lo cual se consigue fácilmente manteniendo fija la posición relativa de la muestra y el detector durante el experimento.

La unidad SI de actividad es el becquerel (símbolo Bq), que equivale a una desintegración por segundo. Es una unidad pequeñísima y, por ello, hay que usar múltiplos muy grandes (MBq, GBq, TBq...) en la práctica. Otra unidad más antigua, pero que aún se emplea, es el curie (símbolo Ci), equivalente a 3.7×10^{10} Bq.

Muchas veces se producen los nucleidos radioactivos mediante reacciones nucleares. En estos casos, el número de núcleos que se pueden producir (y la actividad consiguiente de la muestra resultante) tiene un límite porque entran en competición la formación de nuevos núcleos y la desintegración de los mismos. Supongamos que se producen Q núcleos

radioactivos por segundo a ritmo uniforme y que λ es la constante de desintegración de los mismos. El aumento neto del número N de núcleos durante el tiempo dt será

$$dN = Qdt - \lambda N dt$$

La solución de esta ecuación diferencial, con la condición de que para $t = 0$ no haya ningún núcleo, es

$$N(t) = \frac{Q}{\lambda}(1 - e^{-\lambda t}) \quad [34.3.5]$$

Como se ve, el crecimiento de N es bastante rápido al principio, pero pasado un tiempo de unos pocos períodos se llega al valor asintótico $N = Q/\lambda$. Si se desean muestras más activas es preciso aumentar Q .

Los nucleidos radioactivos naturales más frecuentes proceden del uranio y del torio que se desintegran con períodos de miles de millones de años. Los núcleos resultantes de cada desintegración son también radioactivos, por lo cual se originan cadenas de nucleidos que proceden unos de otros y cuya evolución temporal puede calcularse escribiendo un sistema de ecuaciones diferenciales que expresen el aumento neto del número de cada clase de núcleos, teniendo en cuenta su crecimiento por desintegración del nucleido precedente y su disminución por su propia desintegración. Es un problema puramente matemático en el cual no entraremos aquí.

El carácter probabilístico de las desintegraciones nucleares implica que en la medida de la actividad de una muestra radioactiva aparezcan fluctuaciones estadísticas. Si se mide durante un tiempo Δt , la probabilidad de que se desintegre un núcleo durante ese tiempo será $x = \lambda \Delta t$, y el valor esperado de la actividad será Nx , siendo N el número de núcleos radioactivos en la muestra. Pero en un experimento concreto no se contarán Nx sucesos, sino un número próximo n . Si $x \ll 1$, la probabilidad de que se observen n desintegraciones viene dada por la ley de Poisson²:

$$P(n) = \frac{(Nx)^n}{n!} e^{-Nx}$$

Esta ley cumple la condición $\sum P(n) = 1$, como debe ser. Además, el valor medio de n :

$$\bar{n} = \sum_0^{\infty} nP(n) = Nx$$

coincide con el valor esperado. También se tiene, para la distribución de Poisson, $\bar{n}^2 = (Nx)^2 + Nx$, con lo cual la varianza es

² Véase, por ejemplo: C. Sánchez del Río, *Análisis de errores*, Eudema, Madrid, 1989, p. 81.

$$\sigma^2 = \sum_0^{\infty} (n - \bar{n})^2 P(n) = \overline{n^2} - (\bar{n})^2 = Nx$$

y la desviación típica $\sigma = \sqrt{Nx}$, que podemos estimar por \sqrt{n} . Este resultado es muy importante porque nos indica que si medimos n desintegraciones, el error estadístico especificado por la desviación típica es $\pm \sqrt{n}$. Es un error considerable y ello explica la dificultad de conseguir medidas radioactivas precisas.

34.4. CINEMÁTICA DE LOS PROCESOS NUCLEARES

En física nuclear se llama cinemática a todo aquello que puede deducirse de las leyes de conservación de la energía y de la cantidad de movimiento (o momento) sin necesidad de conocer la dinámica de los procesos que se estudian. Como las energías que intervienen (del orden de una decena de MeV) son generalmente muy pequeñas frente a la energía equivalente de la masa de los núcleos, no se requieren cálculos relativistas. Basta la mecánica clásica no relativista con la única adición de la energía en reposo de las partículas que intervienen en los procesos nucleares, porque en ellos la masa cambia de modo apreciable. Por eso escribiremos la energía E de una partícula o núcleo en la forma:

$$E = T + mc^2 \quad [34.4.1]$$

siendo T la energía cinética³, m la masa y c la velocidad de la luz en el vacío.

Puesto que el megaelectronvoltio (1 MeV = 1.602×10^{-13} J) es la unidad de energía preferida en física nuclear, resulta muy conveniente mantener esta unidad en los cálculos de la cinemática de los procesos nucleares, para lo cual es preciso alterar las unidades de masa, momento y velocidad de la manera siguiente.

La fórmula clásica de la energía cinética puede escribirse así:

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}mc^2\left(\frac{v}{c}\right)^2$$

y la del momento $p = mv$ conduce a

$$pc = mc^2\left(\frac{v}{c}\right)$$

³ En otros capítulos de este libro se designa la energía cinética con la letra E , que aquí reservamos para la energía, que incluye la de reposo.

Estas expresiones muestran que podemos medir coherentemente la energía en MeV, la masa en MeV/c^2 , el momento en MeV/c y la velocidad en unidades de c ($3 \times 10^{10} \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$) y carente de dimensiones. Con estas unidades son válidas las expresiones clásicas

$$T = \frac{1}{2}mv^2 \quad p = mv \quad [34.4.2]$$

y es preciso reescribir [34.4.1] en la forma

$$E = T + m \quad [34.4.3]$$

Con estas unidades, los cálculos son muy simples. Consideremos un protón, por ejemplo, cuya masa es $938.28 \text{ MeV}/c^2$ según la tabla 34.1. Si su energía cinética es $T = 10 \text{ MeV}$, su velocidad será

$$v = 3 \cdot 10^{10} \cdot \sqrt{2 \cdot 10/938.28} = 4.38 \times 10^9 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$$

y su momento

$$p = \sqrt{2 \cdot 938.28 \cdot 10} = 137 \text{ MeV}/c$$

Si queremos ahora calcular el radio de curvatura r de dicho protón en presencia de un campo magnético B , podemos utilizar la fórmula práctica:

$$Br = \frac{10^4}{3q} p \quad [34.4.4]$$

donde B debe ponerse en gauss ($1\text{G} = 10^{-4}$ tesla), r en centímetros y p en MeV/c ; q es la carga eléctrica tomando como unidad la carga eléctrica elemental (para el protón $q = 1$). La fórmula anterior es también válida si se calcula p relativísticamente. El radio de curvatura de nuestro protón en un campo de 5000 gauss será $r = 91.3 \text{ cm}$.

Antes de terminar con estas cuestiones prácticas recordemos que la unidad de masa atómica (de símbolo u) es por definición la dozava parte de la masa del átomo de carbono-12, y equivale a

$$1u = 1.66057 \times 10^{-27} \text{ kg} = 931.5 \text{ MeV}/c^2$$

La conservación de la energía en todo proceso nuclear exige que

$$\Sigma E_i = \Sigma E_f$$

donde el índice i se refiere a las partículas o núcleos iniciales y el índice f a los finales. Según [34.4.3], la ecuación anterior equivale a

$$\Sigma(T_i + m_i) = \Sigma(T_f + m_f)$$

o bien a

$$\Sigma(m_i - m_f) = \Sigma(T_f - T_i) = Q \quad [34.4.5]$$

El valor de Q es característico del proceso de que se trate y puede ser positivo o negativo. Si Q es positivo, la masa de los productos finales es inferior a la de los iniciales y se desprende energía; el proceso se llama exoenergético y la energía cinética de los productos finales es mayor que la de los iniciales. Si Q es negativo, sucede lo contrario y el proceso es endoenergético.

La conservación del momento exige que se cumpla

$$\Sigma \mathbf{p}_i = \Sigma \mathbf{p}_f \quad [34.4.6]$$

cuyos subíndices tienen el mismo significado que en el caso de la energía. Obsérvese que la precedente ecuación vectorial representa tres ecuaciones, una por cada componente.

34.5. DESINTEGRACIONES Y REACCIONES NUCLEARES

En una desintegración alfa, por ejemplo, un núcleo emite una partícula alfa y queda convertido en otro núcleo con menor masa e inferior número atómico.

Podemos representar el suceso en la forma



Si el núcleo 1 está inicialmente en reposo, la relación [34.4.5] indica que

$$Q = m_1 - (m_2 + m_3) = T_2 + T_3$$

En este caso la energía desprendida Q es necesariamente positiva porque, de no ser así, la desintegración no ocurriría. La conservación del momento [34.4.6] se reduce en este caso a $\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 = 0$, lo que indica que el núcleo 2 y el 3 salen en direcciones opuestas, y como $|\mathbf{p}| = \sqrt{2mT}$, la condición queda en

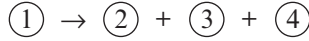
$$m_2 T_2 = m_3 T_3$$

que, combinada con la ecuación de conservación de la energía, conduce a

$$T_3 = \frac{m_2}{m_2 + m_3} Q \quad , \quad T_2 = Q - T_3 \quad [34.5.1]$$

Obsérvese que si fuese $m_2 \gg m_3$, resultaría que $T_3 \approx Q$, es decir, que la partícula más ligera se llevaría prácticamente toda la energía disponible.

En un proceso de desintegración en tres cuerpos



la conservación de la energía se expresa por

$$Q = m_1 - (m_2 + m_3 + m_4) = T_2 + T_3 + T_4$$

y la del momento (supuesto como antes que el núcleo está en reposo) por

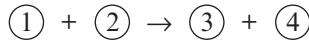
$$\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4 = 0$$

Estas ecuaciones no bastan para determinar las energías de las partículas que resultan de la desintegración. En el caso de que la masa m_2 fuera mucho mayor que las m_3 y m_4 , la partícula 2 se llevaría muy poca energía, y se tendría

$$T_3 + T_4 \approx Q$$

pero no se podría predecir cómo se reparte Q entre los núcleos 3 y 4.

Consideremos ahora una reacción nuclear sencilla con dos núcleos iniciales y dos finales que simbolizamos por



y supongamos que, como ocurre normalmente, la partícula 1 con energía T_1 incide sobre el núcleo 2, que está en reposo ($T_2 = 0$).

La conservación de la energía se expresa ahora por

$$Q = m_1 + m_2 - (m_3 + m_4) = T_3 + T_4 - T_1$$

y la conservación del momento $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4$ implica la conservación de la componente en la dirección de incidencia de la partícula 1 y de la componente perpendicular a ella en el plano de salida de los núcleos 2 y 3 (véase figura 34.2), es decir

$$\begin{aligned} \sqrt{2m_1T_1} &= \sqrt{2m_3T_3} \cos \theta_3 + \sqrt{2m_4T_4} \cos \theta_4 \\ 0 &= \sqrt{2m_3T_3} \sin \theta_3 + \sqrt{2m_4T_4} \sin \theta_4 \end{aligned}$$

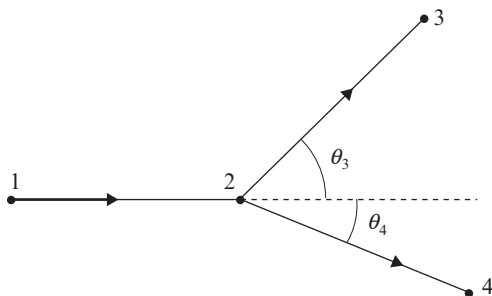


Figura 34.2. Esquema de una reacción nuclear en la que la partícula 1 incide sobre el núcleo 2 en reposo y da lugar a los núcleos o partículas 3 y 4.

Eliminando θ_4 y T_4 de las tres fórmulas anteriores se obtiene

$$Q = T_3 \left(1 + \frac{m_3}{m_4} \right) - T_1 \left(1 - \frac{m_1}{m_4} \right) - \frac{2}{m_4} \sqrt{m_1 T_1 m_3 T_3} \cos \theta_3 \quad [34.5.2]$$

Esta ecuación permite determinar Q si se conoce T_1 y se mide T_3 para un ángulo θ_3 , admitiendo como buena aproximación la sustitución de las masas de los núcleos por sus números másicos. Para resolver el problema inverso, es decir, calcular T_3 para el ángulo θ_3 conocidos T_1 y Q , la fórmula es poco práctica, pero puede programarse la ecuación en una calculadora y proceder por tanteo. Existe otra ecuación que resuelve directamente este problema inverso, pero es tan complicada que hay que recurrir a una calculadora de todas maneras.

34.6. REACCIONES EN EL SISTEMA DEL CENTRO DE MASAS

Para la resolución de algunos problemas de cinemática de reacciones nucleares resulta más cómodo trabajar en el sistema de referencia del centro de masas (CM) que en sistema del laboratorio (L).

Nos referiremos de nuevo a la reacción nuclear simple estudiada en el apartado anterior y usaremos letras con tilde para las magnitudes en el sistema del centro de masas. Observando la figura 34.3 y llamando v_c a la velocidad del centro de masas respecto del laboratorio, vemos que

$$v_c = v'_2 \quad , \quad v'_1 = v_1 - v_c$$

y por la propia definición del centro de masas debe ser

$$m_1 v'_1 = m_2 v'_2$$

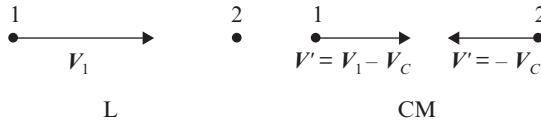


Figura 34.3. Velocidades de las partículas iniciales de una reacción nuclear en el sistema del laboratorio L y en el del centro de masas CM.

De las tres ecuaciones resulta

$$v_c = \frac{m_1}{m_1 + m_2} v_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \sqrt{\frac{2T_1}{m_1}}$$

La energía cinética en el sistema CM es

$$T' = T'_1 + T'_2 = \frac{m_2}{m_1} T'_2 + T'_2 = \left(\frac{m_2}{m_1} + 1\right) \frac{1}{2} m_2 v_c^2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} T_1$$

Esta energía cinética es la que realmente interviene en las reacciones nucleares, ya que el resto de la energía cinética inicial se invierte simplemente en comunicar un movimiento de traslación a los núcleos resultantes de la reacción. Por eso conviene que T' sea la mayor posible, y para conseguirlo siempre se hacen incidir partículas o núcleos ligeros sobre núcleos más pesados quietos, y no al revés.

La conservación de la energía en el sistema CM viene dada por

$$T' + Q = T'_3 + T'_4$$

Si la reacción es endoenergética ($Q < 0$), sólo se producirá si $T' \geq |Q|$, lo cual nos indica que la energía mínima T_1 (en el laboratorio) o energía umbral de la reacción será

$$T_1 \text{ (umbral)} = \frac{m_1 + m_2}{m_2} |Q| \quad [34.6.1]$$

Consideremos ahora el caso de las colisiones elásticas para las cuales $Q = 0$. Éste es el caso, por ejemplo, del choque de un neutrón de energía moderada con un núcleo. Sean v_0 y T_0 la velocidad y energía cinética del neutrón antes del choque, respectivamente, y v , T después. En el sistema CM

$$v'_0 = v_0 - v_c = \frac{m_2}{m_1 + m_2} v_0$$

que es igual a v' porque en dicho sistema una colisión elástica es simplemente un cambio de dirección. El valor de v se obtiene componiendo vectorialmente v_c y v'_0 (véase figura 34.4), y conocido v se calcula

$$T = \frac{1}{2} m_1 v^2$$

Resulta

$$\frac{T}{T_0} = \frac{1+r}{2} + \frac{1-r}{2} \cos \theta'$$

siendo

$$r = \left(\frac{m_2 - m_1}{m_2 + m_1} \right)^2$$

El menor valor de la energía cinética del neutrón después del choque es $T_0 r$, que ocurre para $\theta' = 180^\circ$ (choque frontal) y que puede llegar a ser cero si $m_1 = m_2$ (colisión del neutrón con un protón).

Si la colisión en el sistema CM es isótropa (y esto es aproximadamente cierto para neutrones con $T \leq 10$ MeV), la probabilidad de que la desviación esté comprendida entre θ' y $\theta' + d\theta'$ será $2\pi \sin \theta' d\theta' = 2\pi d(\cos \theta')$ (véase [34.2.2]), lo que quiere decir que todos los valores de $\cos \theta'$ son equiprobables y, por consiguiente, todos los valores entre T_0 y $T_0 r$ para la energía final del neutrón son también equiprobables, de aquí que la probabilidad

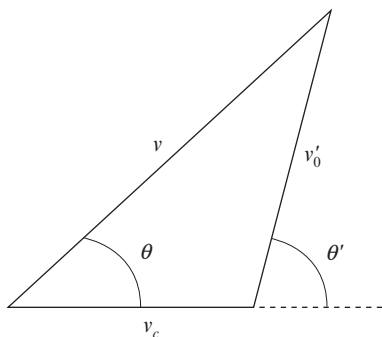


Figura 34.4. Relación geométrica entre velocidades y ángulos en L y CM para una colisión elástica.

de que la energía de un neutrón después de un choque elástico esté comprendida entre T y $T + dT$ sea simplemente

$$P(T) dT = \frac{dT}{T_0 - rT_0}$$

es decir, la relación entre el intervalo dT y todos los valores posibles ($T_0 - rT_0$).

Con esta expresión puede calcularse la pérdida de energía logarítmica media por choque

$$\xi = \overline{\ln T_0 - \ln T} = 1 + \frac{r}{1-r} \ln r \quad [34.6.2]$$

que curiosamente resulta ser independiente de la energía inicial T_0 del neutrón. Todas estas fórmulas tienen mucho interés en la ralentización de los neutrones por medio de moderadores, lo cual es importante en las aplicaciones técnicas de la energía nuclear.

EJERCICIOS

34.1. Calcular la fracción de neutrones lentos que atravesarán una lámina de hierro de 2 mm de espesor sin haber sido absorbidos ni desviados. La sección eficaz total del hierro para tales neutrones es $\sigma = 13.5$ b y la densidad del hierro es $\rho = 7.86 \text{ g} \times \text{cm}^{-3}$ y su peso atómico es 55.85.

34.2. Calcular el camino libre medio de un neutrón lento en agua sabiendo que las secciones eficaces totales del hidrógeno y oxígeno son 39 b y 4 b, respectivamente.

34.3. Calcular la actividad de una muestra de 5 mg de ^{226}Ra sabiendo que el período de desintegración es $T = 1608$ años.

34.4. Un haz de neutrones lentos de una intensidad de $108 \text{ cm}^{-2} \times \text{s}^{-1}$ incide sobre una lámina de oro (^{197}Au) de 0.01 mm de espesor y 1 cm^2 de superficie. Algunos neutrones son capturados y se produce ^{198}Au , que es radioactiva y tiene un período de 2.7 días. Calcular la actividad de la lámina al cabo de un día de irradiación. La densidad del oro es $\rho = 19.3 \text{ g} \times \text{cm}^{-3}$ y la sección eficaz de activación es $\sigma = 98$ b. Como la lámina es muy fina, no hay que tener en cuenta la atenuación del haz de neutrones que la atraviesa.

34.5. Estudiar teóricamente la cadena radioactiva constituida por núcleos de tipo 1 que se desintegran produciendo núcleos de tipo 2 que se desintegran a su vez en núcleos de tipo 3, que son estables.

- 34.6.** Demostrar la fórmula [34.4.4].
- 34.7.** Calcular la energía de la partícula alfa en la desintegración [34.1.4].
- 34.8.** Calcular la energía de los neutrones que se producen en la reacción [34.1.3] en dirección perpendicular a la partícula alfa cuya energía cinética es 2 MeV.
- 34.9.** Calcular la energía mínima que debe tener el protón para que se produzca la reacción endoenergética [34.1.2].
- 34.10.** Calcular el número de choques elásticos que habrá de sufrir un neutrón de 2 MeV que penetre en un bloque de grafito para que su energía se reduzca a 0.025 eV (neutrón térmico).

35

Interacción de radiaciones ionizantes con la materia

Carlos Sánchez del Río

35.1. RADIACIONES IONIZANTES

Se da el nombre de radiaciones ionizantes a las partículas cargadas (electrones, protones, partículas alfa, muones, piones, etc.) y radiación electromagnética (rayos ultravioleta, Röntgen o gamma) que ionizan los átomos o moléculas de la materia en la cual penetran. Evidentemente para que ello ocurra es preciso que la energía de tales partículas o fotones sea superior a la energía de ionización de los átomos o moléculas. Para las partículas cargadas o fotones que resultan de los procesos nucleares esta condición siempre se cumple porque las energías de ionización son siempre del orden de decenas de electronvoltios y las energías de las radiaciones nucleares son del orden de megaelectronvoltios.

Las partículas ionizantes actúan directamente sobre los átomos o moléculas que encuentran en su camino, aunque también intervienen procesos indirectos. Los fotones, en cambio, sólo ionizan por mecanismos indirectos asociados a su desaparición o transformación en otros fotones de menor energía. En ambos casos los fenómenos de interacción de las radiaciones ionizantes con la materia son complicados porque se superponen muchos efectos y es preciso conocerlos todos para entender la penetración de las radiaciones ionizantes en la materia.

Este conocimiento es importante en relación con tres clases de problemas:

- i) Detección de las radiaciones ionizantes.
- ii) Efectos biológicos de dichas radiaciones.
- iii) Diseño de blindajes para protegernos contras las mismas.

35.2. INTERACCIÓN DE PARTÍCULAS CARGADAS CON LA MATERIA

Cuando las partículas cargadas rápidas penetran en la materia y encuentran átomos o moléculas a su paso pueden ocurrir los siguientes procesos: colisiones elásticas o inelásticas con los átomos, producción de radiación de frenamiento (Bremsstrahlung), producción de radiación visible por efecto Cherenkov e interacciones nucleares. Analizaremos a continuación estos procesos:

- a) Colisiones elásticas. Son simples desviaciones de las partículas por el potencial de los átomos. La pérdida de energía de la partícula incidente es mínima porque ordinariamente su masa es muy inferior a la de los átomos contra los cuales chocan. Las grandes desviaciones ocurren en los choques profundos, y como cerca del núcleo el potencial atómico es casi coulombiano, la sección eficaz de dispersión viene dada por la celebrada fórmula de Rutherford¹:

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{4} \left(\frac{Zze^2}{mv^2} \right)^2 \frac{1}{\text{sen}^4 \theta/2} \quad [35.2.1]$$

En esta ecuación, Z es el número atómico del átomo, z el de la partícula y m , v la masa y velocidad de la misma. Lo más interesante de la expresión anterior es que la sección eficaz de una colisión elástica es proporcional a la inversa del cuadrado de la masa de la partícula incidente. Por eso el proceso es muy importante en el caso de los electrones y millones de veces más raro si inciden protones o partículas alfa.

- b) Colisiones inelásticas. La partícula incidente al pasar cerca del átomo lo excita o le arranca un electrón (ionización primaria); los electrones arrancados se llaman rayos δ y producen a su vez una ionización secundaria. Las características de la pérdida energética de la partícula incidente pueden deducirse parcialmente con el siguiente argumento clásico. Como antes, llamaremos z y v a la carga en unidades elementales y a la velocidad de la partícula incidente. Esta partícula comunica a un electrón del átomo un impulso $p = F \Delta t$, siendo F la fuerza y Δt el tiempo durante el cual actúa. La fuerza viene dada por la ley de Coulomb $F = ze^2/b$ (e es la carga elemental y b la distancia entre la partícula y el átomo) y Δt puede estimarse como b/v . La pérdida de energía δE es igual a la que gana el electrón arrancado, que es $p^2/2m_e$ (m_e es la masa del electrón); por tanto, podemos escribir

$$\delta E = \frac{z^2}{v^2} f(v) \quad [35.2.2]$$

siendo $f(v)$ una función que varía poco con la velocidad, y que para energías grandes de la partícula incidente aumenta con el número atómico Z del átomo porque en ese caso todos los electrones del átomo son arrancables y no sólo los más externos. Lo más notable de la ecuación anterior es que la pérdida energética no depende de la masa de la partícula incidente y aumenta mucho cuando su velocidad es pequeña.

- c) Radiación de frenado (Bremsstrahlung). Cuando una partícula cargada rápida pasa muy cerca de un núcleo atómico es desviada violentamente y emite un fotón (véase figura 35.1(a)) con la consiguiente pérdida de energía. La energía del fotón

¹ Nótese que en los capítulos 35, 36 y 37 se utilizan unos convenios para los potenciales en electromagnetismo diferentes a los empleados en los capítulos 1 a 18.

$\hbar\omega$ (ω es la frecuencia circular y \hbar la constante de Planck reducida como de costumbre) puede ser cualquiera hasta un valor máximo igual a la energía de la partícula incidente si ésta queda completamente frenada por el núcleo. Por eso el espectro de Bremsstrahlung es continuo, como muestra la figura 35.1.(b). Los rayos X que se producen haciendo incidir electrones rápidos sobre un blanco metálico muestran este espectro continuo sobre el cual se superponen las líneas características de los átomos del blanco que proceden de las transiciones de los electrones del átomo que vienen a ocupar los huecos que dejan los electrones arrancados por colisiones inelásticas.

Un argumento clásico sencillo nos muestra dos importantes características de la pérdida energética debida a la radiación de frenamiento. La fuerza electrostática que ejerce el núcleo sobre la partícula incidente es $F = Zze^2/b^2$ con el significado de cada símbolo que ya conocemos. Esta fuerza provoca una aceleración $a = F/m$ si m es la masa de la partícula. Según la electrodinámica clásica, una carga eléctrica acelerada emite radiación cuya energía es proporcional al cuadrado de la carga y al cuadrado de la aceleración. Esta energía emitida es la que pierde la partícula y, por tanto,

$$\delta E \text{ es proporcional a } \frac{Z^2}{m^2} \quad [35.2.3]$$

Esta conclusión es muy importante porque nos muestra que los electrones (con m muy pequeña) producen millones de veces más radiación de frenado que las partículas más pesadas. La dependencia con el número atómico Z también es muy acusada porque crece con su cuadrado. Por eso en los tubos de rayos X se usan como anticátodo metales de número atómico elevado. En cambio, cuando se pretende blindar contra electrones, conviene un material con Z pequeño (un plástico, por ejemplo) para que se produzcan pocos fotones, que serán más fáciles de eliminar después.

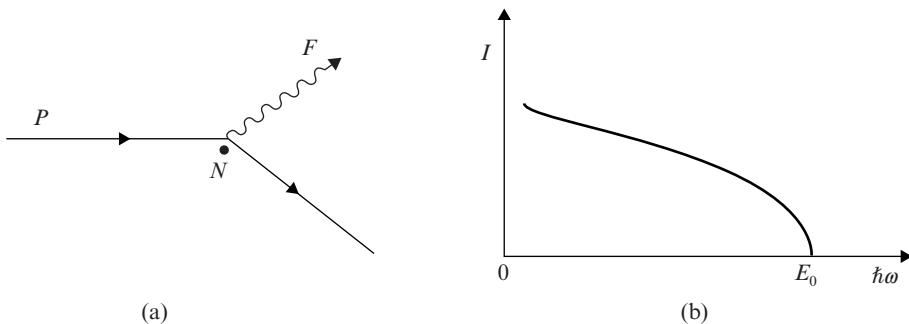


Figura 35.1. Radiación de frenado. Una partícula P desviada por un núcleo N emite un fotón F (a). El espectro de estos fotones es continuo (b) con un valor máximo dado por $\hbar\omega_{\text{máx}} = E_0$, siendo E_0 la energía de la partícula incidente.

- d) Efecto Cherenkov. Si una partícula cargada penetra en un medio transparente va polarizando los átomos o moléculas que encuentra en su camino. Si la partícula va despacio, la polarización es simétrica y no da lugar a ninguna radiación neta. Pero si la partícula lleva una velocidad v superior a la velocidad de la luz en el medio c/n (n es el índice de refracción), se produce luz con un frente de onda coherente que se emite con un ángulo de salida θ dado por

$$\cos \theta = \frac{c}{n} \frac{1}{v} \quad [35.2.4]$$

(véase figura 35.2). La luz se emite con longitudes de onda superiores a las bandas de absorción ultravioleta del medio. En agua, se emiten unos 10 fotones por mm de longitudes de onda comprendidas entre 400 nm y 600 nm (luz visible azulada). Este efecto Cherenkov no contribuye, por tanto, significativamente a la pérdida de energía de la partícula, pero es importante en la detección de partículas muy rápidas cuya presencia se manifiesta por esta luz de Cherenkov; se pueden usar medios gaseosos cuyo índice de refracción es muy ligeramente superior a la unidad, con lo cual se detectan sólo partículas cuya velocidad es próxima a la de la luz en el vacío, ignorándose las demás.

- e) Interacciones nucleares. Las partículas cargadas que penetran en la materia pueden reaccionar con los núcleos que encuentran a su paso, pero esto ocurre muy raramente porque las secciones eficaces de estas reacciones son del orden de 10^{-26} cm^2 , mientras que las colisiones partícula-átomo tienen secciones eficaces típicas del orden de 10^{-16} cm^2 . Por eso los efectos nucleares son irrelevantes en cuanto a la pérdida energética de las partículas cargadas que atraviesan la materia. Sólo para los neutrones son decisivas las colisiones o reacciones nucleares, porque los neutrones no pueden actuar sobre los átomos al carecer de carga eléctrica. Por tal razón los neutrones no se consideran partículas ionizantes, a pesar de que si penetran en un medio que contenga mucho hidrógeno se produce una ionización secundaria que originan los protones de retroceso que resultan de los

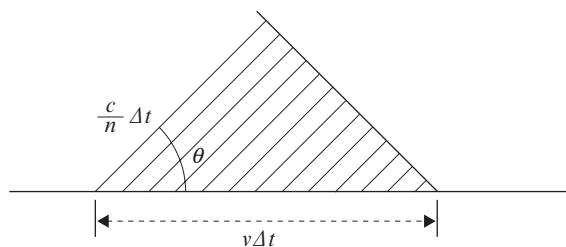


Figura 35.2. Efecto Cherenkov. Durante el tiempo Δt la partícula recorre el espacio $v\Delta t$ y la luz avanza $(c/n)\Delta t$, por lo cual el frente de onda coherente se emite en una dirección θ que cumple la condición [35.2.4].

choques de neutrones rápidos con los protones. Para ser exactos, conviene añadir que entre los neutrones y los átomos hay una débil interacción debida al momento magnético de aquellos, pero esta interacción sólo tiene interés cuando los neutrones penetran en un medio ferromagnético.

35.3. PENETRACIÓN DE PARTÍCULAS CARGADAS EN LA MATERIA

Los procesos descritos en el apartado anterior dependen muy fuertemente de la masa de la partícula incidente; ésta es la razón por la cual las partículas pesadas y los electrones se comportan de modo tan diferente cuando penetran en la materia. Por eso describiremos separadamente lo que sucede en ambos casos:

- a) Partículas pesadas (partícula alfa, protones, piones, etc.). Fundamentalmente, estas partículas van perdiendo energía por colisiones inelásticas y sólo cuando están casi paradas intervienen complejos procesos de captura y pérdida de electrones del medio de difícil descripción. La consecuencia es que un haz de partículas pesadas paralelo que incide en un medio material mantiene su dirección e intensidad hasta que se detiene cuando las partículas han perdido toda su energía (figura 35.3). Por eso puede definirse un alcance R o distancia media recorrida por las partículas en el medio teniendo en cuenta las variaciones individuales que se manifiestan en una cierta dispersión S .

Las partículas alfa de unos pocos MeV de energía tienen un alcance de varios centímetros en el aire y de algunos micrometros en los líquidos o sólidos. Más concretamente, el alcance de una partícula alfa de 2 MeV es de 1 cm en el aire y de 0.006 mm en aluminio.

La fórmula [35.2.2] permite obtener una expresión interesante para el alcance en función de la velocidad de la partícula. En efecto²

$$R(v_0) = \int_0^{E_0} \frac{dE}{-dE/dx} = \int_0^{v_0} \frac{mv \, dv}{(z^2/v^2)f(v)} = \frac{m}{z^2} F(v_0)$$

donde $F(v)$ es una función universal de la velocidad para cada medio. La fórmula anterior indica que los alcances para dos partículas distintas de la misma velocidad en el mismo medio están relacionados por

$$R'(v) = \frac{m'}{m} \left(\frac{z}{z'} \right)^2 R(v) - c_0 \quad [35.3.1]$$

² Obsérvese que $-dE/dx$ es la pérdida de energía por unidad de recorrido; para un medio determinado depende de z y v , del mismo modo que δE en [35.2.2].

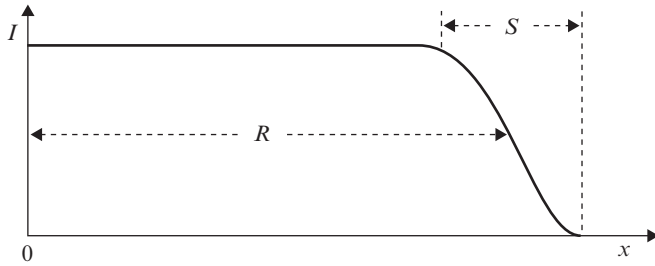


Figura 35.3. Intensidad I o número de partículas pesadas de un haz paralelo en función de la distancia recorrida en la dirección del eje OX . La distancia media R hasta que se detienen es el alcance. La dispersión S muestra que no todas las partículas tienen el mismo alcance.

donde c_0 es una pequeña corrección empírica que hay que añadir si $z' \neq z$ para tener en cuenta que los efectos de captura y pérdida de energía cuando la partícula está casi parada son distintos.

Conviene señalar que las consideraciones anteriores se refieren a medios amorfos, porque en los cristales adecuadamente orientados se producen curiosos fenómenos de canalización que aumentan el alcance de las partículas que penetran en ellos.

- b) **Electrones.** La penetración de los electrones en la materia es muy diferente de lo que sucede con partículas pesadas. En primer lugar, las colisiones elásticas son muy frecuentes, como indica [35.2.1]; por ello, un haz paralelo de electrones se esparce al entrar en la materia y no es posible definir estrictamente su alcance. A pesar de ello se suele hablar de un alcance extrapolado en el siguiente sentido. Si se miden los electrones que atraviesan una lámina en función del espesor x , de la misma se obtiene una curva como la que se muestra en la figura 35.4. El alcance R que en ella se indica depende de la geometría del experimento, pero tiene

TABLA 35.1

Relación energía-alcance para partículas alfa en aire a 10 °C y 760 mm Hg de presión

$E(\text{MeV})$	$R(\text{cm})$
0.5	0.3
1	0.5
1.5	0.7
2	1.0
3	1.7
4	2.5
5	3.4
6	4.7
7	5.9
8	7.4

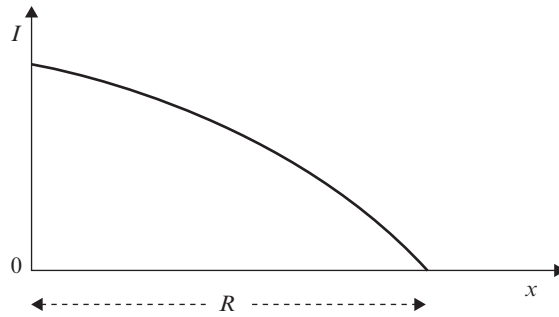


Figura 35.4. Intensidad I de los electrones que atraviesan una lámina en función del espesor x de la misma. R es el alcance extrapolado.

cierta utilidad para comparar distintos haces de electrones con el mismo dispositivo experimental. Además, y dentro de la imprecisión del concepto, puede afirmarse que el alcance de los electrones de unos pocos MeV es de metros en aire y de milímetros en aluminio o agua.

Otro efecto de las colisiones elásticas se manifiesta en el poder reflector de sólidos y líquidos cuando inciden electrones sobre su superficie. Según [35.2.1], el poder reflector crece fuertemente con el número atómico Z del medio, y no es raro que sobrepase el 10%.

La pérdida energética de los electrones se debe principalmente a colisiones inelásticas (ionización) para energías bajas y a radiación de frenado para energías altas. La pérdida por ionización es proporcional al número de electrones del medio, es decir, a Z (número atómico del medio) e inversamente proporcional a la energía cinética de los electrones incidentes, según [35.2.2], y las líneas que siguen a dicha fórmula. La pérdida por radiación, en cambio, es proporcional a Z^2 , según [35.2.3], y varía poco con la energía de los electrones incidentes. El efecto relativo viene dado aproximadamente por la fórmula

$$\frac{\text{Pérdida por radiación}}{\text{Pérdida por ionización}} \approx \frac{ZE(\text{MeV})}{800}$$

A muy altas energías el paso de los electrones por la materia resulta de gran complejidad porque la radiación de Bremsstrahlung da lugar a nuevos electrones y positrones por producción de pares (véase apartado 35.4.c), con lo que se forman complicadas cascadas de electrones y fotones.

35.4. INTERACCIÓN DE FOTONES CON LA MATERIA

Los fotones de baja energía que inciden sobre los átomos pueden ser dispersados coherentemente. Este fenómeno se llama dispersión de Rayleigh, crece con la cuarta potencia

de la frecuencia y explica el color azul del cielo y el tono rojizo de las puestas de sol. Aquí, sin embargo, nos interesan los procesos que ocurren cuando los fotones de energía superior a la de ionización de los átomos (fotones ionizantes) se encuentran con éstos. Estos procesos son: efecto fotoeléctrico, efecto Compton, producción de pares e interacciones nucleares. Analizaremos a continuación estos procesos:

- a) Efecto fotoeléctrico. Un fotón de energía $\hbar\omega$ puede comunicar toda su energía a un electrón del átomo; el fotón desaparece y el electrón se separa del átomo y se mueve con una energía cinética $E = \hbar\omega - E_B$, siendo E_B la energía de enlace del electrón en el átomo. La sección eficaz del efecto fotoeléctrico disminuye rápidamente al aumentar la energía del fotón, pero aumenta bruscamente cada vez que la energía es suficiente para arrancar electrones más internos del átomo. En la zona de energías en la que el fotón puede expulsar electrones de las capas L y K del átomo, la sección eficaz varía, como se muestra esquemáticamente en la figura 35.5. La figura es sólo cualitativa porque la disminución de la sección eficaz del efecto fotoeléctrico σ_F es tan grande que, superada la energía umbral E_K de los electrones de la capa K del átomo, prácticamente sólo se emiten éstos por efecto fotoeléctrico.

La energía de enlace de los electrones K de un átomo viene dada, aproximadamente, por

$$E_K \approx (Z - 1)^2 \cdot 13.6 \text{ eV} \quad [35.4.1]$$

y para energías del fotón superiores a ésta ($\hbar\omega > E_K$), cálculos no relativistas conducen a la siguiente fórmula aproximada para la sección eficaz del efecto fotoeléctrico

$$\sigma_F \approx 10^{-9} Z^5 E^{-7/2} \quad [35.4.2]$$

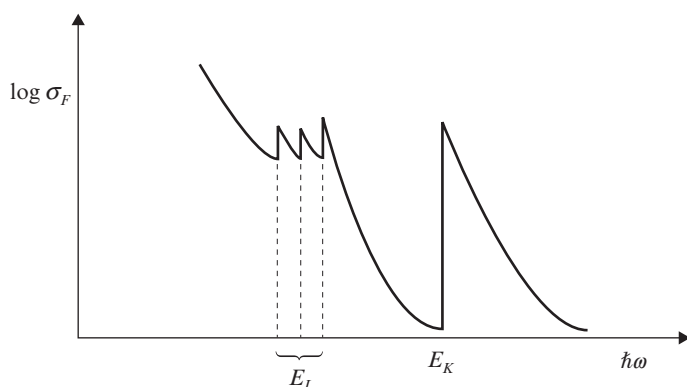


Figura 35.5. Sección eficaz del efecto fotoeléctrico que muestra aumentos bruscos para energías $\hbar\omega$ del fotón iguales a las energías de enlace de las subcapas L y de la capa K .

Interacción de radiaciones ionizantes con la materia

En esta expresión práctica hay que poner E (energía del fotón) en MeV para obtener σ_F en barn (10^{-24} cm²).

El hueco que queda en la capa K cuando es emitido un electrón fotoeléctrico es ocupado por un electrón L y se emiten rayos X de energía

$$\hbar\omega = E_K - E_L$$

o bien se emite un electrón L (efecto Auger³) de energía

$$E_K - E_L - E_L = E_K - 2E_L$$

La emisión de rayos X aumenta con el número atómico Z mientras que los electrones Auger son importantes para átomos ligeros.

- b) Efecto Compton. Cuando la energía del fotón que incide sobre un átomo es mucho mayor que la energía de enlace de un electrón, puede éste considerarse como libre, y es frecuente que este electrón libre reciba energía cinética de un fotón, el cual, al perder parte de su energía queda convertido en otro menos energético. Éste es el efecto Compton, que puede visualizarse (véase figura 35.6) como un choque elástico de un fotón de energía $\hbar\omega$ y momento $\hbar\omega/c$ con un electrón quieto. Después del choque, el nuevo fotón sale en una dirección que forma un ángulo θ con la del fotón inicial; su energía es $\hbar\omega'$ y su momento $\hbar\omega'/c$. El electrón adquiere una energía E y un momento p que, por tratarse de energía alta, están relacionados por la fórmula relativista $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$, siendo m la masa del electrón. Incidentalmente, diremos que esta misma fórmula justifica la expresión que hemos dado para el momento del fotón, puesto que la masa de éste es nula.

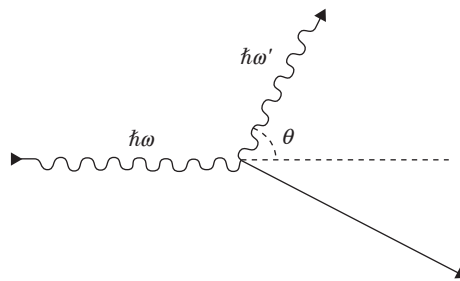


Figura 35.6. Representación esquemática de la colisión elástica fotón-electrón (efecto Compton).

³ En este proceso, la energía disponible no aparece como fotón, sino que se comunica a un electrón L que es expulsado del átomo.

Como consecuencia de la conservación de la energía y del momento, se tiene (véase capítulo 2)

$$\hbar\omega' = \frac{\hbar\omega}{1 + \frac{\hbar\omega}{mc^2}(1 - \cos\theta)} \quad [35.4.3]$$

que relaciona la energía $\hbar\omega'$ del nuevo fotón con su ángulo de salida. En esta fórmula pueden ponerse todas las energías en MeV; para el electrón $mc^2 = 0.511$ MeV.

La sección eficaz diferencial del efecto Compton (colisión de un fotón con un electrón) se puede calcular usando electrodinámica cuántica, y viene dada por la fórmula de Klein-Nishina:

$$\frac{d\sigma_c}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} (P - P^2 \text{sen}^2 \theta + P^3) \quad [35.4.4]$$

siendo $P = \hbar\omega'/\hbar\omega$, y

$$r_0 = \frac{e^2}{mc^2} = 2.818 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$$

el llamado radio clásico del electrón. Integrando la sección eficaz diferencial para todos los ángulos, se obtiene la sección eficaz total, que es una fórmula bastante complicada. Llamando $q = \hbar\omega/mc^2$, se tienen las aproximaciones

$$\sigma_c = \sigma_0 \left(1 - 2q + \frac{26}{5} q^2 \right) \quad \text{si } q \ll 1 \quad [35.4.5]$$

$$\sigma_c = \sigma_0 \frac{3}{8} \frac{1}{q} \left(\ln 2q + \frac{1}{2} \right) \quad \text{si } q \gg 1 \quad [35.4.6]$$

siendo

$$\sigma_0 = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 = 6.653 \cdot 10^{-26} \text{ cm}^2$$

la llamada sección eficaz de Thomson. La primera de las aproximaciones anteriores es muy buena para $q < 0.1$, y lo mismo puede decirse de la segunda si $q > 10$. Para $1 < q < 10$, la segunda produce un error por exceso inferior al 4%.

Observemos que para fotones de energía muy pequeña la sección eficaz del efecto Compton tiende a la sección eficaz de Thomson que se refiere al fenómeno clásico correspondiente: la dispersión de una onda electromagnética por un electrón libre. El campo eléctrico E de la onda produce en el electrón una aceleración eE/m , por efecto de la cual se emite, por segundo, la energía electromagnética.

$$u = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \left(\frac{eE}{m} \right)^2$$

Dividiendo u entre $cE^2/4\pi$, que es la energía incidente por cm^2 y por segundo, se obtiene la sección eficaz de Thomson.

- c) Producción de pares. Si la energía de un fotón incidente sobre la materia sobrepasa el doble de la energía en reposo del electrón ($2mc^2 = 1.022 \text{ MeV}$) puede darse el proceso de producción de pares: el fotón desaparece y surgen un electrón ordinario (negativo) y otro positivo (positrón). Si es $\hbar\omega$ la energía del fotón y T_+ , T_- las energías cinéticas de los electrones, la conservación de la energía exige que

$$T_+ + T_- = \hbar\omega - 2mc^2 \quad [35.4.7]$$

El fenómeno inverso (aniquilación de pares) también ocurre. Cuando un positrón ya lento encuentra un electrón negativo, forman ambos un sistema cuántico ligado (un positronio), que en un tiempo muy breve desaparece dando lugar a dos o más fotones.

La producción de pares requiere la presencia de un núcleo atómico, porque sin esta partícula extra no pueden conservarse a la vez la energía y el momento. En efecto, llamemos p_+ , p_- a los momentos del positrón y el electrón, respectivamente, Y escribamos la conservación de la energía usando fórmulas relativistas porque los electrones pueden ser muy rápidos:

$$\hbar\omega = (c^2 p_+^2 + m^2 c^4)^{1/2} + (c^2 p_-^2 + m^2 c^4)^{1/2}$$

de donde

$$\frac{\hbar\omega}{c} > p_+ + p_-$$

Pero si los tres momentos (el del fotón vale $\hbar\omega/c$) han de formar triángulo para que el momento se conserve, habrá de cumplirse

$$\frac{\hbar\omega}{c} \leq p_+ + p_-$$

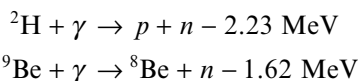
Ambas desigualdades son claramente incompatibles. Es necesaria la presencia de un núcleo para equilibrar las energías y los momentos, pero, obsérvese, que como la masa de cualquier núcleo es mucho mayor que la de los electrones, éstos se llevan prácticamente toda la energía del desaparecido fotón.

La electrodinámica cuántica permite calcular la sección eficaz de producción de pares, que es evidentemente nula para energías del fotón inferiores a la energía umbral ($2mc^2$) y crece después con la energía hasta un valor asintótico. Para una energía de unos 5 MeV

$$\sigma_p \approx Z^2 \times 10^{-27} \text{ cm}^2$$

y vale aproximadamente el doble para $\hbar\omega = 10$ MeV. Como se ve, el efecto es muy importante para átomos pasados porque crece con el cuadrado del número atómico.

- d) Interacciones nucleares. Son poco importantes en cuanto a los fotones, que son absorbidos por los núcleos. Tiene interés por otros motivos: la absorción resonante (efecto Mossbauer), que se describe en el capítulo 37. Para energías muy altas de los fotones incidentes pueden producirse reacciones fotonucleares cuyos productos residuales pueden ser núcleos radioactivos. Pero ninguna reacción sucede si la energía del fotón es inferior a unos 8 MeV, que es la energía media de enlace de los nucleones en el núcleo. Sólo hay dos excepciones a esta regla, y son las reacciones



(γ representa al fotón), que ocurren a energías más bajas y originan algunos neutrones. Tienen cierto interés en la producción de neutrones en circunstancias especiales

35.5. PENETRACIÓN DE FOTONES EN LA MATERIA

Teniendo en cuenta los procesos descritos en el apartado 35.4, la sección eficaz total de absorción de un fotón por la materia es

$$\sigma = \sigma_F + Z\sigma_c + \sigma_p \quad [35.5.1]$$

donde σ_F es la sección eficaz del efecto fotoeléctrico por átomo, σ_c la sección eficaz del efecto Compton por electrón y σ_p la sección eficaz de producción de pares por núcleo.

Interacción de radiaciones ionizantes con la materia

Para energías bajas del fotón predomina el efecto fotoeléctrico, que sigue la ley $Z^5 E^{-7/2}$, por lo que deja de intervenir a unos 200 keV para el aluminio y aún es dominante a 0.5 MeV para el plomo.

Para energías intermedias (0.8 – 3 MeV) predomina el efecto Compton, con el cual entra en competencia la producción de pares a partir del umbral de 1.02 MeV. Este último efecto es importante sobre todo para elementos pesados, porque para una misma energía la producción de pares crece con Z^2 , mientras que el efecto Compton sólo aumenta linealmente con Z .

Si un haz de fotones de energía moderada incide sobre una lámina de pequeño espesor la absorción es exponencial, de acuerdo con la fórmula [34.2.3]

$$I = I_0 e^{-N\sigma x} = I_0 e^{-\tau x} \quad [35.5.2]$$

siendo $\tau = N\sigma$ el coeficiente de absorción, que se expresa, en cm^{-1} , si x se mide en centímetros, y en cm^2/g si x se mide en g/cm^2 , que es lo que suele hacerse porque es más fácil medir con precisión de esta forma el espesor de una lámina fina. La tabla 35.2 muestra algunos coeficientes de absorción de fotones de diversas energías para aire, agua, aluminio y plomo.

Un haz de fotones de energía elevada que incida sobre una lámina gruesa no se absorbe exponencialmente porque ocurren procesos múltiples que dan lugar a cascadas muy complejas. Los electrones fotoeléctricos de Compton y de pares producen nuevos fotones de Bremsstrahlung. Éstos y los fotones de Compton producen nuevos electrones. Los positrones de los pares producidos se aniquilan y dan lugar a nuevos fotones, etc. Hay que tener en cuenta todas estas complicaciones para calcular el blindaje contra rayos gamma de fuentes de radiación intensas (un reactor nuclear, por ejemplo), por eso dicho cálculo es muy difícil. Para fuentes débiles, como los isótopos radioactivos que se usan en el laboratorio, el problema no se plantea porque se puede poner el doble del blindaje que se necesita sin repercusión económica adversa.

TABLA 35.2

Coefficientes de absorción τ de fotones en varios medios; τ está dado en cm^2/g y la energía de los fotones en unidades $mc^2 = 0.511 \text{ MeV}$. Las densidades del aire, agua, aluminio y plomo son 0.0012, 1, 2.72 y 11.34 g/cm^3 , respectivamente

$\hbar\omega/mc^2$	Aire	Agua	Aluminio	Plomo
0.1	0.168	0.186	0.31	
0.5	0.112	0.124	0.11	0.40
1	0.087	0.095	0.081	0.15
2	0.062	0.069	0.059	0.071
5	0.039	0.043	0.037	0.042
10	0.027	0.030	0.028	0.042
20	0.018	0.022	0.023	0.054
100	0.017	0.017	0.024	0.092
1000	0.019	0.019	0.028	0.124

35.6. DETECCIÓN DE RADIACIONES IONIZANTES

Históricamente, las emulsiones fotográficas fueron el primer método de detección de las radiaciones ionizantes emitidas por las sustancias radioactivas naturales. Pero ya se había visto que los rayos X son causa de que se descarguen rápidamente los electrómetros porque ionizan el aire de su interior haciéndolo conductor. Actualmente, se siguen utilizando ambos métodos para la medida global de las radiaciones ionizantes con vistas a la protección radiológica, aunque también se usan con el mismo objeto otros procedimientos, como la termoluminiscencia.

Para la investigación de procesos nucleares, sin embargo, se usan otros instrumentos que permiten contar partículas individualmente, medir su energía o visualizar sus trayectorias. No entraremos aquí en la descripción de tales detectores, que requeriría además la exposición de la instrumentación nuclear que los acompaña.

Nos limitaremos a enumerar diversos tipos de detectores y a mencionar algunas de sus características y aplicaciones.

A) *Contadores de partículas*

a) *Detectores de ionización*

1. Cámaras de ionización. Constan de un ánodo y un cátodo inmersos en un recinto con gas a presión. Se aplica una tensión elevada entre ambos electrodos y se pueden medir (con buenos amplificadores) los impulsos de corriente que se producen cada vez que una partícula cargada penetra en el gas y lo ioniza, de manera que los electrones van al ánodo y los iones positivos al cátodo. Si la partícula deposita toda su energía en el gas, los impulsos eléctricos son proporcionales a la energía de la partícula. Actualmente, las cámaras de ionización se utilizan poco para la detección individual de partículas porque son de manejo muy delicado.
2. Contadores proporcionales. Si el ánodo de una cámara de ionización está constituido por un alambre muy fino, el campo eléctrico a su alrededor es grande y los electrones que ha producido una partícula ionizante adquieren suficiente energía como para provocar nuevas ionizaciones, de manera que el impulso eléctrico resultante es mucho mayor que en una cámara de ionización. De este modo, el circuito amplificador externo es más simple. Estos contadores son muy utilizados para detectar neutrones mediante la reacción $^{10}\text{B}(n, \alpha)^7\text{Li}$ que se produce en el gas del contador, que se llena con trifluoruro de boro.
3. Contadores Geiger-Müller. Tienen la misma estructura que los contadores proporcionales pero funcionan a una tensión más alta, de manera que cada partícula que penetra produce una pequeña descarga que se extingue después de cada impulso por las características del gas de llenado. Los impulsos eléctricos son grandes y todos iguales, cualquiera que sea la energía depositada por la partícula detectada. Son muy fáciles de manejar, pero no permiten distinguir una partícula alfa muy ionizante de un fotón que ha producido un débil electrón por cualquiera de los efectos descritos en la sección 35.4.

- 4 Detectores de estado sólido. Son dispositivos análogos a una cámara de ionización, pero en ellos las partículas incidentes provocan pares electrón-agujero en una unión $p-n$ de silicio o germanio. Permiten una buena definición energética y son muy útiles en espectrometría nuclear.

b) Detectores de centelleo

1. Detectores de fluorescencia. Las partículas ionizantes o los electrones secundarios de los rayos gamma producen en materiales luminiscentes destellos luminosos más o menos proporcionales a la energía de las partículas ionizantes. Estos destellos se convierten en impulsos eléctricos mediante fotomultiplicadores. Estos detectores de centelleo tienen alta eficiencia para rayos gamma y son muy versátiles. Los materiales luminiscentes que se usan son muy variados (ZnS, NaI, líquidos, plásticos, etc.).
2. Detectores Cherenkov. Se utilizan para contar partículas muy rápidas detectando con fotomultiplicadores la luz que se emite por efecto Cherenkov [35.2.d].

B) Visualización de trayectorias

1. Placas fotográficas. Las partículas cargadas que penetran en emulsiones fotográficas especiales y muy gruesas permiten observar la traza que dejan a lo largo de su trayectoria. Para ello debe revelarse la emulsión muy cuidadosamente para evitar distorsiones. La observación se realiza con un microscopio.
2. Cámaras de niebla (o de Wilson). Los iones que produce una partícula cargada actúan de núcleos de condensación de un vapor sobresaturado, de modo que a lo largo de la trayectoria queda un rosario de gotitas que se ven a simple vista y pueden fotografiarse.
3. Cámaras de burbujas. En paralelo con las cámaras de niebla, las de burbujas muestran la trayectoria por un rosario de burbujas en un líquido a punto de hervir. Para partículas de alta energía son preferibles estas cámaras porque el alcance es menor en un líquido que en un gas, y puede así observarse una fracción importante de la trayectoria.
4. Cámaras de chispas. Con un entramado de alambres muy finos dentro de un recinto con un gas adecuado pueden conseguirse descargas eléctricas entre pares de hilos en el sitio por donde pasa una partícula ionizante. La trayectoria puede fotografiarse o reconstruirse mediante un computador a partir de señales ópticas o acústicas.

EJERCICIOS

- 35.1.** Comparar las pérdidas energéticas por ionización de un protón y una partícula alfa de la misma energía.

35.2. Calcular el ángulo de salida de la luz Cherenkov respecto de la dirección de un electrón de 1.25 MeV que se mueve dentro del agua. El índice de refracción del agua es 1.33.

35.3. Calcular el alcance aproximado de un núcleo de ${}^7\text{Li}$ de 2 MeV en aire.

35.4. Estimar el poder reflector del aluminio ($Z = 13$, $A = 27$) para electrones de 12.5 MeV sabiendo que el alcance efectivo de dichos electrones en el citado metal es de 0.5 g/cm^2 .

35.5. Calcular la atenuación de los rayos X de 50 keV por una lámina de grafito de 2 cm de espesor. El grafito contiene sólo ${}^{12}_6\text{C}$ y tiene una densidad de 1.6 g/cm^3 .

35.6. Calcular la fracción de fotones de 4 MeV que se dispersan por un objeto de 50 g constituido por elementos ligeros. Para tales elementos, Z/A vale aproximadamente $1/2$.

35.7. Una fuente muy intensa (100 Ci) de ${}^{42}\text{K}$ se observa por medio de un espejo de 100 g situado a 1 m de la fuente y 2 m del observador, siendo el ángulo fuente-espejo-observador de 90° . Calcular el flujo de fotones que llegan al observador sabiendo que el espejo está fabricado con elementos ligeros y que el ${}^{42}\text{K}$ emite rayos gamma de 1.51 MeV en el 25% de las desintegraciones.

35.8. Estudiar el espectro del electrón de retroceso del efecto Compton para fotones incidentes de 2 MeV de energía.

35.9. ¿Cuál es la energía de los fotones que se producen en la aniquilación de un par electrón-positrón?

35.10. Calcular la absorción de fotones 10 MeV por una lámina de plomo de 8 mm de espesor.

36

Estructura de los núcleos atómicos

Carlos Sánchez del Río

36.1. EL NÚCLEO COMO SISTEMA CUÁNTICO

Según vimos en la sección 34.1, la energía de enlace de un nucleón en el núcleo atómico es algo menor del 1% de su masa en reposo. Esto justifica que los protones y neutrones conserven, con bastante aproximación, su individualidad dentro del núcleo, lo que nos permite considerar que los núcleos son sistemas cuánticos constituidos por protones y neutrones.

A pesar de que los protones se repelen electrostáticamente, los núcleos estables no se rompen, lo cual indica que están sujetos unos a otros por algún tipo de fuerza que compensa con creces la repulsión entre protones. De todos modos, esta repulsión no es despreciable, como lo muestra el hecho de que así como para los núcleos ligeros ($Z < 20$) el número de protones y neutrones es muy parecido, la proporción de neutrones aumenta para los elementos más pesados para compensar el efecto de los cada vez más numerosos protones. Así, para $Z = 40$ los núcleos tienen alrededor de un 25% más de neutrones que de protones, y para $Z = 80$ el exceso de neutrones es del orden del 50%.

En el apartado 36.4 estudiaremos las fuerzas nucleares, pero, cualesquiera que sean sus propiedades, hay ciertas características de los núcleos inherentes al hecho de que son sistemas cuánticos y que procede mencionar como paso previo a cualquier consideración sobre la estructura de los núcleos.

En primer lugar, los núcleos pueden encontrarse en diversos estados cuánticos igual que los átomos. Llamamos fundamental al estado de energía más baja y excitados a los demás. Hay, sin embargo, una diferencia cuantitativa muy importante entre los átomos y los núcleos. Como éstos son mucho más pequeños (en un factor entre 10^4 y 10^5) y están constituidos por partículas más pesadas, basta tener en cuenta el principio de indeterminación para concluir que las energías cinéticas de los nucleones dentro del núcleo deben ser del orden de un millón de veces mayores que las de los electrones externos de los átomos. Las energías de enlace también guardarán la misma proporción. Nótese que las energías cinéticas de los nucleones son, sin embargo, pequeñas frente a su energía en reposo, por lo que podremos ignorar los efectos relativistas.

Los núcleos tienen un momento angular que en el estado fundamental se suele representar con la letra I y se designa con el nombre de espín nuclear. Más precisamente, I es el número cuántico del momento angular total del núcleo en su estado fundamental. Dicho espín nuclear proviene del acoplamiento de los momentos angulares orbitales y de los

espines de los nucleones que tiene el núcleo. Como los nucleones tienen espín $1/2$ (véase tabla 34.1), I será entero si A es par y semientero si A es impar. En general, I es un número pequeño, y si A es par, es siempre $I = 0$, excepto para los núcleos que contienen un número impar de protones y de neutrones. Los únicos núcleos estables de esta clase son ^2H , ^6Li , ^{10}B y ^{14}N ; los demás son radiactivos.

La paridad de la función de onda de un núcleo es un número cuántico importante porque no depende del momento angular al ser el núcleo un sistema cuántico de muchas partículas. En un sistema de una sola partícula, por el contrario, la paridad es $(-1)^l$, siendo l el número cuántico del momento angular.

El comportamiento estadístico de un conjunto de núcleos es también una característica nuclear importante. Los nucleones tienen espín $1/2$ y son, por tanto, fermiones. El intercambio de dos núcleos idénticos equivale a la permutación de A nucleones, con lo cual la función de onda del sistema de nucleones queda multiplicada por $(-1)^A$, de aquí que los núcleos en los cuales A es par sean bosones y aquellos con A impar sean fermiones. Por eso, en las moléculas diatómicas con dos átomos iguales la función de onda molecular debe ser simétrica o antisimétrica, respectivamente, cuando se permutan las coordenadas de los núcleos. Esto se manifiesta en los espectros moleculares y en el efecto Raman.

36.2. MASA, TAMAÑO Y FORMA DE LOS NÚCLEOS

La masa de un núcleo en su estado fundamental viene dada por la expresión [34.1.1]:

$$M = ZM_p + (A - Z)M_n - B/c^2 \quad [36.2.1]$$

siendo M_p la masa del protón (que vale 1.0072765 u, o bien 1.67265×10^{-24} g), M_n la masa del neutrón (que es igual a $M_p + m_e + 0.782 \text{ MeV}/c^2$, siendo m_e la masa del electrón, o bien a 1.0086649 u, o bien a 1.67496×10^{-24} g) y B la energía de enlace de todos los nucleones que contiene el núcleo. Sobre esta energía trataremos en el apartado 36.4.

Las masas de los núcleos pueden medirse con los espectrómetros de masas, que son instrumentos en los que se determina la relación carga/masa de átomos o moléculas ionizadas observando sus trayectorias desviadas por campos eléctricos y magnéticos. Por eso, las masas que aparecen en las tablas son masas atómicas, es decir, que incluyen las masas de los electrones.

También pueden medirse con mucha precisión diferencias de masas determinando las energías de los procesos radioactivos que se estudian en el capítulo 37. Así, se determina la masa del neutrón mediante su desintegración beta, y éste es el motivo de que su valor más preciso se haya expresado de una forma tan rara unas líneas más arriba.

Los núcleos son objetos cuánticos aproximadamente esféricos para los cuales es posible definir un radio porque la densidad de la materia nuclear en función de la distancia al centro del núcleo se comporta de la forma que muestra la figura 36.1. Esto contrasta con lo que sucede con los átomos, en los cuales la densidad electrónica no disminuye bruscamente, por lo que no puede hablarse de radios atómicos más que en el sentido de las distancias interatómicas que miden los cristalógrafos. Hay muchos fenómenos nucleares

que permiten determinar el radio de los núcleos, entre los cuales cabe mencionar la dispersión de partículas alfa y neutrones rápidos por núcleos, la teoría de la desintegración alfa y el estudio de los átomos méxicos, en los cuales un electrón ha sido sustituido por un muón que penetra dentro del núcleo porque su masa es 200 veces mayor que la del electrón. Todos los experimentos indican que el radio de los núcleos se ajusta bien a la fórmula empírica

$$R = r_0 A^{1/3} \quad [36.2.2]$$

siendo r_0 una constante del orden de 10^{-13} cm que varía ligeramente de un tipo de medidas a otros, lo cual es lógico porque en unos experimentos se mide hasta donde llegan las fuerzas nucleares y en otros hasta donde llega la carga eléctrica.

Antes de seguir adelante, una cuestión de nomenclatura. Vemos que la distancia 10^{-13} cm es una unidad conveniente en física nuclear. En unidades SI, esa distancia es un femtómetro ($1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$), pero los físicos nucleares y de partículas acostumbran a designarla con el nombre de fermi (símbolo F). Con esta nomenclatura, r_0 está comprendido entre 1.1 F y 1.4 F, según el fenómeno que se estudie.

La distribución de la carga eléctrica del núcleo puede estudiarse mediante la dispersión de electrones de alta energía que penetren en los núcleos. Con electrones ultrarrelativistas ($E \gg mc^2$) puede detectarse con mucho detalle dicha distribución. Se han ensayado diversas expresiones de la densidad $\rho(r)$ de carga eléctrica en el interior del núcleo y la que mejor se adapta a las dispersiones experimentales es

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + \exp \frac{r - R}{0.228a}} \quad [36.2.3]$$

con R dado por [36.2.2], $r_0 = 1.1 \text{ F}$ y $a = 2.2 \text{ F}$. El coeficiente 0.228 se ha introducido para que a signifique lo que se muestra en la figura 36.1 (distancia entre los radios, para los cuales la densidad es 90% y 10% del máximo). Aunque la fórmula [36.2.3] sólo es una

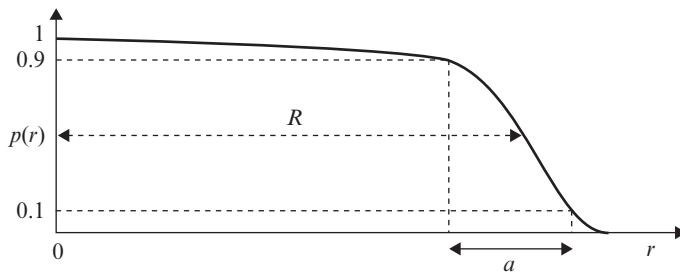


Figura 36.1. Distribución de la densidad nuclear $p(r)$ en función de la distancia r al centro del núcleo; R es el «radio» del núcleo y a el «espesor» de su corteza.

buena aproximación para la densidad de carga eléctrica, la distribución de la densidad neutrónica no debe ser muy diferente.

La aproximación de considerar el núcleo como esférico es buena como base para definir un radio, pero de hecho la mayoría de los núcleos no son esféricos. Sólo lo son aquellos cuyo número de protones o de neutrones sea uno de los números llamados mágicos: 2, 8, 20, 28, 50, 82 y 126. La razón se verá en la sección 36.6. Los demás núcleos no son esféricos, aunque sí simétricos respecto de su centro, por lo cual el momento eléctrico dipolar de los núcleos es cero. El momento cuadrupolar, en cambio, no es nulo cuando el núcleo es elipsoidal y no esférico. En estos casos, que son la mayoría, el campo eléctrico que produce el núcleo no es coulombiano y se manifiesta en la estructura hiperfina de los espectros atómicos. El momento cuadrupolar es un tensor, pero para caracterizar a los núcleos se toma como índice (la raya significa valor medio)

$$Q = \overline{3z^2 - r^2} \quad [36.2.4]$$

que es proporcional a la componente más significativa del tensor puesto en forma esférica. Para los núcleos Q es del orden de 10^{-24} cm², y si $Q > 0$, el núcleo es un elipsoide alargado, mientras que si $Q < 0$, el elipsoide es achatado como la Tierra.

36.3. MAGNETISMO NUCLEAR

Los núcleos atómicos también tienen un momento dipolar magnético asociado a su espín que proviene del movimiento orbital de los protones y del propio momento magnético del protón y del neutrón. En física nuclear se usa como unidad de momento magnético el magnetón nuclear

$$\mu_n = \frac{e\hbar}{2M_p c} \quad [36.3.1]$$

que es una transcripción del magnetón de Bohr en el que se ha sustituido la masa del electrón por la del protón, con lo cual resulta una unidad 1836 veces más pequeña. En contraste con el electrón, cuyo momento magnético es casi igual a un magnetón de Bohr, el momento magnético del protón difiere bastante de un magnetón nuclear, como muestra la tabla 34.1. Además, y para mayor sorpresa, el neutrón que no tiene carga eléctrica posee un momento magnético (el signo negativo que aparece en la tabla 34.1 indica que el sentido del momento magnético es opuesto al del espín). La razón de esta aparente anomalía es que los nucleones no son partículas elementales, sino objetos compuestos, como se verá en el capítulo 42.

El momento magnético de un núcleo está en la dirección del espín y puede orientarse de diversas maneras respecto del momento magnético total de los electrones del átomo, lo

cual da lugar a una estructura hiperfina de los espectros atómicos. En el caso del átomo de hidrógeno, la transición entre los estados paralelo y antiparalelo del espín del protón respecto del electrón produce la radiación de 21 cm de longitud de onda, que tiene mucho interés en Astrofísica.

El momento magnético de los núcleos es una propiedad de sumo interés porque da lugar al fenómeno de la resonancia magnética nuclear (RMN), que tiene importantísimas aplicaciones. Veamos en qué consiste.

Un núcleo con momento magnético μ y espín I se puede orientar de $2I + 1$ maneras respecto de un campo magnético \mathbf{B} ; cada manera corresponde a cada uno de los posibles valores del número cuántico magnético m_I del espín nuclear. A cada orientación le corresponde una energía distinta dada por

$$E = -\mu \cdot \mathbf{B} = -\frac{\mu}{I} \mathbf{I} \cdot \mathbf{B}$$

puesto que el momento magnético está orientado en la dirección del espín. Si elegimos como eje oz la dirección de \mathbf{B} , la fórmula anterior se escribe

$$E(m_I) = -\frac{\mu B}{I} m_I$$

En estas condiciones, pueden producirse transiciones dipolares magnéticas (M1) con la regla de selección $\Delta m_I = \pm 1$, como se verá en el capítulo siguiente. La frecuencia circular de la radiación electromagnética emitida o absorbida será

$$\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} = \frac{\mu B}{I \hbar} \quad [36.3.2]$$

Para μ igual a un magnetón nuclear [36.3.1], $I = 1$ y $B = 1$ T (10^4 gauss) resulta la frecuencia

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = 7.62 \text{ MHz} \quad [36.3.3]$$

que corresponde a la zona de las ondas de radio. Las transiciones mencionadas pueden provocarse, por tanto, mediante campos oscilantes de alta frecuencia, y pueden detectarse de diversas maneras. El fenómeno se llama resonancia (magnética nuclear) porque ésa es la palabra que usaríamos en el fenómeno clásico correspondiente.

En efecto, un imán de momento magnético μ que gira alrededor de su eje en un campo magnético \mathbf{B} formando un ángulo β con él (véase figura 36.2) está sometido a un par de fuerzas que le obligan a un movimiento de precesión lo mismo que una peonza. La

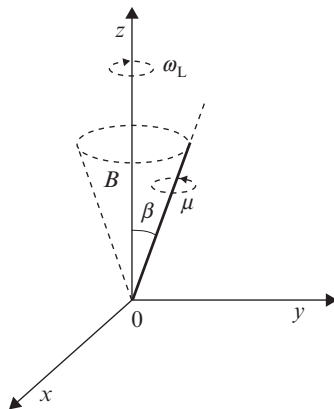


Figura 36.2. Precesión de un imán en rotación sometido a un campo magnético.

frecuencia ω_L de esta precesión (llamada de Larmor) no depende del ángulo β , que puede cambiarse si se aplica un campo magnético débil que gire en el plano xoy con una frecuencia igual a ω_L . Es decir, el ángulo β cambiará cuando el campo giratorio entre en resonancia con el movimiento de precesión.

La resonancia magnética nuclear (RMN) fue detectada por primera vez por Rabi usando haces moleculares. El cambio de orientación de los núcleos se distingue porque es diferente la fuerza neta que ejerce sobre ellos un campo magnético no homogéneo, lo cual altera su trayectoria.

Pero la RMN es también detectable en sólidos y líquidos, como probaron Bloch y Purcell mediante técnicas de radiofrecuencia. El método de Bloch se basa en provocar transiciones en una muestra mediante una bobina por la que circula corriente de alta frecuencia; los cambios de orientación de los núcleos producen a su vez una señal débil, pero detectable en otra bobina colocada perpendicularmente a la anterior. En el método de Purcell se utiliza una sola bobina y se detecta la absorción de energía por la muestra debido a las transiciones de núcleos con menor energía (más abundantes según la mecánica estadística) a estados de energía superior. En ambos casos la detección se efectúa mediante técnicas electrónicas bien conocidas en el ámbito de las telecomunicaciones.

Una primera aplicación de la RMN es la construcción de magnetómetros compactos y robustos. Se varía la frecuencia de una bobina que rodea una muestra conocida hasta encontrar la resonancia; la relación [36.3.2] permite determinar B . No hay que decir que el aparato viene ya calibrado en tesla o gauss.

Más importante es la aplicación de la RMN al estudio de la estructura de moléculas orgánicas. Una misma especie de núcleos está sometida a campos magnéticos distintos según su posición en una molécula complicada. Por eso, si se varía la frecuencia (en la práctica se deja fija y se varía el campo magnético), se obtiene un espectro de RMN cuyos picos interpretan los químicos por comparación con espectros de moléculas conocidas. También son útiles los espectros de RMN en la investigación de sólidos.

Otra aplicación de la RMN, y la más vistosa, es la reconstrucción de imágenes del interior de los seres vivos. Las señales de las transiciones de RMN de un cierto tipo de núcleos son procesadas por un computador y aparecen en una pantalla de televisión. Es una forma diferente y, además, menos agresiva de obtener radiografías útiles en el diagnóstico clínico.

36.4. FUERZAS NUCLEARES

Las fuerzas que mantienen juntos los nucleones de un núcleo son distintas de las que conocíamos fuera del dominio de la física nuclear. Desde luego, la gravitación no tiene ningún papel porque la energía gravitatoria de dos nucleones a un fermi (10^{-13} cm) de distancia es 1.16×10^{-32} eV, es decir, absolutamente despreciable. Por otra parte, la fuerza electrostática es repulsiva y muy importante. Puede estimarse (véase ejercicio 36.5) que la energía electrostática de repulsión entre cada par de protones será del orden de 0.4 MeV. La fuerza nuclear debe compensar con creces esta repulsión, puesto que la energía de enlace por nucleón es del orden de 8 MeV en la mayoría de los núcleos. Por eso la interacción responsable de las fuerzas nucleares se llama interacción fuerte.

Algunas características de la fuerza nuclear son consecuencia de hechos ya descritos en las páginas anteriores. Por de pronto, las fuerzas nucleares deben ser de corto alcance (del orden de un par de Fermi), puesto que la dispersión de neutrones por núcleos conduce a la definición de un radio bastante neto y de acuerdo con [36.2.2]. Por otra parte, el hecho de que la energía total de enlace de los núcleos sea proporcional a A y no a A^2 indica que la fuerza nuclear presenta una propiedad de saturación que nos recuerda las fuerzas interatómicas en las moléculas; deben ser fuerzas de canje o repulsivas a distancias cortas, o ambas cosas a la vez.

Para progresar en el estudio de la fuerza nuclear es preciso recurrir a la experiencia tomando como punto de partida los sistemas más sencillos posibles, que son aquellos en los que intervienen sólo dos nucleones. Los experimentos de dispersión neutrón-protón, protón-protón y neutrón-neutrón (en la realidad dispersión neutrón-deuterón en los que se resta el efecto del protón) son de esta clase y muestran desde energías muy bajas hasta los 300 MeV que la fuerza nuclear (lo que queda quitada la repulsión electrostática entre los protones) es independiente de la carga eléctrica, y sí depende de que los espines de las partículas colisionantes sean paralelos o antiparalelos. Este resultado fundamental de la independencia de carga de la fuerza nuclear es una confirmación de que estamos ante una fuerza nueva y justifica el uso de la palabra nucleón para designar tanto al protón como al neutrón; desde el punto de vista de la interacción fuerte, ambas partículas son idénticas, aunque en la realidad sean diferentes porque una está eléctricamente cargada y la otra no; además, la masa y el momento magnético también son distintos.

El estudio del deuterón (formado por un protón y un neutrón) confirma y amplía los resultados anteriores. No es necesario desarrollar una teoría del deuterón (que puede verse en los libros de física nuclear) para llegar a interesantes conclusiones. Conviene observar en primer lugar que no existe ningún otro núcleo con dos nucleones: ni el ${}^2\text{He}$ (que tendría dos protones) ni el hipotético dineutrón se encuentran en la naturaleza. Luego veremos por qué.

El deuterón es un núcleo cuya energía de enlace es de sólo 2.23 MeV y carece de estados excitados. Tiene espín unidad, momento magnético $\mu = 0.86\mu_n$ y momento eléctrico cuadrupolar $Q = 2.8 \times 10^{-27} \text{ cm}^2$.

Como Q es tan pequeño (frente a 10^{-24} cm^2 de otros núcleos) puede considerarse que, en primera aproximación, el deuterón es esférico. Puede pensarse, por tanto, que el deuterón es un sistema protón-neutrón en estado ^3S , es decir, en estado de momento angular orbital nulo y con los dos espines paralelos; esto está de acuerdo con que el espín nuclear sea 1. En esta primera aproximación el momento magnético debería ser $\mu = (2.793 - 1.913)\mu_n = 0.88\mu_n$, que es muy próximo al valor real. Esta aproximación muestra ya que la fuerza nuclear depende del espín porque el estado ^1S no es ligado y explica por qué no existen ni el ^2He ni el dineutrón cuyos componentes idénticos sólo podrían enlazarse en el estado ^3S , que está para ellos prohibido por el principio de Pauli.

Aunque el momento cuadrupolar del deuterón es muy pequeño y podemos despreciarlo en primera aproximación, en realidad no es nulo. Es pequeño y positivo, lo cual indica que el deuterón tiene forma de elipsoide ligeramente alargado. Para que esto ocurra tiene que haber una fuerza tensorial que dependa del ángulo que forma la recta que une los dos nucleones con la dirección de los espines. Esta fuerza explicaría que el estado fundamental del deuterón no es un ^3S puro, sino mezcla de éste con una pequeña contribución de otro que, para que no altere ni el espín nuclear ni la paridad, debe ser un $^3\text{D}^1$.

Si el deuterón tuviera muchos estados excitados, podría pensarse en encontrar un potencial nuclear que diera cuenta de todos ellos, pero como sólo existe el estado fundamental, hay infinidad de potenciales más o menos parecidos a un pozo (para que sean de corto alcance) que pueden ajustarse para que la energía de enlace sea 2.23 MeV. La dispersión neutrón-protón a energías bajas (hasta 10 MeV) tampoco nos saca de apuros, porque los resultados experimentales también se explican con muchísimos potenciales.

Los experimentos de dispersión nucleón-nucleón a energías más altas (hasta 300 MeV), sin embargo, arrojan cierta luz sobre la interacción fuerte. Se confirma que la fuerza nuclear no depende de la carga eléctrica pero sí del espín, que depende además de la velocidad y es no central. También muestran los experimentos que a muy cortas distancias la fuerza es repulsiva, de modo que la dependencia radial del potencial es aproximadamente la que muestra la figura 36.3. Por debajo de 0.3 F la fuerza es muy repulsiva, y por encima de 1 F el potencial se ajusta a la expresión

$$V(r) \propto \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad \text{con} \quad \frac{1}{\mu} = 1.4 \text{ F} \quad [36.4.1]$$

Para interpretar estos resultados hay que recurrir a las partículas subnucleares. Las colisiones entre dos nucleones con energías (en el laboratorio) superiores a 290 MeV dan lugar a la producción de mesones π (piones) según las reacciones

¹ Un estado P sería de distinta paridad y uno ^1D tendría momento angular 2.

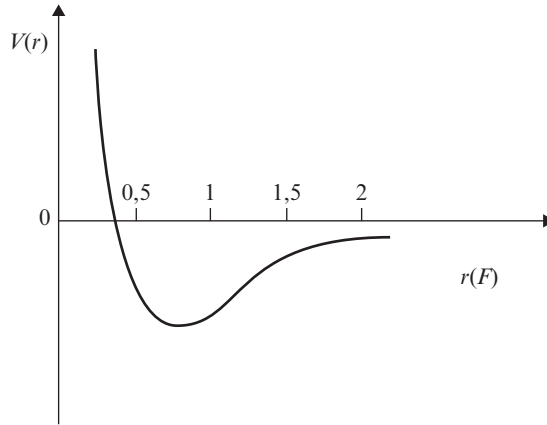
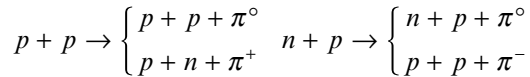


Figura 36.3. Dependencia radial del potencial nuclear de interacción entre dos nucleones.



Los piones cargados π^\pm tienen una masa de $140 \text{ MeV}/c^2$, y los neutros π^0 de $135 \text{ MeV}/c^2$. Antes de descubrirse estos mesones Yukawa había postulado su existencia como bosones responsables de la interacción fuerte de modo análogo a la interpretación que se pueden dar a los fotones en relación con la interacción electromagnética. Un argumento intuitivo es el siguiente.

Consideremos la carga eléctrica como propiedad que se caracteriza por la capacidad para crear fotones: de hecho, los fotones que observamos se producen cuando se aceleran partículas cargadas. Admitamos que dicha capacidad es intrínseca y que una carga quieta también emite fotones, pero los reabsorbe casi inmediatamente. Estos fotones no se ven, por eso se llaman virtuales, y para que no se viole el principio de conservación de la energía sólo pueden estar fuera de la partícula durante el tiempo Δt que permite el principio de indeterminación $\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar$. Para fotones virtuales de energía $\hbar\omega$ ese tiempo viene dado por $\hbar\omega \cdot \Delta t \approx \hbar$, y los fotones pueden alejarse hasta una distancia $r = c\Delta t = c/\omega$. Supongamos ahora que tenemos dos partículas cargadas a distancia r . Los fotones virtuales de frecuencia ω emitidos por una de las partículas podrán ser absorbidos por la otra; en esto consiste la energía potencial de interacción, que escribiremos en la forma

$$V = \alpha \hbar \omega = \alpha \frac{\hbar c}{r}$$

siendo α una constante que representa la intensidad de la interacción electromagnética. Obsérvese que si hacemos $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$ (constante de estructura fina), resulta la energía potencial de Coulomb $V = e^2/r$. Este resultado es casual porque todo el argumento es

puramente cualitativo, pero indica que un buen número adimensional para caracterizar la intensidad de la interacción electromagnética es la constante de estructura fina.

Si las partículas virtuales responsables de la interacción fuerte son mesones de masa m , el principio de indeterminación impone ahora que $mc^2 \cdot \Delta t \approx \hbar$, y aunque los mesones virtuales llevasen la velocidad de la luz, no podrían ir más lejos que

$$r = c \cdot \Delta t \approx \frac{\hbar}{mc} \quad [36.4.2]$$

lo que explica el corto alcance de las fuerzas nucleares, porque si $m = 140 \text{ MeV}/c^2$ (masa de los piones), resulta $r \approx 1,4 \text{ F}$, que es del orden de magnitud de dicho alcance.

El comportamiento asintótico [36.4.1] también se explica en la teoría de Yukawa por analogía con la interacción electromagnética. Tomemos la relación de energía E y momento p relativista

$$E^2 - c^2 p^2 - m^2 c^4 = 0$$

y sustituyamos E y p por operadores ($E \rightarrow i\hbar \partial/\partial t$, $p \rightarrow -i\hbar \nabla$) que actúan sobre la función φ para obtener la ecuación

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \mu^2 \right) \varphi = 0 \quad , \quad \mu = \frac{mc}{\hbar} \quad [36.4.3]$$

que recibe el nombre de ecuación de Klein-Gordon². Si hacemos en ella $\mu = 0$, queda en la ecuación diferencial de una onda que se propaga con la velocidad de la luz en el vacío. Si buscamos una solución estática (φ independiente del tiempo) y con simetría esférica, es decir, que φ sólo dependa de la distancia r al origen [36.4.3], se convierte en

$$\nabla^2 \varphi = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\varphi) = 0$$

que no es otra cosa que la ecuación de Laplace en un caso particular, y que tiene como soluciones $\varphi = \text{constante}$ y φ proporcional a $1/r$, que es el potencial de Coulomb.

Si dejamos μ y buscamos una solución de [36.4.3], independiente del tiempo y con simetría esférica, la ecuación diferencial que queda es

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\varphi) = \mu^2 \varphi$$

² La función φ es una especie de función de onda del pión.

que admite la solución (compruébese por sustitución)

$$\varphi = g \frac{e^{-\mu r}}{r}, \quad \frac{1}{\mu} = \frac{\hbar}{mc} \quad [36.4.4]$$

siendo g una constante. Éste es el potencial de Yukawa que coincide con el comportamiento asintótico [36.4.1] que se deduce de los experimentos. El valor de μ (índice del alcance) también es correcto si ponemos en [36.4.4] la masa de los piones.

La constante g en el potencial de Yukawa es la medida de la intensidad en interacción fuerte, y es equivalente a la carga elemental e en la interacción electromagnética. La energía de interacción entre dos nucleones será proporcional a g^2 , y a efectos comparativos conviene construir un número adimensional análogo a $e^2/\hbar c$, cuyo valor se estima en

$$\frac{g^2}{\hbar c} \approx 14.5$$

Este número es 2000 veces mayor que la constante de estructura fina. Por algo se llama fuerte a esta interacción.

Vemos que el intercambio de piones (cuyo espín es cero) explica la atracción entre los nucleones a distancias relativamente grandes. Existen mesones más pesados (η, ϵ) y también de espín cero que contribuyen al potencial a distancias menores y explican los efectos del espín en la interacción fuerte. Hay también mesones de espín uno que son los responsables de la repulsión a distancias cortas, del mismo modo que el fotón, también de espín unidad, produce repulsión entre dos partículas de la misma carga. Uno de estos mesones pesados de espín uno es el ω , cuya masa es $748 \text{ MeV}/c^2$. Con esta masa en [36.4.2] se obtiene $r \approx 0.25 \text{ F}$, que se corresponde con la zona repulsiva de la figura 36.3.

A la vista de lo expuesto tan someramente, es claro que las fuerzas nucleares son de extraordinaria complejidad. Incluso tal vez sea imposible escribir en forma analítica un potencial de la interacción fuerte. Ante esta situación, ¿qué se puede decir de la estructura de un núcleo con un centenar de nucleones? Pretender resolver la ecuación de Schrödinger es un sueño irrealizable. Ya en el caso de los átomos es imposible, a pesar de que la interacción dominante es la electrostática, bien conocida y sencilla. Por eso se empieza el estudio de los átomos con el modelo del campo central. Lo mismo, pero más crudamente, se hace con los núcleos. Se construyen modelos que permiten entender su estructura aunque sea parcialmente. Dedicaremos el resto de este capítulo a esbozar algunos modelos nucleares.

36.5. MODELO NUCLEAR DE LA GOTA LÍQUIDA

El hecho de que los radios de los núcleos sean proporcionales a la raíz cúbica del número de nucleones A indica que los volúmenes son proporcionales a A y que la densidad de la materia nuclear es aproximadamente la misma para todos los núcleos. Parece

como si los nucleones estuvieran tocándose unos a otros del mismo modo que las moléculas de un líquido, que puede cambiar de forma pero no de densidad. A partir de esta consideración concibió Bohr el modelo de la gota líquida. En este modelo se estudian los efectos de la materia nuclear imaginada como un líquido continuo.

Por lo que se refiere al estado fundamental de los núcleos, el modelo justifica una fórmula semiempírica, debida a von Weizsäcker, que permite calcular la energía de enlace B de los nucleones y, por tanto, las masas de los núcleos, utilizando [36.2.1].

La energía de enlace total es, en primera aproximación, proporcional al número de nucleones porque cada nucleón sólo está ligado a los que le rodean. Este efecto de volumen es la primera contribución a B , que escribimos

$$B_v = a_v A \quad [36.5.1]$$

Los nucleones superficiales, sin embargo, tienen menos nucleones alrededor, por lo que es preciso introducir un término de signo contrario proporcional a la superficie (tensión superficial) que, teniendo en cuenta [36.2.2], se escribirá

$$B_s = -a_s A^{2/3} \quad [36.5.2]$$

La repulsión electrostática entre los Z protones también contribuye a disminuir la energía de enlace, y como es proporcional a Z^2/R , tendremos

$$B_c = -a_c Z^2 A^{-1/3} \quad [36.5.3]$$

Todavía hay que considerar que los núcleos más estables son aquellos para los cuales es menor la diferencia entre protones y neutrones, aunque esta tendencia es menos acusada para núcleos pesados. En el fondo, esto es una consecuencia del principio de Pauli, que tendremos en cuenta con el término

$$B_a = \frac{-a_a (A - 2Z)^2}{A} \quad [36.5.4]$$

Finalmente, queda otra corrección, llamada de apareamiento, para tener en cuenta que los núcleos con número par de neutrones y protones son los más estables, y los que tienen un número impar de neutrones y protones son los menos estables, siendo los demás núcleos (par-impar o impar-par) intermedios a este respecto. Este efecto se incluye mediante el término

$$B_p = \begin{cases} + a_p A^{-1/2} & (\text{par-par}) \\ 0 & (\text{par-impar}) \\ - a_p A^{-1/2} & (\text{impar-impar}) \end{cases} \quad [36.5.5]$$

Recapitulando, la energía de enlace total de un núcleo es (en valor absoluto)

$$B = B_v + B_s + B_c + B_a + B_p \quad [36.5.6]$$

con los sumandos dados por las fórmulas [36.5.1] a [36.5.5]. Las cinco constantes se determinan empíricamente. Valores aceptables en MeV son

$$a_v = 15.56 \quad ; \quad a_s = 17.23 \quad ; \quad a_c = 0.7 \quad ; \quad a_a = 23.6 \quad ; \quad a_p = 12 \quad [36.5.7]$$

Esta fórmula semiempírica permite cálculos razonables de B , excepto si se trata de núcleos muy ligeros ($A < 20$), cuya estructura no se adapta a este modelo.

En cuanto a los niveles excitados, cabe considerar en este modelo niveles colectivos de rotación y niveles de vibración. He aquí algunas predicciones a este respecto.

La energía de rotación de un núcleo vendrá dada por la fórmula clásica

$$E_R = \frac{1}{2} K \omega^2$$

siendo ω la velocidad angular y K el momento de inercia, que podemos aproximar por $MR^2/2$ (M masa y R radio del núcleo). Puesto que el momento angular $K\omega$ debe valer $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ según la mecánica cuántica, la fórmula anterior se convierte en

$$E_R \approx \frac{\hbar^2}{MR^2} \ell(\ell+1) \quad [36.5.8]$$

Como M es proporcional a A y R a $A^{1/3}$, el espaciado de los niveles rotacionales disminuye fuertemente para los núcleos pesados.

Para el cálculo de los niveles de vibración recuérdese que la fuerza restauradora en la vibración clásica de una gota líquida es la tensión superficial cuyo coeficiente α se define por la relación $E_s = \alpha S$, siendo E_s el aumento de energía correspondiente a un aumento de superficie S . En nuestro caso, E_s es $a_s A^{2/3}$, según [36.5.2], y $S = 4\pi R^2 = 4\pi r_0^2 A^{2/3}$ (véase [36.2.2]), con lo cual

$$\alpha = \frac{a_s}{4\pi r_0^2} \quad [36.5.9]$$

Tomando por a_s el valor 17.23 MeV dado por [36.5.7], α vale entre 1.13 y 0.70 MeV · F⁻², según aceptemos para r_0 los valores 1.1 o 1.4 F.

La frecuencia de vibración de una gota debe ser del orden de $\sqrt{\alpha/M}$ si M es la masa, como sucede en todos los sistemas vibratorios. Más precisamente, la frecuencia circular ω

está relacionada con α , con la densidad ρ y con el radio R de la gota mediante la relación de Rayleigh³

$$\omega^2 = n(n-1)(n+2) = \frac{\alpha}{\rho R^3}$$

siendo n un número entero cuyo menor valor es, evidentemente, 2. La energía de vibración será $\hbar\omega$, por lo que podemos escribir

$$E_v = \hbar \left[n(n-1)(n+2) \frac{4\pi\alpha}{3M} \right]^{1/2} \quad [36.5.10]$$

siendo M la masa del núcleo (volumen por densidad). Como M es proporcional a A , la energía de los niveles de vibración disminuye como $A^{-1/2}$ al aumentar la masa nuclear.

Obsérvese que tanto los niveles rotacionales como los vibracionales dependen notablemente del valor r_0 , que adoptemos para calcular el radio nuclear, por lo cual lo procedente es considerar r_0 como un parámetro que se determina de modo que [36.5.8] y [36.5.10] se ajusten lo mejor posible a los resultados experimentales.

36.6. MODELO NUCLEAR DE CAPAS

Existen muchos hechos experimentales (abundancia particular de algunos isótopos, gran energía de enlace de los mismos, pequeña sección eficaz de captura de los neutrones por ellos, etc.) que permiten singularizar los núcleos que poseen un «número mágico» de protones y neutrones. Estos números mágicos son

$$2, 8, 20, 28, 50, 82 \text{ y } 126$$

y constituyen el paralelismo nuclear de los números de electrones de los gases nobles (2, 10, 18, 36, 54 y 86), que por cerrar cada capa electrónica conducen a elementos particularmente inertes.

Para explicar la existencia de este sistema periódico nuclear se recurre a un modelo análogo al que se ha aplicado con éxito en el tratamiento de los átomos de muchos electrones. Se admite que, en una primera aproximación, cada nucleón se mueve independientemente de los otros en un potencial central que representa el efecto de los demás nucleones. Cómo puede suceder esto; no está claro, aunque al final de esta sección volveremos sobre este asunto. Como las fuerzas nucleares son de corto alcance, el potencial central de este modelo debe ser del tipo de pozo más o menos redondeado. Es fácil calcular los niveles de energía de un potencial de pozo esférico finito o de un potencial de oscilador armónico esférico porque en ambos casos puede resolverse la ecuación de Schrödinger analíticamente. Aplicando después el principio de Pauli se puede determinar cuántos nu-

³ Lord Rayleigh, *The Theory of Sound*, Dover, Nueva York, 1945, vol. 11, p. 371.

cleones «cabén» en cada capa y averiguar los números de nucleones que cerrarían las capas. Lo malo es que ni con los dos potenciales mencionados ni con ningún otro parecido se consigue explicar los números mágicos a excepción de los tres primeros.

La solución del enigma fue dada por Mayer, Haxel, Jensen y Suess, y consiste en admitir también un término de interacción espín-órbita en el hamiltoniano. La existencia de este término es esencial, al contrario de lo que sucede en los átomos. En éstos basta el potencial central para explicar el sistema periódico, y la interacción espín-órbita (de claro origen magnético) sólo supone una pequeña corrección que se manifiesta en la estructura fina de los niveles atómicos. Para explicar los números mágicos nucleares con un modelo de capas como el atómico hace falta que la interacción espín-órbita sea intensa para que separe fuertemente los dobletes, disminuyendo la energía del término, cuyo momento angular total es mayor. De este modo los niveles energéticos aparecen en el siguiente orden de energías crecientes:

$$\begin{array}{l}
 [1s_{1/2}]_2 \\
 [1p_{3/2} \ , \ 1p_{1/2}]_6 \\
 [1d_{5/2} \ , \ 2s_{1/2} \ , \ 1d_{3/2}]_{12} \\
 [1f_{7/2}]_8 \\
 [2p_{3/2} \ , \ 1f_{5/2} \ , \ 2p_{1/2} \ , \ 1g_{9/2}]_{22} \\
 [1g_{7/2} \ , \ 2d_{5/2} \ , \ 2d_{3/2} \ , \ 3s_{1/2} \ , \ 1h_{11/2}]_{32} \\
 [1h_{9/2} \ , \ 2f_{7/2} \ , \ 2f_{5/2} \ , \ 3p_{3/2} \ , \ 3p_{1/2} \ , \ 1i_{13/2}]_{44}
 \end{array} \quad [36.6.1]$$

La nomenclatura es la que se usa en los átomos (nl_j) y los términos entre paréntesis corresponden a una capa, entendiendo por capa un grupo de niveles separados de los demás por un intervalo de energía razonable. En cada nivel puede haber $2j + 1$ nucleones de cada clase y el número que corresponde a cada capa (2, 6, 12, 8, 22, 32, 44) está indicado con un subíndice al final del paréntesis. Por adición de estos números hasta una cierta capa se obtienen los números mágicos, que son los números de protones o de neutrones que cierran capa.

Los núcleos con capas cerradas son esféricamente simétricos y tienen momento angular nulo.

En núcleos con capa cerrada más (o menos) un nucleón, el momento angular y la paridad quedan determinados por ese nucleón. Así, el último nucleón del $^{11}_5\text{B}$ debe estar en un estado $p_{3/2}$, por lo que el momento angular total del estado fundamental debe ser $3/2$ y su paridad $(-1)^1 = -1$. Éste es sólo un ejemplo entre los muchos que muestran las predicciones que pueden hacerse con el modelo de capas.

Pero todo lo expuesto hasta aquí es cualitativo. Para realizar cálculos cuantitativos se necesita resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger con un potencial esférico central realista. La distribución de carga eléctrica experimental que muestra la ecuación [36.2.3] sugiere el siguiente potencial, que recibe el nombre de Woods-Saxon:

$$V(r) = \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R}{a}\right)} \quad [36.6.2]$$

En esta expresión R es el radio del núcleo dado por [36.2.2] con $r_0 \approx 1.3$ F. Los otros valores que se suelen usar en este potencial son $a \approx 0.7$ F y $V_0 = -50$ MeV.

En cuanto a la interacción espín-órbita $-f(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, da buenos resultados la aproximación $f(r) = 24A^{-2/3}$ MeV.

El modelo nuclear de capas, del cual aquí sólo hemos dado una sucinta idea, permite estudiar muchas propiedades nucleares, lo que prueba su validez indubitable. Pero tal éxito no debe hacernos olvidar sus débiles fundamentos. ¿Cómo encaja este modelo de partículas independientes en un sistema de nucleones en interacción fuerte de corto alcance? La única forma de explicar este comportamiento paradójico es considerar que la interacción de dos nucleones dentro del núcleo no es la misma que la que existe entre dos nucleones libres. Y no es la misma porque el principio de Pauli limita considerablemente las posibilidades de interacción de dos nucleones en el seno del potencial común. Dentro de la lógica del modelo todos los estados disponibles están ocupados hasta el nivel de Fermi; por eso un nucleón no puede comunicar a otro energía para saltar a un nivel superior porque él mismo debería pasar a un nivel inferior que ya está ocupado en el sentido del principio de Pauli. Por eso el camino libre medio de un nucleón dentro del núcleo es enorme, contra lo que nos inspira la intuición, y esto explica la validez de este modelo de partículas independientes.

36.7. MODELO NUCLEAR COLECTIVO

Los dos modelos presentados en los apartados 36.5 y 36.6 son aparentemente contradictorios, pero pueden unificarse en el modelo colectivo de A. Bohr y Mottelson. Aquí únicamente daremos noticia de este modelo. Cuando algunas capas del modelo del mismo nombre están semillenas, los núcleos se deforman y se producen movimientos colectivos que pueden resolverse en rotaciones, vibraciones y estados nucleónicos en un potencial no esférico. Es algo que recuerda a la teoría de las moléculas, aunque los tres tipos de excitación están tan acoplados que no siempre son tan separables como en las moléculas.

La falta de esfericidad conduce a un desdoblamiento de los niveles del modelo de capas, que puede calcularse en función de un índice de la deformación. Ocurren rotaciones de conjunto como en el modelo de la gota líquida, pero con una materia nuclear que no puede identificarse con un líquido. También hay vibraciones que se describen como excitación de fonones en dicha materia.

Este modelo colectivo permite estudiar satisfactoriamente las propiedades de los núcleos aunque la teoría nuclear no es tan precisa como la teoría de los átomos, ni puede serlo, dada la complejidad de las fuerzas nucleares.

EJERCICIOS

36.1. Estimar la energía cinética de un nucleón dentro de un núcleo cuyo tamaño es 10^5 veces menor que la región ocupada por un electrón cortical del átomo que tiene una energía cinética de 1 eV. Úsese el principio de indeterminación.

- 36.2.** Estimar la energía que debe llevar un electrón para que su trayectoria dentro de un núcleo de plomo ($A = 207$) pueda calcularse en la aproximación de la óptica geométrica. Para ello, el efecto de difracción debe ser despreciable.
- 36.3.** Comparar los radios nucleares y los radios de Bohr de muones que giran alrededor del núcleo. La masa del muón es $106 \text{ MeV}/c^2$. Calcular para $Z = 20, 40$ y 80 usando los datos que se indican en el segundo párrafo del apartado 36.1.
- 36.4.** Obtener el resultado [36.3.3].
- 36.5.** Estimar la energía de repulsión electrostática media entre dos protones de un núcleo.
- 36.6.** Calcular la energía de fisión del ${}^{238}_{92}\text{U}$. Supóngase que el uranio se divide en dos núcleos iguales de $A = 119, Z = 46$.
- 36.7.** ¿Por qué se puede fisurar el nucleido ${}^{235}\text{U}$ con neutrones muy lentos y el ${}^{238}\text{U}$ no?
- 36.8.** Calcular la energía del primer nivel de rotación de los núcleos ${}^{20}\text{Ne}$, ${}^{100}\text{Mo}$ y ${}^{200}\text{Hg}$.
- 36.9.** Calcular la energía del primer nivel de vibración de los núcleos ${}^{20}\text{Ne}$, ${}^{100}\text{Mo}$ y ${}^{200}\text{Hg}$.
- 36.10.** ¿Cuáles son el espín y la paridad del estado fundamental de los núcleos ${}^{13}_6\text{C}$ y ${}^{27}_{13}\text{Al}$ según el modelo de capas?

37

Radioactividad

Carlos Sánchez del Río

37.1. RADIOACTIVIDAD NATURAL Y ARTIFICIAL

Con el nombre de radioactividad designamos al conjunto de procesos en virtud de los cuales los núcleos no estables emiten espontáneamente radiaciones ionizantes. Tales procesos han sido ya descritos de forma muy somera en la sección 34.1 y su estudio más detenido constituye el objeto de este capítulo.

Muchos núcleos radioactivos se encuentran en la naturaleza. Fueron descubiertos por Becquerel y estudiados sistemáticamente por Marie Curie, Rutherford, Soddy y otros. La mayoría de estos nucleidos se desintegran unos en otros formando tres cadenas radioactivas que proceden de tres elementos de período de desintegración larguísimo que se formaron en alguna estrella de cuya explosión procede el sistema solar. En la tabla 37.1 se muestran los nucleidos iniciales y finales de las tres cadenas junto con una cuarta (la del neptunio), ya desaparecida, pero que puede producirse artificialmente.

Existen también en la naturaleza otros nucleidos radioactivos de vida larga que no forman parte de las cadenas mencionadas. Entre ellos, conviene destacar el potasio-40 (^{40}K), que es un emisor beta con un período de 1.3×10^9 años. Son, asimismo, naturales algunos núcleos radioactivos, como el carbono-14 (^{14}C), cuyo período es de sólo 5730 años, y se está formando continuamente mediante reacciones nucleares que producen los rayos cósmicos al atravesar la atmósfera terrestre.

La mayoría de los nucleidos radioactivos que conocemos tienen períodos más cortos y se producen artificialmente como resultado de reacciones nucleares. Tales son, por ejem-

TABLA 37.1

Nucleidos iniciales y finales de las series radioactivas. Los nucleidos iniciales son emisores alfa y los finales son estables

Nombre de la serie	Nucleido inicial	Período (en años)	Nucleido final
Torio	^{232}Th	$1.4 \times 10^{10}\text{a}$	^{208}Pb
Neptunio	^{237}Np	$2.2 \times 10^6\text{a}$	^{209}Bi
Uranio-radio	^{238}U	$4.5 \times 10^9\text{a}$	^{206}Pb
Uranio-actinio	^{235}U	$7.2 \times 10^8\text{a}$	^{207}Pb

plo, el ^{24}Na (con período de 14.9 horas), el ^{32}P (14.3 días), el ^{90}Sr (24.9 años) y el ^{131}I (8 días). Estos nucleidos radioactivos, concretamente, pueden encontrarse accidentalmente en la naturaleza como subproductos de la industria nuclear.

Los tres tipos de desintegración radioactiva son muy distintos. La desintegración alfa no tiene analogía con ningún proceso atómico o molecular porque consiste en la emisión espontánea de un núcleo de ^4He . La desintegración beta es todavía más rara, ya que los núcleos emiten electrones que no contienen. La emisión gamma, en cambio, no es una novedad, porque es, en principio, análoga a la emisión de la luz por los átomos. En este capítulo estudiaremos las tres clases de desintegración radioactiva empezando por lo más parecido a lo que ya conocemos y terminando por lo más extraño. Por eso, el orden será: emisión gamma y procesos análogos, desintegración alfa y desintegración beta.

37.2. FENOMENOLOGÍA DE LA EMISIÓN GAMMA

Se reserva el nombre de rayos gamma a los fotones que se emiten en las transiciones entre los niveles cuánticos de un núcleo. Suelen tener energías del orden de 1 MeV, pero no siempre sucede así; hay rayos gamma con energías del orden de las de los rayos X blandos.

La excitación de los núcleos que luego dan lugar a rayos γ se produce como resultado de una desintegración α o β previa o de una reacción nuclear. Por eso raramente se tienen muestras radioactivas que sean emisoras γ puras. Esto sólo sucede cuando los núcleos quedan en un estado excitado de vida anormalmente larga; estos estados se llaman isoméricos, y el fenómeno recibe el nombre de isomería nuclear.

La desexcitación de un núcleo que se encuentre en un nivel energético superior al fundamental puede ocurrir de tres maneras:

- i) El núcleo puede pasar del estado inicial E_i a uno final E_f de energía más baja con emisión de un fotón de energía $\hbar\omega = E_i - E_f$. En este caso tiene lugar una emisión γ propiamente dicha.
- ii) La energía $E_i - E_f$ disponible puede comunicarse a un electrón del átomo que es expulsado con una energía $E_i - E_f - E_B$, siendo E_B la energía de enlace de dicho electrón. Este fenómeno se llama conversión interna. Cuando la excitación del núcleo ha resultado de una desintegración beta, la conversión interna se manifiesta en forma de picos de electrones monoenergéticos superpuestos al espectro continuo de los electrones beta. Este proceso se caracteriza por un coeficiente de conversión interna definido de la siguiente forma

$$\alpha = \frac{\text{Probabilidad de conversión interna}}{\text{Probabilidad de emisión de un fotón}}$$

Este coeficiente aumenta con el número atómico Z y con el inverso de la energía de la transición. Puede llegar a ser $\alpha > 1$, lo cual muestra que este proceso es muy importante.

- iii) Si la energía disponible es mayor que el doble de la energía en reposo del electrón ($E_i - E_f > 2mc^2$), puede ocurrir que dicha energía se invierta en la producción de un par de electrones (uno positivo y otro negativo). Este proceso se llama producción interna de pares, y es raro.

El proceso i) se representa gráficamente indicando con líneas onduladas las transiciones entre los niveles energéticos, tal como muestra el esquema de la figura 37.1.

Las vidas medias de los niveles que dan lugar a emisión de rayos γ son típicamente del orden de 10^{-14} segundos, aunque pueden llegar a ser tan breves como 10^{-17} s o tan largas como meses o años en los estados isoméricos. A causa de estas vidas medias finitas las energías de los niveles excitados no tienen valores perfectamente definidos. Según el principio de indeterminación, la vida media τ de un nivel (véase la sección 34.3) y la imprecisión ΔE en su energía están relacionados por (véase la sección 7.9)

$$\Delta E \cdot \tau \approx \hbar \quad [37.2.1]$$

De hecho, la distribución energética de los fotones emitidos tiene el carácter de una curva de resonancia cuya anchura (a mitad de la amplitud) es

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau} = \frac{65.7 \cdot 10^{-16}}{\tau(s)} \text{ eV} \quad [37.2.2]$$

de acuerdo con [37.2.1]. Para $\tau = 10^{-14}$ s la anchura es, por tanto, $\Gamma = 0.657$ eV. Obsérvese que el estado fundamental tiene una τ infinita y, en consecuencia, $\Gamma = 0$.

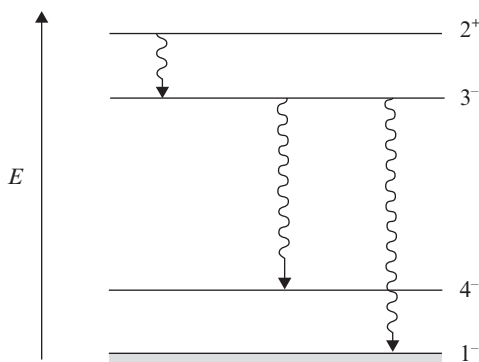


Figura 37.1. Transiciones entre los niveles energéticos de un núcleo con emisión de fotones. Los números junto a los niveles indican el momento angular, y los exponentes (+ o -) la paridad de los mismos.

37.3. ABSORCIÓN RESONANTE

Si un átomo pasa de un cierto estado excitado al fundamental, emite un fotón que puede ser absorbido por otro átomo idéntico que pasará del estado fundamental al citado estado excitado. Este fenómeno se llama absorción resonante y se observa fácilmente con luz visible. Basta lanzar un haz de luz amarilla de sodio hacia una ampolla que contenga vapor del mismo metal para observar la luz amarilla que reemiten en todas las direcciones los átomos excitados por absorción resonante.

La absorción resonante es muy difícil de observar con rayos gamma porque en este caso el retroceso del núcleo es muy importante y no coinciden las frecuencias de emisión y de absorción. En efecto, consideremos que la diferencia de energía entre el estado fundamental y el excitado sea exactamente E . El fotón emitido tendrá un momento $\hbar\omega/c$ que es aproximadamente E/c . Éste es también el momento de retroceso que adquiere el núcleo de masa M , que por eso se llevará la energía cinética $E^2/2Mc^2$. Por eso la energía del fotón $\hbar\omega_e$ será un poco menor que E y vendrá dada muy aproximadamente por

$$\hbar\omega_e = E - \frac{E^2}{2Mc^2}$$

Para que se produzca la absorción, por el contrario, el fotón incidente habrá de tener una energía $\hbar\omega_a$ algo superior a E , y más concretamente la dada por una fórmula como la anterior, cambiado el signo menos por más. La diferencia entre ambas energías es

$$\hbar\omega_a - \hbar\omega_e = \frac{E^2}{Mc^2} \quad [37.3.1]$$

En el caso de la luz visible emitida por los átomos, esta diferencia es muy pequeña y mucho menor que la anchura natural de la línea espectral dada por [37.2.2]. Por eso el efecto de retroceso es despreciable y la absorción resonante se produce fácilmente.

En los núcleos, las cosas son distintas, como podemos ver con un ejemplo. El ^{198}Au es un emisor beta que deja un núcleo de ^{198}Hg en un nivel a 0,41 MeV por encima del estado fundamental. La vida media del nivel excitado es de unos 10^{-11} s y, según [37.2.2]: $\Gamma = 6.57 \times 10^{-4}$ eV. La diferencia de energías de emisión y absorción dada por [37.3.1] es 0.9 eV; por tanto, no habrá el solapamiento que permita la absorción resonante. La absorción podrá observarse, sin embargo, si se compensa [37.3.1] por efecto Doppler. Si la fuente se acerca al absorbente con velocidad v la frecuencia de los rayos γ aumenta en $\Delta\omega$ dado por

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{v}{c} \quad [37.3.2]$$

y para que este aumento sea igual al dado por [37.3.1], la velocidad debe ser

$$v = \frac{E}{Mc}$$

que en nuestro ejemplo vale $v = 6.6 \times 10^4$ cm/s. Esta velocidad puede conseguirse con medios mecánicos, y entonces se observa la absorción resonante.

Hay otro modo de obtener la absorción resonante por medio del llamado efecto Mössbauer, que consiste en la emisión y absorción de los fotones sin retroceso. Ello puede ocurrir si los núcleos emisor y absorbente se encuentran formando parte de una red cristalina que recibe el momento $\hbar\omega/c$ como un todo de masa prácticamente infinita, con lo cual, según [37.3.1], las energías de emisión y de absorción coinciden.

Para entender lo que sucede basta imaginar que el movimiento de un núcleo que forma parte de una red cristalina es parecido al de un oscilador cuyas energías posibles están cuantificadas. Si la energía del fotón emitido o absorbido es pequeña, la probabilidad de que el oscilador no sea excitado es apreciable y, por tanto, en muchos casos, el núcleo quedará como estaba, sin que se produzca retroceso. Esta imagen es, por supuesto, muy tosca y es mejor pensar en el cristal como un sistema cuántico para comprender que hay una probabilidad finita (que puede ser grande) de que en un cristal a baja temperatura no se excite ningún fonón si la energía de retroceso es mucho menor que $k_B\theta$, siendo k_B la constante de Boltzmann y θ la temperatura de Debye del cristal.

El efecto Mössbauer se pone de manifiesto de un modo muy sencillo moviendo el emisor respecto del absorbente y un detector que registra los fotones no absorbidos (véase figura 37.2). Cuando el emisor está quieto, la absorción es máxima y el detector cuenta menos fotones. Si el emisor se aleja (o se acerca), la energía del fotón emitido disminuye (o aumenta) por efecto Doppler, de acuerdo con la expresión [37.3.2], disminuye la absorción resonante y el detector cuenta más fotones; de este modo se mide directamen-

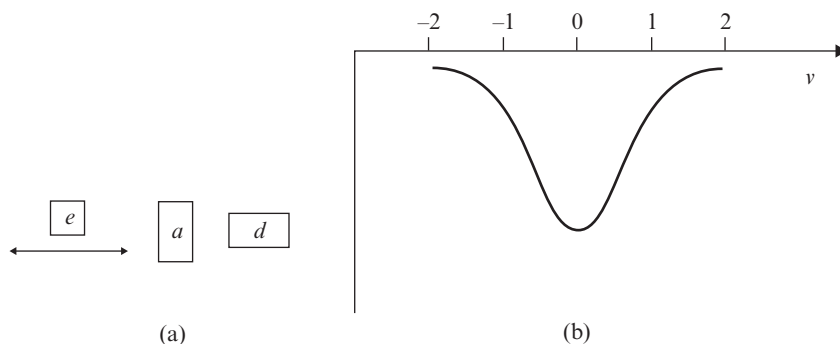


Figura 37.2. Efecto Mössbauer. En (a) se muestra esquemáticamente el dispositivo experimental con el emisor (*e*) móvil, el absorbente (*a*) y el detector (*d*). En (b) aparecen las cuentas del detector en función de la velocidad (positiva o negativa) del emisor.

te la anchura Γ del estado excitado responsable de la emisión y la absorción de los rayos gamma.

Por desgracia, son pocos los nucleidos que pueden utilizarse para observar el efecto Mössbauer; por ésta y otras razones este fenómeno tiene poco interés en el estudio de la anchura de niveles nucleares. Tiene mucha importancia, en cambio, en la investigación sobre materia condensada, porque permite detectar los subniveles en que se desdobra un nivel nuclear por efecto de los campos eléctricos y magnéticos locales.

Con este objeto es muy utilizado el ^{57}Fe . El nucleido radioactivo ^{57}Co (de 270 días de período) emite rayos beta y se convierte en ^{57}Fe frecuentemente excitado en un nivel con una energía de 14.4 keV por encima del fundamental. Este nivel tiene una vida de 10^{-7} s y, por tanto, una anchura $\Gamma = 6.57 \times 10^{-8}$ eV. La relación $\Gamma/\hbar\omega$ es pequeñísima y el efecto Doppler correspondiente se consigue con una velocidad de 0.1 cm/s. Por eso se pueden obtener espectros Mössbauer de alta precisión.

37.4. REGLAS DE SELECCIÓN EN LA EMISIÓN GAMMA

La teoría de la emisión de fotones por los núcleos es análoga a la teoría de la emisión de la luz por los átomos, aunque un poco más complicada porque en el caso de los átomos basta considerar la aproximación dipolar y en el caso de los núcleos no. La razón es que en los átomos sólo se pueden observar radiaciones multipolares en el espacio interestelar, mientras que en el laboratorio, si la emisión dipolar está prohibida, los átomos se desexcitan por colisión con los vecinos. Los núcleos, en cambio, no chocan unos con otros porque lo impiden los electrones que los rodean, y si la emisión dipolar es imposible ocurre la transición con otra multipolaridad, aunque sea menos probable.

La exposición de la teoría cuántica completa de la emisión de fotones por los núcleos ocuparía un espacio prohibitivo. Por eso nos limitaremos aquí a resumir los resultados que nos interesan para establecer las reglas de selección.

Clásicamente, un sistema de partículas cargadas que se mueven en un espacio reducido (digamos cerca del origen de coordenadas) puede emitir ondas electromagnéticas que se describen por un potencial vector \mathbf{A} a partir del cual pueden calcularse el vector eléctrico ($\mathbf{E} = -(1/c)\partial\mathbf{A}/\partial t$) y el vector magnético ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$). El potencial vector satisface a una ecuación de ondas que admite muchas soluciones proporcionales a los armónicos esféricos $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ con $\ell \neq 0$. Las soluciones correspondientes a $\ell = 1$ se llaman dipolares, las que tienen $\ell = 2$ son cuadrupolares, si $\ell = 3$, son octupolares; ℓ es, por tanto, el índice de multipolaridad.

Para cada multipolaridad, la ecuación de ondas tiene dos soluciones. Una se llama eléctrica porque está cerca del origen $E \gg B$ y se designa con la letra E . La otra se denomina magnética porque sucede lo contrario y se designa con M . Detrás de estas letras se añade el índice ℓ de multipolaridad. Así, $E1$ quiere decir emisión dipolar eléctrica, $M2$ emisión cuadrupolar magnética, etc.

La energía de interacción entre el sistema de partículas cargadas y el campo electromagnético es proporcional a $\mathbf{j} \cdot \mathbf{A}$, siendo \mathbf{j} la densidad de corriente. En el caso de un

núcleo de radio R , sólo intervienen los valores de A a distancias del centro $r < R$ porque fuera del núcleo no hay cargas. Para valores tan pequeños de r , el potencial vector A es proporcional a $(kr)^\ell$ para los multipolos magnéticos, y a $(kr)^\ell/r$ para los eléctricos (k es el número de ondas de la radiación igual a $2\pi/\lambda$ si λ es la longitud de onda). Ahora bien, λ es siempre mayor que R y a veces mucho mayor, por lo que $kr < kR$, que varía entre 0.01 y 0.2, de aquí resultan dos hechos importantes:

- i) La interacción disminuye fuertemente al pasar de un multipolo ℓ a uno $\ell + 1$.
- ii) La interacción de un multipolo magnético ℓ es del mismo orden que la de uno eléctrico $\ell - 1$. Esto es válido también si actúan los momentos magnéticos intrínsecos del protón o del neutrón porque son del mismo orden que los momentos magnéticos orbitales del núcleo.

Como consecuencia, la energía de interacción de los multipolos disminuye de izquierda a derecha según

$$\begin{array}{ccccccc} E1 & E2 & E3 & E4 & \dots & & \\ & M1 & M2 & M3 & \dots & & \end{array} \quad [37.4.1]$$

y en cada columna la interacción es kR veces menor que la anterior, aproximadamente. La energía emitida o absorbida va con el cuadrado de esta interacción, por eso la importancia de los diversos multipolos disminuye drásticamente al pasar de una columna a la siguiente.

Antes de terminar este recordatorio del electromagnetismo clásico conviene señalar que a grandes distancias del sistema emisor (zona de ondas) las ondas de cualquier multipolaridad son localmente planas y los dos vectores E y B son perpendiculares entre sí y a la dirección de propagación, como nos enseña la teoría electromagnética de la luz.

Consideremos ahora a la onda electromagnética clásica como la función de onda del fotón. La presencia de $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ en A nos indica que el índice de multipolaridad ℓ es el número cuántico del momento angular del fotón emitido, y esto tanto si el multipolo es eléctrico como magnético.

Para fijar la paridad hace falta un convenio, porque E y B tienen distinta paridad puesto que el vector de Poynting $S \propto E \times B$ es un vector polar y tiene, por tanto, paridad $\pi = -1$. Se asigna al fotón por convenio la paridad de B , que es la contraria de A (igual a la de E) y la misma que $j \times A$, ya que j es un vector polar. Este criterio es lógico si se piensa que cuánticamente la probabilidad de emisión es proporcional al cuadrado del valor absoluto del elemento de matriz

$$\int \varphi_f^* j \cdot A \varphi_i \quad [37.4.2]$$

donde φ_i y φ_f son las funciones de onda de los estados inicial y final de la transición.

En consecuencia, la paridad de un multipolo $E\ell$ es $\pi = (-1)^\ell$, y la de un multipolo $M\ell$ es $\pi = -(-1)^\ell$.

En el proceso de emisión de un fotón en una transición desde un estado inicial (subíndice i) a uno final (subíndice f) se han de conservar la energía, el momento angular y la paridad.

La conservación de la energía (E) implica un resultado de sobra conocido: $\hbar\omega = E_i - E_f$.

La conservación del momento angular (J) implica la condición $J_i + J_f \geq \ell \geq |J_i - J_f|$, pero como la transición con menor multipolaridad es dominante, debe cumplirse $\ell = |J_i - J_f|$.

La conservación de la paridad (π) implica que las funciones de onda de los estados inicial y final deben tener igual o distinta paridad según que la paridad del fotón (la de $\mathbf{j} \times \mathbf{A}$) sea par o impar. De otro modo, sería nula la integral [37.4.2], al ser impar la función que se integra.

Estas reglas de selección están sintetizadas en la tabla 37.2. Como aplicación de las mismas, podemos deducir el carácter de las transiciones que se muestran en la figura 37.1. La transición $2^+ \rightarrow 3^-$ será $E1$, la $3^- \rightarrow 4^-$ será $M1$ y la $3^- \rightarrow 1^-$ será $E2$. La transición $4^- \rightarrow 1^-$, que no se indica en la figura, sería $M3$ y, según [37.4.1], la probabilidad de la transición sería muy pequeña. El estado 4^- es un estado isomérico de vida muy larga.

TABLA 37.2
Reglas de selección para emisión de rayos gamma según la multipolaridad

	ℓ impar	ℓ par
Cambian	$E\ell$	$M\ell$
No cambian	$M\ell$	$E\ell$

37.5. FENOMENOLOGÍA DE LA DESINTEGRACIÓN ALFA

La emisión de una partícula alfa (que es un núcleo de ${}^4\text{He}$) por un núcleo es energéticamente posible cuando la masa del núcleo emisor es superior a la suma de las masas del núcleo residual y de la partícula alfa, es decir, si

$$\Delta M = M(A, Z) - M(A - 4, Z - 2) - M({}^4\text{He}) > 0 \quad [37.5.1]$$

Esto sucede frecuentemente en nucleidos pesados ($A > 200$) porque el núcleo de ${}^4\text{He}$ tiene una energía de enlace de unos 7 MeV por nucleón, que es grande para los núcleos ligeros, por eso su masa es pequeña en relación a la de sus vecinos. La explicación de la

gran energía de enlace del ${}^4\text{He}$ reside en que es un núcleo con un número mágico de protones y de neutrones.

La energía disponible $Q = c^2\Delta M$ se reparte entre la partícula alfa y el núcleo residual de acuerdo con [34.5.1], por ello la energía de la partícula alfa es $Q(A-4)/A$. Más precisamente, ésta es la energía máxima de la partícula alfa porque es muy frecuente que el núcleo residual quede en un estado excitado y la citada energía sea menor. En estos casos el núcleo final se desexcita inmediatamente emitiendo rayos gamma (véase figura 37.3).

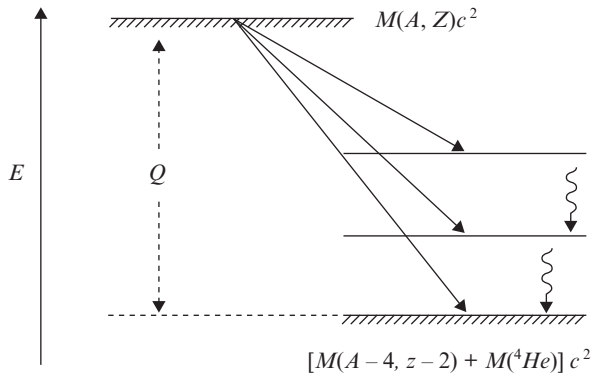


Figura 37.3. Esquema energético de la desintegración alfa de un núcleo (A, Z) en otro $(A-4, Z-2)$ que puede quedar en un estado excitado.

La tabla 37.3 muestra los valores de Q , los períodos de desintegración T y las constantes radioactivas o probabilidades de desintegración λ de algunos nucleidos que se desintegran por emisión de partículas alfa. Se ve que las probabilidades de desintegración aumentan con la energía de las partículas emitidas, lo cual es lógico. Pero lo sorprendente es que para un cambio de energías de 4 MeV a 9 MeV (un factor 2) la probabilidad de desintegración varíe en 24 órdenes de magnitud (!). Esto fue un misterio hasta que se encontró la explicación cuántica que se expone a continuación.

TABLA 37.3

Energías y períodos de desintegración de algunos emisores alfa

Núcleo	Q	T	$\lambda(\text{s}^{-1})$
${}^{232}\text{Th}$	4.05	$1.39 \times 10^{10}\text{a}$	1.50×10^{-18}
${}^{228}\text{Th}$	5.52	1.9a	1.16×10^{-8}
${}^{218}\text{Po}$	6.12	3.05 min	3.78×10^{-3}
${}^{212}\text{Po}$	8.75	$3 \times 10^{-7}\text{ s}$	2.31×10^6

37.6. EMISIÓN ALFA Y EFECTO TÚNEL

Supongamos que, de algún modo, dos protones y dos neutrones de un núcleo pesado se unen permanentemente o periódicamente para formar un núcleo de helio-4. Tal núcleo puede tener una energía positiva si se cumple la condición [37.5.1], pero clásicamente no podrá separarse del núcleo residual porque se lo impide la barrera de Coulomb que se muestra en la figura 37.4. La partícula alfa está sometida a las fuerzas nucleares descritas por un potencial de forma de pozo profundo hasta la distancia R (radio del núcleo radioactivo), y a partir de ahí sufriría una repulsión electrostática si lograra superar el trecho RR' inaccesible clásicamente (R' es la distancia de mínima aproximación al centro del núcleo que alcanzaría una partícula alfa de la misma energía intentando penetrar la barrera). Si es E la energía cinética de la partícula alfa, el valor de R' es

$$R' = \frac{2(Z - 2)e^2}{E} \tag{37.6.1}$$

puesto que la carga de la partícula es $2e$ y la del núcleo residual $(Z - 2)e$.

Lo que no es posible según la física clásica tiene una pequeña probabilidad según la mecánica cuántica debido al efecto túnel. Por eso podemos escribir

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Probabilidad} \\ \text{de la emisión } \alpha \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Frecuencia con que la} \\ \text{partícula } \alpha \text{ intenta salir} \end{array} \right\} \times \left\{ \begin{array}{l} \text{Transparencia} \\ \text{de la barrera} \end{array} \right\}$$

El primer factor es difícil de calcular, pero no debe variar mucho con la energía, ni de unos núcleos a otros. La transparencia (factor de Gamow) viene dada por (véase el capítulo 9)

$$T = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_R^{R'} [2m(V - E)]^{1/2} dr \right\}, \quad V = \frac{2(Z - 2)e^2}{r} \tag{37.6.2}$$

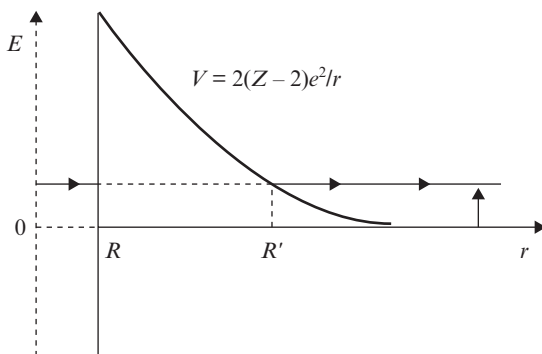


Figura 37.4. Barrera de potencial que tiene que vencer una partícula alfa para escapar del núcleo.

y es sumamente sensible a las variaciones de la energía E . Para verlo, basta un cálculo aproximado muy sencillo. Como E es pequeña frente al valor de V en la mayor parte de la región clásicamente inaccesible, podemos ignorarla en [37.6.2]. Además, $R' \gg R$, por lo que se puede realizar la integración entre 0 y R' e introducir después el valor de R' dado por [37.6.1]. Resulta

$$T \approx \exp \left[- \frac{8(Z-2)e^2}{\hbar} \left(\frac{2m}{E} \right)^{1/2} \right] \quad [37.6.3]$$

o bien la fórmula práctica

$$T \approx \exp \left(- 5 \frac{Z-2}{\sqrt{E}} \right) \quad [37.6.4]$$

en la cual debe ponerse E en MeV.

Si se calcula T para $E = 4$ MeV y $E = 9$ MeV con $Z = 90$, resulta $T \approx 3 \cdot 10^{-96}$ y $T \approx 2 \cdot 10^{-64}$, que difieren en 32 órdenes de magnitud. Es una diferencia todavía mayor que la que aparece en la tabla 37.3. Si se realiza un cálculo de la integral en [37.6.2], también aproximado pero menos chapucero que el que hemos hecho aquí, el resultado es que en [37.6.3] aparece un factor 2π : en lugar de 8. Con esta modificación las transparencias para las energías de 4 MeV y 9 MeV sólo difieren en 25 órdenes de magnitud.

En cualquier caso, es claro que la desintegración alfa es un ejemplo convincente del efecto túnel. Históricamente, es interesante el hecho de que las consideraciones aquí expuestas fueron la primera aplicación al núcleo de la mecánica cuántica que se había inventado para los átomos.

37.7. FENOMENOLOGÍA DE LA EMISIÓN BETA

Conceptualmente, la desintegración beta es el más sorprendente de los tres procesos radioactivos porque del núcleo salen electrones que no contienen. Podrá argumentarse que en la emisión de fotones por átomos o núcleos también se crea algo que no estaba, pero en este caso tenemos un precedente en la emisión clásica de la radiación electromagnética por corrientes eléctricas oscilantes. La creación de electrones por los núcleos es, en cambio, un fenómeno absolutamente novedoso, y bastante raro, como vamos a ver.

En primer lugar, es obvio recordar que para que la desintegración beta se produzca, es condición indispensable que sea energéticamente posible. Es decir, es preciso que la masa del núcleo inicial sea superior a la suma de las masas del núcleo final y del electrón saliente. Esta condición se cumple muy a menudo en los elementos de las cadenas radioactivas naturales, por eso es muy frecuente en ellos la radioactividad beta con emisión de electrones negativos ordinarios.

Entre los elementos radioactivos artificiales producidos en las reacciones nucleares también se emiten a veces positrones (electrones positivos). Es una segunda forma de emisión beta, menos frecuente porque los casos en que esto es energéticamente posible son más raros.

Todavía hay otro proceso que ocurre en competición con la emisión beta positiva porque es energéticamente más favorable. Se trata de la captura electrónica o captura K . Sucede a veces que un electrón del átomo (normalmente de la capa K) es absorbido por el núcleo. Esto se detecta por el fotón de rayos X que emite el átomo inmediatamente cuando un electrón L pasa a ocupar el hueco que ha quedado en la capa K . Teniendo en cuenta que la función de onda del estado atómico $1s$ (donde están los electrones K) no es nula dentro del núcleo, no es sorprendente que ocurra la captura K . Lo sorprendente es que no suceda en un tiempo brevísimo. ¿Cómo es posible que un electrón negativo dentro de un núcleo positivo tarde minutos u horas en ser absorbido? La respuesta es que las fuerzas responsables de estos procesos de emisión y captura de electrones por nucleones son pequeñísimas. Por eso se llama débil a este tipo de interacción.

A la misma consideración llegamos si observamos que un neutrón tiene una masa $1.293 \text{ MeV}/c^2$ mayor que la del protón. Como la masa del electrón es $0.511 \text{ MeV}/c^2$, el neutrón puede convertirse en un protón, quedando todavía 0.782 MeV disponibles para impartir energía cinética al electrón. Así ocurre, en efecto, y éste es el caso más sencillo de emisión beta. Pero el período de esta desintegración es de unos 12 minutos, tiempo enorme si se piensa que un fotón de parecida energía se emite con un período del orden de 10^{-12} segundos. Esto es otra prueba de que nos hallamos ante un nuevo tipo de interacción: la interacción débil.

Si un núcleo de masa M_i se desintegra emitiendo un electrón de masa m y dejando un núcleo residual de masa M_f , la energía disponible es $Q = (M_i - M_f - m)c^2$, y ésta es la energía cinética que debería tener el electrón emitido porque la energía de retroceso del núcleo residual es despreciable. Pues bien, esto no sucede. Los electrones salen con energía muy variable, unas veces con poca y otras con mucha y casi nunca con Q . De hecho, si se miden las energías de los electrones emitidos por una muestra radioactiva beta, se encuentra un espectro continuo, como el que muestra la figura 37.5. La energía máxima del espectro es Q , pero la energía de la mayoría de los electrones es muy inferior. ¿Tal vez no se conserva la energía en la emisión beta? Antes de contestar veamos más cosas raras.

El tritio (^3H) se desintegra en un núcleo de helio-3 (^3He) y un electrón. Las tres partículas tienen espín $1/2$ y el momento angular orbital de las dos partículas finales sólo puede tener un número cuántico entero; luego el número cuántico del momento angular total debe ser entero mientras que el del ^3H era $1/2$. ¿Acaso no se conserva el momento angular en este proceso?

Pero aún hay más. El tritio es un fermión (por tener espín $1/2$) y el conjunto ^3He -electrón es un bosón. ¿Tampoco se conserva el carácter estadístico cuántico?

Para resolver todas estas paradojas propuso Pauli la existencia de una nueva partícula, llamada antineutrino, que se produciría a la vez que el electrón en la emisión beta. De este modo se explicaría el espectro continuo, porque la desintegración conduce a tres cuerpos; la energía que le falta a un electrón se la habría llevado un antineutrino. El tal antineutrino debería tener masa nula o despreciable porque la energía máxima de los electrones es Q y no inferior. La carga eléctrica del antineutrino sería nula porque la carga eléctrica se conserva

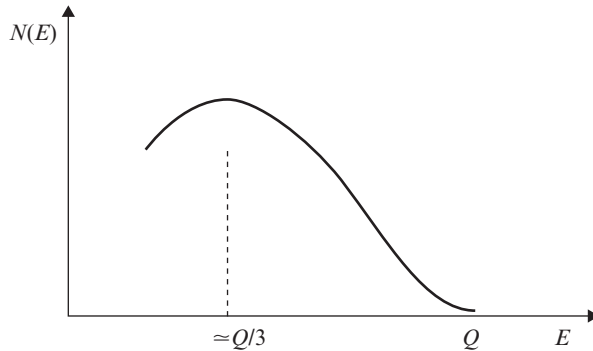


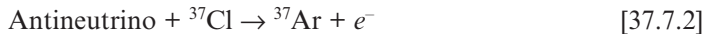
Figura 37.5. Espectro continuo de los electrones emitidos por una muestra radioactiva beta.

en la desintegración beta sin necesidad de antineutrino. Además, sería una partícula sólo susceptible de interacción débil, y por eso escapa, atravesando nuestros aparatos sin afectarlos. Por último, debe tener espín $1/2$ para que se conserve el momento angular y la estadística.

A pesar de la débil interacción de los antineutrinos con la materia, su detección fue posible cuando se construyeron reactores nucleares de gran potencia. Estos reactores son fuentes intensas de antineutrinos que se producen por la gran cantidad de núcleos emisores beta negativos que genera la fisión del uranio. Con un detector especial muy grande que contiene mucho hidrógeno se pudo comprobar la reacción



En cambio, no se pudo observar la reacción



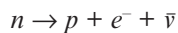
que debería ser fácil de detectar porque el argon-37 es radioactivo y tiene un período de 34 días.

Para explicar esta nueva anomalía (y otros muchos hechos) hay que admitir que así como el positrón es la antipartícula del electrón, deben existir dos neutrinos, uno antipartícula del otro¹. Los dos electrones y los dos neutrinos forman parte de la familia de los leptones y cada uno se caracteriza por un nuevo número cuántico, llamado número leptónico, de acuerdo con el siguiente esquema:

El electrón (e^-) y el neutrino (ν) tienen número leptónico $+1$

El positrón (e^+) y el antineutrino ($\bar{\nu}$) tienen número leptónico -1

Si se admite que el número leptónico se conserva en las interacciones débiles, todo queda claro. La desintegración beta del neutrón debe escribirse en la forma



¹ Véanse las subsecciones 39.4.a y 41.5.b.

que conserva el número leptónico (cero para n , cero para p , $+1$ para e^- y -1 para $\bar{\nu}$). En esta desintegración y en todas aquellas que producen electrones se emiten antineutrinos. Los reactores nucleares son fuentes de antineutrinos, por eso la reacción [37.7.1] ocurre (el número leptónico es -1 antes y después de la reacción) y la reacción [37.7.2] es imposible.

La emisión beta de los núcleos todavía ofrece una nueva sorpresa. Alineando los núcleos de ^{60}Co a una temperatura de 0.01 K por magnetización adiabática, observó Wu que los electrones (e^-) se emiten preferentemente en la dirección opuesta al espín de los núcleos de cobalto. Como el espín del núcleo es un momento angular y representa un sentido de giro, el experimento de Wu muestra que la emisión beta de un electrón negativo tiene un carácter de «tornillo a izquierda». Ello indica que no se conserva la paridad en los procesos debidos a la interacción débil.

La explicación de la no conservación de la paridad en la interacción débil consiste en que el neutrino tiene un carácter que recuerda un tornillo; su espín está siempre orientado en dirección contraria a la de su movimiento. Para el antineutrino ocurre lo contrario. Esto se expresa diciendo que la helicidad del neutrino es -1 , mientras que la helicidad del antineutrino es $+1$.

Como vemos, la desintegración beta es una fuente de novedades cuyo significado profundo está relacionado con la física de partículas, a la cual se dedican los últimos capítulos de este libro.

37.8. TEORÍA ELEMENTAL DE LA EMISIÓN BETA

Mucho antes de la detección del neutrino, desarrolló Fermi una teoría de la desintegración beta aceptando la existencia de dicha partícula. La teoría de Fermi es una transcripción del tratamiento teórico de la emisión de fotones por los átomos, y supone que la probabilidad de la emisión beta está dada por

$$\frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \rho(E) \quad [37.8.1]$$

siendo M el elemento de matriz de la transición y $\rho(E)$ la densidad de estados finales. En el elemento de matriz interviene el hamiltoniano de la interacción y las funciones de onda de los núcleos inicial y final, y es muy difícil de calcular. Pero puede suceder que, por lo menos en ciertos casos, M dependa poco de la energía del electrón emitido. Cuando esto ocurra, el espectro beta sólo dependerá de la densidad de estados finales $\rho(E)$ que se calcula fácilmente.

En efecto, $\rho(E)$ es proporcional al espacio de los momentos dividido entre dE , es decir,

$$d\rho(E) \propto p^2 dp p_v^2 \frac{dp_v}{dE} \quad [37.8.2]$$

donde las letras sin subíndice se refieren al electrón y las que van acompañadas de ν al antineutrino. La energía Q disponible en la desintegración se reparte de manera que

$$Q = E + E_\nu = E + cp_\nu$$

puesto que $E_\nu = cp_\nu$, si la masa del antineutrino es cero. De esta ecuación resulta

$$p_\nu = \frac{1}{c}(Q - E) \quad , \quad dp_\nu = -\frac{dE}{c}$$

que puesto en [37.8.2] dan como resultado la siguiente expresión para el espectro de los electrones

$$P(d) dp \propto p^2(Q - E)^2 dp \quad [37.8.3]$$

En este cálculo se ha ignorado el efecto de atracción o repulsión entre el núcleo residual y el electrón o positrón saliente, que afecta sobre todo a la región de baja energía del espectro. Se remedia este defecto multiplicando la fórmula anterior por una función adecuada $F(Z, E)$ que depende de la carga del núcleo y de la energía del electrón. Para los núcleos ligeros esta corrección es relativamente pequeña. Se tiene, en definitiva,

$$P(d) dp = F(Z, E)p^2(Q - E)^2 dp \quad [37.8.4]$$

A pesar de todas las simplificaciones hechas, la forma del espectro [37.8.4] se ajusta bien a los espectros experimentales de las transiciones beta permitidas. Se llaman así las desintegraciones en las cuales tanto el electrón como el antineutrino se emiten con momento angular orbital nulo, y deben ser las más probables, porque en este caso no hay barreras de potencial centrífugo.

Para estas transiciones permitidas es muy fácil establecer reglas de selección. Si los espines del electrón y el antineutrino son antiparalelos, debe ser igual el momento angular de los núcleos inicial y final (regla de selección de Fermi). Si, por el contrario, los espines de los dos leptones son paralelos, los momentos angulares de los núcleos deben diferir en una unidad (regla de selección de Gamow-Teller).

He aquí algunos ejemplos (entre paréntesis se indican el momento angular y la paridad del estado correspondiente). La desintegración $^{14}\text{O}(0^+) \rightarrow ^{14}\text{N}^*(0^+)$ es permitida según la regla de selección de Fermi. La desintegración $^{14}\text{C}(0^+) \rightarrow ^{14}\text{N}(1^+)$ es también permitida de acuerdo con la regla de selección de Gamow-Teller. En cambio, la desintegración $^{40}\text{K}(4^-) \rightarrow ^{40}\text{Ca}(0^+)$ está prohibida y, de hecho, tiene un período larguísimo (1.3×10^9 años).

EJERCICIOS

- 37.1.** Calcular el valor numérico de la fórmula [37.2.2].
- 37.2.** Comparar la anchura relativa del nivel del átomo de sodio que emite la luz amarilla de 589 nm de longitud de onda con la anchura relativa del primer estado excitado del ^{198}Hg . Suponer $\tau = 10^{-8}$ s para el átomo de sodio y los datos de la sección 37.3 para el mercurio.
- 37.3.** ¿Podrá observarse la absorción resonante en el ^{198}Hg —ejemplo usado en la sección 37.3— si se vaporiza el ^{118}Au y se calienta a 3500 °C? La constante de Boltzmann vale $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J} \times \text{K}^{-1}$.
- 37.4.** Un núcleo tiene un estado fundamental 1^+ y dos niveles excitados que en orden creciente de energías son 2^- y 3^+ . Si inicialmente el núcleo se encuentra en el estado 3^+ , ¿qué fotones emitirá?
- 37.5.** Un núcleo hipotético de número másico $A = 100$ está excitado a un nivel $5/2^+$ y puede emitir fotones por transiciones a dos niveles $3/2^-$ y $1/2^+$ muy próximos que están separados del primero por una energía de 2.5 MeV. Estimar las intensidades relativas de los rayos gamma correspondientes a las dos transiciones posibles.
- 37.6.** Deducir la fórmula práctica [37.6.4].
- 37.7.** Calcular la probabilidad de penetración de la barrera de Coulomb para un protón de 5 MeV lanzado contra un núcleo de uranio ($Z = 92$).
- 37.8.** En la desintegración $^{14}\text{O} \rightarrow ^{14}\text{N} + e^+ + \nu$ se producen positrones con una energía máxima de 1.81 MeV. Suponiendo que éstos penetren sin ser afectados por la barrera de Coulomb, estimar el efecto de dicha barrera sobre los electrones cuya energía sea de 0.18 MeV. Úsese la fórmula [37.6.3] dejando un parámetro ajustable.
- 37.9.** ¿Cuál es la probabilidad de que un neutrino atraviese la Tierra sin entrar en interacción a lo largo del camino? Supóngase que la densidad de la Tierra es $5 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ y que la sección eficaz de interacción del neutrino con un nucleón es $\sigma = 10^{-43} \text{ cm}^2$.
- 37.10.** Calcular la distribución de energía de los electrones de la desintegración beta suponiendo que el neutrino tiene una masa en reposo m_ν muy pequeña. Comentar lo que sucede para una energía del electrón próxima al máximo.

38

Reacciones nucleares

Carlos Sánchez del Río

38.1. REACCIONES NUCLEARES: GENERALIDADES

Lo que se entiende por reacción nuclear, la nomenclatura que se usa y la cinemática de tal proceso han sido ya expuestas en el capítulo 34. En el caso más frecuente, podemos simbolizar una reacción nuclear mediante el esquema



donde a representa una partícula (protón, neutrón, deuterón o partículas alfa) que incide sobre el núcleo A y da lugar a un núcleo B y una partícula b . La letra Q representa la energía que se desprende (si $Q > 0$) o se absorbe (si $Q < 0$) en forma de energía cinética en el sistema de referencia del centro de masas.

Muchas veces sucede que la reacción [38.1.1] no es la única posible cuando a incide sobre A . El resultado puede ser también $C + c + Q'$, que es una reacción distinta que compete con la citada en el primer lugar. No es raro que el núcleo producido en la reacción quede en un estado excitado que pasa muy rápidamente al estado fundamental emitiendo rayos gamma. También es frecuente que dicho núcleo final sea radioactivo (normalmente emisor beta) con un período de desintegración más o menos largo.

Hay varios casos particulares de [38.1.1] que conviene señalar. En primer lugar, la dispersión elástica; en este caso, b es idéntica a a , B es el mismo núcleo A y $Q = 0$. En la dispersión inelástica es también $b = a$, $B = A$, pero $Q < 0$; el núcleo B queda en un estado excitado. Estas dispersiones no son verdaderas reacciones nucleares, pero formalmente pueden tratarse como tales. Otro importante caso particular es que la partícula b no exista; lo que ocurre es la captura de a por A , que se convierte en otro núcleo B , generalmente en estado excitado, que pierde su energía en forma de rayos gamma.

Aunque las reacciones simbolizadas por [38.1.1] son las más frecuentes, no son las únicas. Hay veces en las que se produce una fragmentación con el resultado de varios núcleos y partículas finales; generalmente, esto sólo ocurre si la partícula incidente tiene una energía elevada.

Para terminar este apartado recordemos que la reacción [38.1.1] puede designarse más concisamente en la forma $A(a,b)B$, y que la probabilidad de las dispersiones y de las reacciones nucleares se mide por su sección eficaz σ . Como unidad de sección eficaz se utiliza el barn (símbolo b), que equivale a 10^{-24} cm².

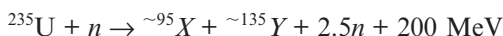
38.2. REACCIONES PRODUCIDAS POR NEUTRONES

Los neutrones son partículas muy adecuadas para producir reacciones nucleares porque carecen de carga eléctrica, por eso no han de vencer una barrera de Coulomb para penetrar en los núcleos contra los cuales chocan. Veamos cuáles son las reacciones más frecuentes según la energía de los neutrones:

- a) Neutrones de baja energía. Bajo esta denominación designamos a los neutrones con energía inferior a un keV más o menos. Es muy interesante, en particular, el rango de energías de los neutrones llamados térmicos, porque se encuentran en equilibrio térmico con un medio (agua, grafito, etc.) dentro del cual se difunden. Los neutrones térmicos tienen una energía media de unos 0.025 eV si el medio está a temperatura ambiente. Los neutrones de muy baja energía se llaman también lentos.

Pues bien, los neutrones de baja energía, que chocan con un núcleo, o bien sufren una colisión elástica o bien son absorbidos dando lugar a una reacción (n, γ) (absorción del neutrón con emisión de fotones). Esta regla tiene pocas pero importantes excepciones. Hay dos reacciones con neutrones lentos en las que se producen partículas alfa. Son $^{10}\text{B}(n, \alpha)^7\text{Li}$ y $^6\text{Li}(n, \alpha)^3\text{H}$. Ambas se utilizan para detectar los neutrones y la segunda se usa también para producir tritio (^3H), que se empleará en los futuros reactores de fusión y que de momento se utiliza en las bombas de hidrógeno.

La otra excepción es la fisión de núcleos pesados. La fisión de un núcleo es una reacción particular en la cual el núcleo bombardeado por una partícula se divide en dos de masa próxima con gran desprendimiento de energía y con emisión de varios neutrones. Todos los núcleos pesados a partir del bismuto pueden fisionarse si la energía de la partícula incidente es suficientemente alta, pero con neutrones lentos sólo ocurre este fenómeno con tres nucleidos ^{233}U , ^{235}U y ^{239}Pu . De los tres sólo el segundo (el ^{235}U) se encuentra en la naturaleza en la escasa proporción del 0.7% del uranio natural. Los otros dos se producen artificialmente a partir del ^{232}Th y del ^{238}U . La fisión del ^{235}U por neutrones lentos responde a la reacción



Los productos de fisión X e Y son variables. Los más frecuentes entre los representados por X son Kr, Rb e Y, y entre los representados por Y son Xe, Ba y La. El valor 2.5 para los neutrones desprendidos es promedio.

Curiosamente, los neutrones muy lentos son más efectivos que los rápidos en la producción de reacciones. Para neutrones térmicos, la sección eficaz de absorción es proporcional a la inversa de la velocidad de los neutrones y para energías algo superiores presentan picos que se denominan resonancias (véase figura 38.1).

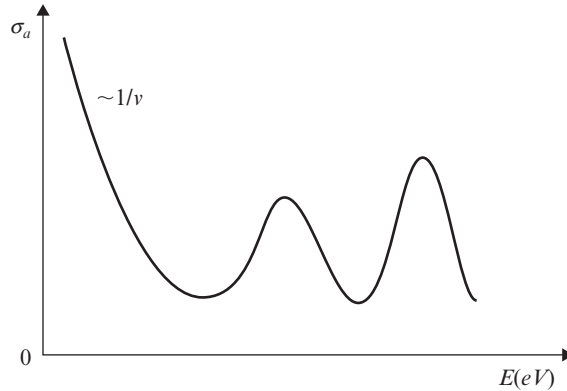


Figura 38.1. Representación esquemática de la sección eficaz de absorción σ_a de los núcleos por neutrones lentos.

- b) Neutrones de energía intermedia. Damos este nombre a los neutrones cuya energía está comprendida entre un keV y pocos MeV, aproximadamente. Estos neutrones pueden producir las reacciones ya citadas y además (n, n') (colisión inelástica), (n, p) , $(n, 2n)$ y fisión de núcleos distintos de los tres mencionados anteriormente. La sección eficaz de absorción presenta numerosos picos de resonancia en la región de los keV.
- c) Neutrones de energía alta y muy alta. Los neutrones de energías superiores a unos pocos MeV producen todas las reacciones mencionadas anteriormente y, además, fragmentación de los núcleos en varios. A partir de 290 MeV se producen también piones, y con energías superiores, otras partículas que se estudian en los últimos capítulos de este libro.

38.3. REACCIONES PRODUCIDAS POR PARTÍCULAS CARGADAS

Los protones y las partículas alfa pueden producir reacciones muy variadas. Los protones en particular dan lugar a reacciones (p, n) , (p, α) , $(p, 2n)$ y fisiones de núcleos pesados. Para que las reacciones se produzcan es preciso que las partículas incidentes penetren la barrera de Coulomb, por eso, aunque las reacciones sean exoenergéticas ($Q > 0$), la sección eficaz es pequeñísima si las partículas incidentes tienen poca energía. A medida que aumenta la energía de dichas partículas, la sección eficaz crece y luego se mantiene constante con abundantes picos de resonancia muy agudos.

Si las partículas incidentes son deuterones, son muy frecuentes las reacciones (d, p) por un mecanismo fácil de entender. La energía de enlace del deuterón es relativamente muy pequeña (2.23 MeV), por eso, al pasar junto a un núcleo, es muy probable que el neutrón

penetre en el núcleo y el protón se quede fuera y sea repelido electrostáticamente. El efecto neto es idéntico a la captura de un neutrón; el núcleo final queda excitado y se emiten rayos gamma.

Si las partículas cargadas incidentes son iones pesados de gran energía, puede suceder de todo. Lo más notable es que a veces se forman una especie de «moléculas nucleares» en el sentido de que los dos núcleos que chocan se unen durante un tiempo breve sin llegar a fundirse en un núcleo único.

38.4. REACCIONES PRODUCIDAS POR FOTONES

Si la energía del fotón incidente es superior a la energía de enlace de un nucleón, puede desaparecer el fotón y concentrarse su energía en un nucleón que sale del núcleo. Este proceso da lugar a reacciones (γ, n) o (γ, p) , y se llama efecto fotonuclear por su analogía con el efecto fotoeléctrico, que sucede con los electrones externos de los átomos.

Las reacciones fotonucleares sólo ocurren si la energía de los fotones incidentes es superior a 7 MeV u 8 MeV, puesto que ésta es la energía media de enlace por nucleón según hemos mencionado repetidas veces. Esta regla sólo tiene dos excepciones.

La primera excepción es el deuterón, cuya energía de enlace es de sólo 2.23 MeV.

Ésta es la energía umbral para que se produzca la fotodesintegración del deuterón, que se divide en un protón y un neutrón.

La segunda excepción es el ${}^9\text{Be}$, que es un núcleo muy curioso. El núcleo de ${}^8\text{Be}$ es inestable y se divide espontáneamente en dos partículas alfa al cabo de un tiempo brevísimo. El núcleo del ${}^9\text{Be}$ tiene un neutrón más que el ${}^8\text{Be}$ y este neutrón estabiliza el núcleo, pero tiene una energía de enlace de sólo 1.66 MeV. Por eso, con fotones de energía superior a esta cifra, se puede producir la reacción ${}^9\text{Be}(\gamma, n){}^2\text{He}$. Esta reacción se utiliza a veces para producir neutrones introduciendo en un bloque de berilio algún elemento radioactivo que emita rayos γ de energía superior a 1.66 MeV.

Los fotones de energía suficiente pueden producir también la fisión de núcleos pesados, pero el proceso tiene escaso interés práctico porque la sección eficaz es pequeña.

Muchas veces, los fotones cuya energía es de varias decenas de MeV dan lugar a reacciones muy curiosas porque la sección eficaz presenta resonancias gigantes con un máximo cercano a los 20 MeV.

38.5. PRINCIPIOS DE CONSERVACIÓN EN LAS REACCIONES NUCLEARES

Las reacciones nucleares están condicionadas por el hecho de que hay un conjunto de magnitudes que se conservan durante el proceso. Dicho de otro modo, tales magnitudes tienen el mismo valor para el sistema inicial (a la izquierda) y el final (a la derecha) de la reacción [38.1.1]. A continuación se exponen y comentan las magnitudes que se conservan:

- a) Número de nucleones. Una reacción nuclear consiste en un reajuste de los nucleones que intervienen, por lo que su número no cambia.
- b) Carga eléctrica. La conservación de la carga eléctrica neta (positiva menos negativa) es una de las leyes naturales mejor comprobadas. Esta ley, junto con *a*), indica que en una reacción nuclear se conservan tanto el número de protones como el de neutrones. Este principio de conservación es válido para energías inferiores al umbral de producción de mesones (unos 290 MeV en el laboratorio).
- c) Energía y momento. La conservación de estas magnitudes mecánicas es la base de las relaciones cinemáticas que se han expuesto en el capítulo 34.
- d) Momento angular total. La conservación de esta magnitud es consecuencia de la isotropía del espacio. Simbólicamente, se expresa mediante la igualdad

$$\mathbf{J}_A + \mathbf{J}_a + \mathbf{L}_{aA} = \mathbf{J}_B + \mathbf{J}_b + \mathbf{L}_{bB}$$

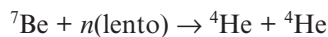
siendo \mathbf{J} el momento angular intrínseco de la partícula que denota el subíndice y \mathbf{L} el momento angular orbital del movimiento de las dos partículas (indicadas por los subíndices) en torno al centro de masas. Dada la regla de composición de momentos angulares, la relación anterior es bastante ambigua, por lo cual sólo sirve para excluir momentos angulares que no pueden darse en la reacción de que se trate.

El momento orbital inicial queda bastante limitado en relación con la energía de la partícula incidente a . Si es p el momento de dicha partícula y q la distancia de mínima aproximación al centro del núcleo A , se tiene $pq \approx \ell\hbar$, siendo ℓ el número cuántico del momento angular orbital \mathbf{L}_{aA} . Para que la reacción nuclear se produzca, la partícula a debe llegar a estar dentro del radio de acción de las fuerzas nucleares originadas en A , lo que indica que q debe ser inferior o igual al radio R del núcleo A . Esto impone la condición

$$\frac{\ell\hbar}{p} \leq R$$

que indica que si a es un nucleón, para energías mucho menores de 1 MeV debe ser $\ell = 0$ (sólo intervienen ondas s).

- e) Paridad. Una prueba de que la paridad debe conservarse es que la reacción



no ocurre a pesar de que se cumplen todos los principios de conservación ya expuestos. Y no ocurre porque las paridades de los estados inicial y final son distintas. En efecto, la paridad del estado inicial es $\pi = -1$ porque el último protón del ${}^7\text{Be}$ tiene $\ell = 1$, de acuerdo con el modelo de capas, y el neutrón lento está en una onda s ($\ell = 0$), según hemos visto unas líneas más arriba. En cambio, la paridad del estado final es $\pi = +1$ porque el número cuántico ℓ del momento angular

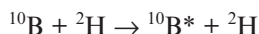
orbital de los dos núcleos de ${}^4\text{He}$ debe ser par, ya que dichos núcleos son bosones y la función de onda de su movimiento relativo tiene que ser simétrica.

- f) Isospín. La independencia de carga de las fuerzas nucleares implica que, a menos del pequeño efecto de la repulsión electrostática entre protones, debe haber estados análogos para distintos sistemas con el mismo número de nucleones: aquellos cuyo carácter de simetría sea tal que se puedan sustituir protones por neutrones, o viceversa, sin violar el principio de Pauli. Estos estados se caracterizan por el isospín (o espín isotópico) T , que puede definirse del siguiente modo:

$$T = \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{l} \text{Número de nucleones que se pueden cambiar por los} \\ \text{de la clase contraria sin violar el principio de Pauli} \end{array} \right\}$$

La magnitud T así definida es formalmente análoga al número cuántico del momento angular, como lo prueban los siguientes ejemplos. Para un nucleón aislado $T = 1/2$ según la definición; podemos caracterizar al protón (p) por la tercera componente $T_3 = +1/2$ y al neutrón (n) por $T_3 = -1/2$. Si tenemos dos nucleones y la función de onda es antisimétrica tendremos $T = 1$ y el mismo estado se podrá materializar de tres maneras (pp), (p,n) y (n,n), que se caracterizan por $T_3 = +1, 0, -1$, respectivamente. Pero si con dos nucleones la función de onda es simétrica $T = 0$, y sólo puede existir (pn) con $T_3 = 0$.

Pues bien, el isospín se conserva aproximadamente en las reacciones nucleares. La conservación no es exacta porque la repulsión electrostática existe, aunque sea pequeña frente a las fuerzas nucleares. Se comprueba que en la colisión inelástica



se excitan preferentemente los estados del ${}^{10}\text{B}^*$ con $T = 0$ porque éste es el isospín en su estado fundamental de los dos núcleos que colisionan.

38.6. PRINCIPIO DEL BALANCE DETALLADO

Es lógico admitir que cada reacción nuclear tenga su reacción inversa con características recíprocas. Esta afirmación se conoce con el nombre de principio de reversibilidad microscópica y es consecuencia de la invariancia de la ecuación de Schrödinger frente a la inversión temporal (si $t \rightarrow -t$, sólo cambia $\psi \rightarrow \psi^*$, que es físicamente equivalente).

De este principio sigue lógicamente una relación muy sencilla entre la sección eficaz σ_a de la reacción $A(a,b)B$ y la sección eficaz σ_b de la reacción inversa $B(b,a)A$, bien entendido que se hace referencia al caso de que las energías de todas las partículas sean iguales en las dos reacciones; sólo varía el sentido de movimiento de las partículas.

Supóngase un conjunto de partículas de las cuatro clases (el mismo número de A que de a y el mismo número de B que de b) en una caja de volumen V . La probabilidad de que una partícula a determinada incida sobre otra A también determinada y produzca la re-

acción $A(a, b)B$ será

$$P_a = \frac{\sigma_a v_a}{V}$$

siendo v_a la velocidad de a . El número total de transiciones $A(a, b)B$ se obtiene multiplicando P_a por la densidad de estados

$$\rho(E_a) = \frac{4\pi p_a^2 dp_a V}{h^3 dE_a} = \frac{4\pi p_a^2 V}{h^3 v_a}$$

En el equilibrio habrá que igualar este número con el de transiciones $B(b, a)A$ obtenido de un modo análogo. Resulta

$$p_a^2 \sigma_a = p_b^2 \sigma_b \quad [38.6.1]$$

que expresa la relación buscada.

En rigor, la ecuación [38.6.1] sólo es válida si los núcleos y partículas que intervienen en la reacción tienen momento angular nulo. En caso contrario, hay que tener en cuenta los pesos estadísticos, para lo cual debe multiplicarse por $(2J_A + 1)(2J_a + 1)$ el primer miembro de [38.6.1] y por una expresión equivalente el segundo.

38.7. SISTEMÁTICA DE LAS REACCIONES NUCLEARES

Las reacciones nucleares pueden ser de diferentes tipos con características experimentales netamente distintas: dispersión elástica e inelástica, reacciones de captura, etc. Todos los tipos pueden englobarse en un esquema general observando que según el tipo se completan parcialmente algunos de los estadios siguientes (véase figura 38.2):

- i) Etapa de la partícula independiente. La partícula que incide sobre el núcleo puede ser dispersada elásticamente o penetrar en él. La primera posibilidad puede denominarse dispersión elástica de forma o dispersión potencial, ya que depende sólo de la forma del potencial nuclear; se trata de una simple desviación de la trayectoria de la partícula incidente debida a la actuación de las fuerzas nucleares.

Este tipo de dispersión elástica, junto con la posibilidad de que la partícula sea absorbida por el núcleo, se explica por medio del modelo óptico. Este modelo da una descripción fenomenológica de los hechos, suponiendo que la acción del núcleo sobre la partícula es debida a un potencial complejo de la forma

$$V = V_1(\mathbf{r}) + iV_2(\mathbf{r})$$

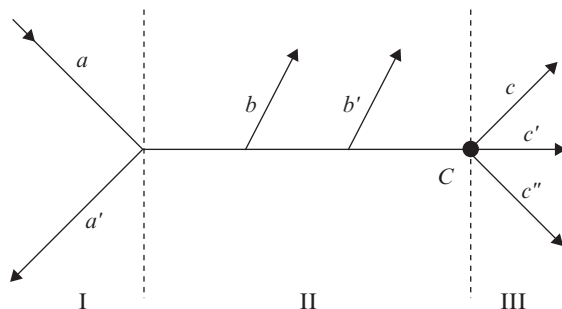


Figura 38.2. Representación simbólica de los diversos estadios por los que puede pasar una reacción nuclear. La región I corresponde a la etapa de partícula independiente (*a* es la partícula incidente y *a'* la misma dispersada elásticamente). La región II es la de interacción con emisión de partículas *b*(*b'* ...) o formación eventual del núcleo compuesto *C*. La región III representa la desintegración del núcleo compuesto emitiéndose *c*(*c'* ...).

La parte real es un pozo o un potencial de Woods-Saxon [36.6.2]; el salto de potencial en la superficie nuclear hace que la onda asociada a la partícula incidente se desdoble en dos: una reflejada (dispersión) y otra transmitida (penetración). La parte imaginaria tiene una forma análoga, aunque distinta profundidad, y representa la absorción. En efecto, en un potencial complejo constante $V = V_1 + iV_2$, la función de onda es de la forma

$$\varphi \propto \exp \frac{i}{\hbar} [2m(E - V_1) - 2mV_2]^{1/2} x$$

que se puede escribir como

$$\varphi \propto \exp\left(-\frac{\beta x}{\hbar}\right) \cdot \exp\left(-\frac{i\alpha x}{\hbar}\right) \tag{38.7.1}$$

siempre que α y β (números reales) satisfagan las relaciones

$$\begin{aligned} 2m(E - V_1) &= \alpha^2 - \beta^2 \\ -2mV_2 &= 2\alpha\beta \end{aligned}$$

El camino libre medio (recorrido para que la probabilidad de encontrar la partícula disminuya en un factor *e*), será

$$l = \frac{\hbar}{2\beta} = \frac{\hbar\alpha}{2mV_2} = \frac{\hbar^2}{2mV_2\lambda} \tag{38.7.2}$$

donde $\lambda = \hbar/\alpha$ es (según [38.7.1]) la longitud de onda de la partícula dividida entre 2π . Vemos que se puede elegir un pozo de potencial imaginario adecuado para explicar la captura. La dispersión se explica con la parte real añadiendo una fuerte interacción espín órbita como la que se utiliza en el modelo de capas.

- ii) Interacción de la partícula penetrante con los nucleones. En esta etapa, la partícula va perdiendo energía, que se comunica a los nucleones del núcleo. Toda la energía puede comunicarse a uno o varios nucleones, que son lanzados fuera del núcleo originándose lo que se llama reacción nuclear por un proceso de interacción directa. Puede también suceder que la energía se distribuya uniformemente entre los nucleones del núcleo, dando lugar a la formación de un núcleo compuesto.
- iii) Desintegración del núcleo compuesto. El núcleo compuesto se encuentra altamente excitado y, en general, puede desintegrarse de varias maneras, que se suelen llamar canales de salida. Las probabilidades de los distintos canales no dependen más que del estado del núcleo compuesto, pero no de la forma como se originó, ya que, durante el proceso, el núcleo compuesto pierde la memoria de su origen.

38.8. REACCIONES QUE OCURREN MEDIANTE EL NÚCLEO COMPUESTO

La probabilidad de desintegración del núcleo compuesto excitado es igual a la inversa de su vida media τ y proporcional, por tanto, a la anchura

$$\Gamma = \hbar/\tau$$

que ya hemos usado en [37.2.2]. Como la desintegración puede ocurrir por diversos canales, esta anchura total es también

$$\Gamma = \Gamma_a + \Gamma_b + \Gamma_c + \dots$$

siendo $\Gamma_a, \Gamma_b, \Gamma_c$, etc., las anchuras parciales correspondientes a los canales de desexcitación permitidos por la conservación de la energía. Obsérvese que la hipótesis fundamental en este tratamiento es que el núcleo compuesto olvida la manera como se formó, por eso cualquiera de los canales que hemos designado con los subíndices a, b, c , etc., puede ser un canal de entrada que lleve a la formación del núcleo compuesto y todos los restantes serían posibles canales de salida (posibles reacciones).

La sección eficaz σ_{ab} de la reacción $A(a, b)B$, que se supone ocurre a través de un núcleo compuesto, se puede expresar del siguiente modo

$$\sigma_{ab} = \sigma_{ac} \frac{\Gamma_b}{\Gamma} \quad [38.8.1]$$

siendo σ_{ac} la sección eficaz de formación del núcleo compuesto y Γ_b/Γ la probabilidad de que el núcleo compuesto se desintegre por el canal $B + b$. Del mismo modo, se puede escribir para la reacción inversa $B(b, a)A$

$$\sigma_{ba} = \sigma_{bc} \frac{\Gamma_a}{\Gamma} \quad [38.8.2]$$

Relacionando [38.8.1] y [38.8.2] por medio de [38.6.1], resulta

$$p_a^2 \sigma_{ac} \frac{\Gamma}{\Gamma_a} = p_b^2 \sigma_{bc} \frac{\Gamma}{\Gamma_b} = \dots$$

donde los puntos de la derecha indican que para otros canales se obtendrían las mismas expresiones con nuevos subíndices. La forma de esta última fórmula indica que

$$p_a^2 \sigma_{ac} \frac{\Gamma}{\Gamma_a} = f(E_x) \quad [38.8.3]$$

siendo $f(E_x)$ una función de la energía de excitación del núcleo compuesto característica de éste, pero no depende de ningún canal particular de entrada o salida. Eliminando σ_{ac} de [38.8.1] y [38.8.3], se obtiene

$$\sigma_{ab} = \frac{1}{p_a^2} \frac{\Gamma_a \Gamma_b}{\Gamma^2} f(E_x) \quad [38.8.4]$$

Esta fórmula es la base para el estudio de las reacciones nucleares a través del núcleo compuesto. La función $f(E_x)$ es el único término que no ha sido discutido hasta ahora. Lógicamente, cabe pensar que $f(E_x)$ sea una función muy lentamente variable, excepto cuando E_x coincida con la energía de un nivel del núcleo compuesto, es decir, excepto cuando el núcleo compuesto quede en uno de sus niveles excitados (resonancias); considérese que $f(E_x)$ representa, dado su papel en [38.8.4], algo así como la capacidad del núcleo compuesto para acomodarse a la energía de excitación.

La fórmula [38.8.4] deberá ser modificada en el sentido que se indica al final de la sección 38.6 si se desea tener en cuenta el efecto de los momentos angulares.

38.9. SECCIONES EFICACES PARA PARTÍCULAS LENTAS

Una primera aplicación de la fórmula [38.8.4] consiste en la determinación de la marcha de la sección eficaz en función de la energía de la partícula incidente cuando esta energía sea muy pequeña (partículas lentas).

En el pequeño intervalo energético que se considera, puede admitirse que $f(E_x)$ permanece constante. En algunos casos, muy raros, esto no sucede por presentarse una resonancia muy próxima al intervalo; en estos casos no son válidas las conclusiones que siguen.

Considérese primero el caso de los neutrones lentos. Cuando inciden sobre los núcleos puede darse una dispersión elástica o una reacción (generalmente captura seguida de la emisión de un rayo gamma).

En el primer caso, parte de la dispersión ocurre a través del núcleo compuesto y procede aplicar [38.8.4] con $\Gamma_b = \Gamma_a \cdot \Gamma^2$; prácticamente no varía por ser muy grande frente a Γ_a ; p_a^2 varía con la energía como E y Γ_a como $E^{1/2}$ (véase ejercicio 38.7). La sección eficaz de dispersión, por tanto, es

$$\sigma_d = \text{Constante} \quad [38.9.1]$$

Si se trata de una reacción nuclear con neutrones lentos, Γ_b es prácticamente constante; dada la pequeña variación de la energía del neutrón incidente, p_a^2 varía como E y Γ_a como $E^{1/2}$. La sección eficaz de la reacción es

$$\sigma_r = CE^{-1/2} \quad [38.9.2]$$

siendo C una constante. Esta fórmula expresa la famosa ley $1/v$ (v velocidad) que sigue la sección eficaz de captura de neutrones lentos.

Para partículas cargadas lentas, también Γ_b y Γ^2 son constantes. Ahora Γ_a varía, según indica [37.6.3], y la sección eficaz es

$$\sigma_p = \frac{C}{E} \exp(-DE^{-1/2}) \quad [38.9.3]$$

siendo C y D constantes. La sección eficaz, en este caso, crece muy rápidamente con la energía.

38.10. FÓRMULA DE BREIT-WIGNER

La significación de $f(E_x)$ en la expresión [38.8.4], apuntada al final de la sección 38.8, puede guiarnos en la búsqueda de la fórmula que nos indique cómo varía en el entorno de un nivel del núcleo compuesto.

Si el núcleo compuesto queda en un nivel excitado para una energía E_a de la partícula incidente, la función de onda ψ de dicho núcleo debe evolucionar (a menos de una fase que depende del origen de energías) como

$$\exp\left[\frac{-i(E_a - i\Gamma/2)t}{\hbar}\right] \quad [38.10.1]$$

para que $|\psi|^2$ sea proporcional a

$$|\psi|^2 \propto e^{-\Gamma t/\hbar}$$

que es como debe disminuir la probabilidad de que el núcleo compuesto se encuentre en un estado excitado de anchura Γ (véase fórmula [37.2.2]).

Ahora bien, si la evolución temporal de ψ es la que indica la fórmula [38.10.1], es claro que el estado correspondiente no tiene energía definida. La amplitud de probabilidad de una energía E vendrá dada por la transformada de Fourier $g(E)$ de [38.10.1], que es

$$g(E) = \frac{\hbar}{2\pi} \int e^{iEt/\hbar} e^{-i(E_a - i\Gamma/2)t/\hbar} dt \propto \left[E_a - E - \frac{i\Gamma}{2} \right]^{-1}$$

Parece ahora razonable que la función $f(E_x)$ de [38.8.4] sea proporcional al cuadrado de $g(E)$, con lo que tendremos

$$f(E_x) \propto \frac{\Gamma^2}{(E - E_a)^2 - (\Gamma/2)^2}$$

si queremos escribir $f(E_x)$ en forma adimensional, como debe ser por su significado. Con la expresión anterior puesta en [38.8.4], resulta

$$\sigma_{ab} \propto \frac{1}{p_a^2} \frac{\Gamma_a \Gamma_b}{(E - E_a)^2 - (\Gamma/2)^2} \quad [38.10.2]$$

Esto es, a menos de una constante, la famosa fórmula de Breit-Wigner que expresa la variación de la sección eficaz de una reacción nuclear en torno a una resonancia o máximo que ocurra para una energía E_a de la partícula incidente. La fórmula puede ajustarse a la medida experimental de la sección eficaz, de manera que se puede determinar la anchura Γ directamente.

Es claro que para llegar a [38.10.2] hemos utilizado un argumento heurístico en aras de la simplicidad. La deducción rigurosa de la fórmula de Breit-Wigner se encuentra en los textos especializados.

EJERCICIOS

38.1. Calcular la velocidad y la longitud de onda de los neutrones térmicos de 0.025 eV de energía.

38.2. La sección eficaz de captura de un neutrón por un protón vale 0.31 b para neutrones térmicos a temperatura ambiente (20 °C). ¿Cuánto valdrá si los neutrones están en equilibrio térmico con un medio a 600 °C?

- 38.3.** ¿Cuál es el valor máximo de la sección eficaz de una reacción nuclear provocada por neutrones de baja energía? Usar un argumento semiclásico inspirado en el razonamiento de la sección 38.5(d).
- 38.4.** Comentar las consecuencias de la conservación del isospín en la colisión inelástica $^{10}\text{B} + p \rightarrow ^{10}\text{B}^* + p$.
- 38.5.** Calcular la sección eficaz de fotodesintegración del deuterón cerca del umbral sabiendo que la sección eficaz de la reacción $n + p \rightarrow d + \gamma + 2.23 \text{ MeV}$ es 0.31 b para neutrones de 0.025 eV y sigue la ley $1/v$.
- 38.6.** ¿Cuál es el camino libre medio de un neutrón de 10 MeV que se propaga dentro de un núcleo cuya absorción se describe por un potencial imaginario de 5 MeV?
- 38.7.** Demostrar que para un neutrón lento la anchura parcial Γ_m , definida en el apartado 38.8, crece con la raíz cuadrada de la energía del neutrón.
- 38.8.** Se han medido las secciones eficaces de la reacción $^3\text{H}(d,n)^4\text{He}$ para 36 keV y 66 keV con el resultado de 1.6 b y 2.8 b, respectivamente. ¿Cuál será la sección eficaz para 1 keV?

Soluciones a los ejercicios (capítulos 34 a 38)

- 34.1.** Según [34.2.5], el hierro contiene $N = 8.48 \times 10^{22}$ núcleos por cm^3 . Aplíquese ahora [34.2.4] con $\sigma = 13.5 \times 10^{-24} \text{ cm}^2$ y $a = 0.2 \text{ cm}$ para obtener $I(d)/I_0 = 0.795$. Pasa intacto el 80% de los neutrones. Como más del 90% del hierro es ^{56}Fe , se podría haber usado 56 como peso atómico sin perder precisión, porque el dato que tiene mayor error es la sección eficaz.
- 34.2.** Según [34.2.5], con $\rho = 1 \text{ g} \times \text{cm}^{-3}$ y $A = 18$ en el agua hay $N = 3.34 \times 10^{22}$ moléculas por cm^3 . Como la molécula tiene dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno, la sección eficaz total es $\sigma = 2 \times 39 + 4 = 82 \text{ b}$. Según [34.2.6], $\bar{x} = 0.36 \text{ cm}$. Obsérvese que si se ignora el oxígeno, resulta casi lo mismo.
- 34.3.** En la muestra de 0.005 g hay $N = 1.33 \times 10^{19}$ núcleos radioactivos. El período es $T = 5.071 \times 10^{10} \text{ s}$, y, según [34.3.4], $\lambda = 1.367 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. Usando [34.3.2], resulta $A = 1.82 \times 10^8 \text{ Bq} = 49 \text{ mCi}$.
- 34.4.** Usando [34.2.5] se calcula que en el oro hay $N = 5.9 \times 10^{22}$ átomos por cm^3 y, por tanto, en la lámina 1000 veces menos, es decir, 5.9×10^{19} . Multiplicando este número por el flujo de neutrones ($10^8 \text{ cm}^{-2} \times \text{s}^{-1}$) y por la sección eficaz ($98 \times 10^{-24} \text{ cm}^2$), resulta que se producen $Q = 5.78 \times 10^5$ núcleos de ^{198}Au por segundo. El período es $T = 2.33 \times 10^5 \text{ s}$ y, según [34.3.4], $\lambda = 2.97 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$. Usando ahora [34.3.5], al cabo de un día habrá 4.41×10^{10} núcleos de ^{198}Au , y su actividad, según [34.3.2], será $A = 1.31 \times 10^5 \text{ Bq} = 3.54 \text{ } \mu\text{Ci}$.
- 34.5.** Sean N y λ el número de núcleos y la constante radioactiva de cada tipo, que designaremos con los subíndices 1, 2 y 3. Las ecuaciones diferenciales de evolución serán

$$\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 N_1 \quad , \quad \frac{dN_2}{dt} = \lambda_1 N_1 - \lambda_2 N_2 \quad , \quad \frac{dN_3}{dt} = \lambda_2 N_2$$

puesto que N_2 crece al ritmo que decrece N_1 y disminuye al ritmo que aumenta N_3 . Si en el instante inicial $t = 0$ sólo hay N_1^0 núcleos de tipo 1, la evolución de la cadena viene dada por

$$N_1 = N_1^0 e^{-\lambda_1 t} \quad , \quad N_2 = N_1^0 \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t})$$

$$N_3 = N_1^0 \left[1 + \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} e^{-\lambda_2 t} - \frac{\lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} e^{-\lambda_1 t} \right]$$

- 34.6.** Igualando la fuerza centrífuga a la fuerza magnética sobre una partícula de carga q , masa m y velocidad v se tiene $mv^2/r = qvB$, de donde $Br = mv/q$, o bien (multiplicando y dividiendo el segundo miembro por la velocidad de la luz en el vacío) $Br = mcv/qc$. Esta fórmula es válida con las siguientes unidades: B en tesla (T), r en metros (m), mcv en julios (J), q en coulombios (C) y con $c = 3 \times 10^8 \text{ m} \times \text{s}^{-1}$. Ahora bien, $1 \text{ cm} = 10^{-2} \text{ m}$, $1 \text{ MeV} = 1.6 \times 10^{-13} \text{ J}$, una carga elemental $1e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ y $p = mv$, por lo que podemos escribir

$$B(T)r(\text{cm})10^{-2} = \frac{cp(\text{MeV})1.6 \times 10^{-13}}{3 \times 10^8 q(e)1.6 \times 10^{-19}}$$

o bien

$$B(T)r(\text{cm}) = \frac{1}{3} \frac{p(\text{MeV}/c)}{q(e)}$$

que es idéntica a [34.4.4] puesto que $1 \text{ T} = 10^4 \text{ G}$.

- 34.7.** Usar [34.5.1]: $T = 4.79 \text{ MeV}$.
- 34.8.** Usar [34.5.2] con $\cos 90^\circ = 0$ y tomar los números másicos en lugar de las masas. La energía de los neutrones es 7.74 MeV .
- 34.9.** Usar [34.6.1]. La energía umbral es 1.88 MeV .
- 34.10.** La pérdida logarítmica de energía es $\ln(2 \times 10^6/0.025) = 18.2$. La pérdida media por choque se calcula con [34.6.2]; el grafito se compone de átomos de ^{12}C , con lo cual $r = 0.716$ y $\xi = 0.158$. El número de choques es 115 .
- 35.1.** Según [35.2.2], $\delta E_\alpha/\delta E_p = 4v_p^2/v_\alpha^2$, y para la misma energía, $v_p^2/v_\alpha^2 = m_\alpha/m_p = 4$ la partícula alfa ioniza 16 veces más.
- 35.2.** Primeramente se calcula relativísticamente la velocidad del electrón mediante $T + mc^2 = mc^2/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ con $T = 1.25 \text{ MeV}$ y $mc^2 = 0.51 \text{ MeV}$. Resulta $v = 0.8427 c$, que es muy próxima a c y superior a la velocidad de la luz en el agua. Aplíquese [35.2.4] para obtener $\theta = 26.85^\circ$.

- 35.3.** Para la misma velocidad las energías son proporcionales a las masas. Por eso una partícula alfa de $2 \times 4/7 = 1.14$ MeV lleva la misma velocidad que el núcleo de litio de 2 MeV. El alcance de una partícula alfa de 1.14 MeV es 0.56 cm según la tabla 35.1. Aplíquese ahora [35.3.1] ignorando c porque las cargas son muy parecidas (2 y 3). Resulta $R \approx 0.43$ cm.
- 35.4.** Lo primero es calcular la sección eficaz total para que los electrones sean reflejados por el aluminio. Para ello hay que integrar [35.2.1] tal como indica [34.2.2] pero entre $\pi/2$ y π . La integración sobre el ángulo se puede hacer numéricamente de cualquier manera porque el error de la estimación no está ahí. Obsérvese además que la fórmula [35.2.1] está dada en unidades de Gauss como es costumbre; quede como ejercicio para el lector introducir la permitividad del vacío donde proceda si desea usar unidades SI. Resulta aproximadamente $\sigma \approx 3 \times 10^{-23}$ cm². Ahora viene lo más difícil, que es estimar cuántos átomos por cm² intervienen en la reflexión. Como el alcance de los electrones es 0.5 g/cm² y el haz disminuye muy deprisa, como muestra la figura 35.4, parece razonable que sólo contribuyan a la reflexión los situados en los primeros 0.1 g/cm², que son $N = 0.1 \times 6 \times 10^{23}/27 = 2.3 \times 10^{21}$ cm⁻². La fracción de los electrones reflejados será $N\sigma \approx 0.07$, es decir, el 7%. Claro es que lo mismo podría ser el doble que la mitad.
- 35.5.** La sección eficaz total de absorción es $\sigma = \sigma_F + 6\sigma_c$ donde σ_F se calcula con [35.4.2] y σ_c con [35.4.5]. Resulta $\sigma = 3.12 \times 10^{-24}$ cm². Aplíquese [34.2.4] para obtener $I/I_0 = 0.6$. Pasa el 60% de los rayos X.
- 35.6.** El número de electrones del objeto es $n = 50 \times 6 \times 10^{23}(Z/A) = 1.5 \times 10^{25}$. Si inciden I_0 fotones por cm², el número de dispersados será $I = I_0 n \sigma_c$. La sección eficaz σ_c se calcula con [35.4.6] y resulta 1.035×10^{-26} cm². La fracción de fotones dispersados es $n\sigma = 0.15$, es decir, el 15%.
- 35.7.** Como 1Ci = 3.7×10^{10} desintegraciones por segundo y la emisión de la fuente es isotropa, al espejo llegan $R = 100 \times 0.25 \times 3.7 \times 10^{10}/4\pi 100^2 = 7.36 \times 10^6$ fotones cm⁻² s⁻¹. Allí se dispersan, por efecto Compton, por los $n = 3 \times 10^{25}$ electrones que contiene el espejo (véase ejercicio 35.6). La sección eficaz diferencial para $\theta = 90^\circ$ se calcula mediante [35.4.3] y [35.4.4] y resulta $d\sigma/d\Omega = 8.133 \times 10^{-27}$ cm². Los fotones que llegan al observador son $(Rn/d^2)(d\sigma/d\Omega)$, siendo $d = 200$ cm. El flujo de rayos gamma que llega al observador es 44 cm² s⁻¹.
- 35.8.** Para cada ángulo la energía del electrón es $\hbar\omega' - \hbar\omega$ y se calcula con la fórmula [35.4.3]. Las probabilidades son proporcionales a [35.4.4] multiplicado por $\sin \theta$. Para $\theta = 0, 45, 90, 135, 180$ grados las energías son 0, 1.068, 1.593, 1.740, 1.773 MeV con probabilidades proporcionales a 0, 0.324, 0.170, 0.123, 0, respectivamente.

35.9. Si el positronio se forma con un momento angular no nulo, emite luz y pasa a uno de los dos estados S posibles: el estado triplete 3S , en el que ambos, electrón y positrón, tienen el espín paralelo (ortopositronio), o el estado singlete 1S , con espín antiparalelo (parapositronio). A partir de estos estados el positronio se aniquila. Por conservación del momento angular (el del fotón es 1) el parapositronio puede aniquilarse en dos fotones (o un número par mayor, lo que es menos probable), que salen en direcciones opuestas cada uno con la mitad de la energía disponible ($2 mc^2$), es decir, con $\hbar\omega = 0.511$ MeV.

El ortopositronio puede aniquilarse en tres o más fotones con energía no definida. Por conservación de momento no puede aniquilarse en un fotón.

35.10. Usar la fórmula [35.4.9] y la tabla 35.2 para obtener $III_0 = 0.44$.

36.1. Según el principio de indeterminación, el momento del nucleón será 10^5 veces mayor que el del electrón. Por otra parte, la masa del nucleón es unas 2000 masas electrónicas. Como la energía es proporcional al cuadrado del momento e inversamente proporcional a la masa, la energía del nucleón será del orden de 5 MeV.

36.2. Según [36.2.2], con $r_0 = 1.2$ F el radio del núcleo de plomo es 7.1 F y su diámetro de unos 14 F. Una rendija de anchura b produce un ensanchamiento de un haz luminoso dado por el ángulo $\theta = \lambda/b$, siendo λ la longitud de onda. Supongamos que la aproximación de la óptica geométrica será buena cuando $\theta = 30' = 0.0087$ rad. Si $b = 14$ F, necesitamos que la longitud de onda de los electrones sea $\lambda = 0.12$ F. Según la fórmula de De Broglie, $\lambda = h/p$, que escribimos $\lambda/2\pi = \hbar c/pc$ porque para electrones ultrarrelativistas $E = pc$ y, además, tenemos la fórmula práctica $\hbar c/197$ MeV = 1 F. Para $\lambda = 0.12$ F debe ser $E = 10\ 162$ MeV, es decir, unos 10 GeV. Hay aceleradores de electrones que producen energías superiores.

36.3. La masa del electrón es 0.51 MeV/ c^2 , y como el radio de Bohr es inversamente proporcional a la masa, dicho radio vale $r = (260/Z)$ F. El radio nuclear R se calcula con [36.2.2] y $r_0 = 1.1$ F. Resultados en F:

$$Z = 20(r = 13, R = 3.7), Z = 40(r = 6.5, R = 4.9), Z = 80(r = 3.25, R = 6.21)$$

36.4. Combinando [36.3.2] y [36.3.1] se tiene $\omega = eB/2M_p c$, que es la fórmula clásica de Larmor en unidades de Gauss; basta introducir valores para obtener [36.3.3]. Se invita al lector a escribir las mismas fórmulas en unidades SI.

36.5. Partiendo en [36.2.2] con $r_0 = 1$ F, el volumen de un núcleo es $5.57 A F^3$ y cada nucleón ocupa $5.57 F^3$; la distancia entre nucleones será 1.8 F (que es la raíz cúbica de 5.57). La distancia entre dos protones será el doble, y a esa distancia la repulsión electrostática es $e^2/r = 0.4$ MeV.

36.6. Aplicando la fórmula [36.5.6] se obtiene $B = 1797.8$ MeV para el uranio y 989.9 MeV para cada uno de los dos núcleos finales. Se desprenderán $2 \times 989.9 - 1797.8 = 182$ MeV. De hecho, la energía de fisión es de unos 200 MeV.

- 36.7.** Cuando un neutrón muy lento (energía prácticamente nula) penetra en un núcleo de ^{238}U se forma un núcleo de ^{239}U y la diferencia de energía de enlace entre ambos es 2.55 MeV según [36.5.6]. En cambio, un neutrón añadido al ^{235}U da lugar a ^{236}U , y la diferencia de energías es ahora 6.66 MeV. Aparentemente, esta energía es suficiente para vencer la barrera que impide la fisión espontánea, mientras que 2.55 MeV no lo es.
- 36.8.** Puede usarse la aproximación $M = 931.5 A \text{ MeV}/c^2$ en [36.5.8] y calcular R mediante [36.2.2]. Recordando que $\hbar c = (197 \text{ MeV}) \times (1 \text{ F})$, resulta la fórmula práctica $E_R(\text{MeV}) = 41.7\ell(\ell + 1)/r_0^2 A^{5/3}$. Si $r_0 = 1.1 \text{ F}$, las energías buscadas son 0.46, 0.032 y 0.01 MeV, respectivamente.
- 36.9.** A partir de [36.5.10], y procediendo como en el ejercicio anterior, se obtiene la fórmula práctica $E_v(\text{MeV}) = 13.21[n(n - 1)(n + 2)\alpha/A]^{1/2}$. Si $r_0 = 1.1 \text{ F}$, es $\alpha = 0.7 \text{ MeV} \times \text{F}^{-2}$, según [36.5.9], y para $n = 2$ resultan las energías 7, 3.1 y 2.2 MeV, respectivamente.
- 36.10.** El último neutrón del $^{12}_6\text{C}$ estará en el nivel $1p_{1/2}$, por lo cual su espín será $1/2$ y su paridad -1 . Del mismo modo, se ve que para el $^{27}_{13}\text{Al}$ el espín será $5/2$ y la paridad $+1$.
- 37.1.** Es inmediato si se escribe $\Gamma = \hbar c/\tau c$, y se recuerda que $\hbar c = (197 \text{ MeV}) \times (1 \text{ F})$ y $c = 3 \times 10^{10} \text{ cm/s}$.
- 37.2.** La fórmula práctica $\lambda(\text{nm}) = 1239.6/E(\text{eV})$ permite calcular $\hbar\omega = 2.1 \text{ eV}$ para el átomo de sodio. Resulta $\Delta\omega/\omega = 3 \times 10^{-7}$ para el sodio y $\Delta\omega/\omega = 1.6 \times 10^{-9}$ para el núcleo de mercurio.
- 37.3.** Sí, porque el ensanchamiento de la línea por efecto Doppler —dado por [37.3.2]— a esa temperatura es de unos 2 eV, valor muy superior a la diferencia de 0.9 eV citada en el texto.
- 37.4.** Los correspondientes a las transiciones $3^+ \rightarrow 2^-$ y $2^- \rightarrow 1^+$, que son del tipo $E1$. Será difícil observar los fotones de la transición $3^+ \rightarrow 1^+$ por ser del tipo $E2$ (mucho más débil).
- 37.5.** La transición $5/2^+ \rightarrow 3/2^-$ es dipolar eléctrica y será más intensa que la $5/2^+ \rightarrow 1/2^+$, que es cuadrupolar eléctrica. La relación estimada de las intensidades será $(kR)^2$, siendo $k = 2\pi/\lambda$ y $R = 1.3A^{1/3} \text{ F}$. Úsese la fórmula práctica $\lambda(\text{F}) = 1239.6/E(\text{MeV})$ para calcular λ . Resulta $(kR)^2 = 0.01$. La línea espectral débil será alrededor del 1% de la fuerte.
- 37.6.** Multiplicando y dividiendo el exponente de [37.6.3] por c aparece $e^2/\hbar c = 1/137$ y mc^2 , que para la partícula alfa (^4He) vale $2 \times 938 + 2 \times 939 - 28 = 3726 \text{ MeV}$.

- 37.7.** Hay que aplicar [37.6.3] con $m = 938 \text{ MeV}/c^2$ (masa del protón). Resulta $T \approx 6 \times 10^{-45}$. Si en la fórmula se sustituye el factor 8 por 2π , se tiene $T \approx 2 \times 10^{-35}$. Sin comentarios.
- 37.8.** En [37.6.3] hay que poner 7 (el número atómico del nitrógeno) en lugar de $Z - 2$ y $m = 0.51 \text{ MeV}/c^2$. El factor 8 se sustituye por un parámetro x que podemos variar. Procediendo por tanteo, vemos que para $x = 0.1$ y $cE = 1.81 \text{ MeV}$ la transmisión vale $T \approx 0.995$, es decir, casi la unidad. Con el mismo valor de x y $E = 0.18 \text{ MeV}$ resulta $T \approx 0.987$. El efecto de la barrera de Coulomb sobre los electrones lentos es del orden del 1%.
- 37.9.** Como la masa de un nucleón es $1.67 \times 10^{-24} \text{ g}$ habrá $N = 3 \times 10^{24}$ nucleones/cm³. El diámetro de la Tierra es $d = 1.27 \times 10^9 \text{ cm}$. La probabilidad de que haya una interacción es σNd , y la probabilidad de que no haya ninguna es $1 - \sigma Nd = 0.9999999996$.
- 37.10.** La energía del neutrino es $E_\nu = [c^2 p_\nu^2 + m_\nu^2 c^4]^{1/2} \approx cp_\nu + m_\nu^2 c^4 / 2cp_\nu$ si m_ν es muy pequeño. Póngase $Q - E$ en el primer miembro de esta ecuación y aproxímese el último término por $m_\nu^2 c^4 / 2(Q - E)$. Cálculése p_ν^2 despreciando el término en m_ν^4 . En lugar de [37.8.3] resulta

$$P(p) dp \sim p^2 [(Q - E)^2 - m_\nu^2 c^4] dp$$

La energía máxima del electrón es ahora $Q - m_\nu c^2$, como es lógico. La forma del espectro cerca de esta energía cambia radicalmente. Estudiando esta forma en el espectro del tritio se puede dar una cota máxima a la masa del neutrino.

- 38.1.** La velocidad es 2190 m/s y la longitud de onda 0.18 nm.
- 38.2.** La sección eficaz es inversamente proporcional a la velocidad y ésta es proporcional a la temperatura absoluta. Resulta $\sigma = 0.18 \text{ b}$.
- 38.3.** Para neutrones lentos es $\ell = 0$, y la distancia q de mínima aproximación es $q \leq \hbar/p$. La sección eficaz será $\sigma = \pi q^2 \leq \pi \lambda^2$, siendo λ la longitud de onda dividida entre 2π . Esta conclusión no es válida para la dispersión de neutrones por efecto de la difracción.
- 38.4.** El isospín inicial es $T = 1/2$ (el de ^{10}B es $T = 0$ y el de protón $T = 1/2$). El mismo valor puede obtenerse en el estado final combinando el isospín del protón con el de los estados $T = 0$ y $T = 1$ del boro excitado. No existe, por tanto, la restricción que mostraba el ejemplo mencionado al final del apartado 38.5.
- 38.5.** Basta aplicar [38.6.1] para obtener $\sigma = 2.94 \mu\text{b}$ cuando el neutrón salga con 0.025 eV de energía. La sección eficaz aumentará con la raíz cuadrada de la energía del

neutrón; por tanto, $\sigma = 18.4\sqrt{E_\gamma - 2.23}$ b, siendo E_γ la energía del fotón incidente en MeV. Este cálculo es sólo una estimación porque no se ha realizado en el sistema del centro de masas ni se han tenido en cuenta los espines.

- 38.6.** Basta aplicar la fórmula [38.7.2] para obtener $l = 2.87 \times 10^{-13}$ cm.
- 38.7.** La anchura buscada Γ_n es proporcional a la probabilidad de cruzar el salto brusco de potencial en la superficie del núcleo. Si es k_0 el número de ondas del neutrón dentro del núcleo y k fuera de él, la probabilidad buscada es $4kk_0/(k_0 + k)^2$, como se muestra en los cursos elementales de mecánica cuántica. En nuestro caso, $k \ll k_0$, por lo cual $\Gamma_n \sim 4k/k_0$. k_0 es prácticamente constante para pequeñas variaciones de k , que es proporcional a \sqrt{E} .
- 38.8.** Se usan los datos para ajustar las dos constantes de la expresión [38.9.3] y, una vez conocidas, se calcula la sección eficaz que resulte ser $0.015 \mu\text{b}$. Demasiado pequeña para medirla directamente.

PARTE SÉPTIMA

Partículas elementales

- Aspectos generales de las partículas elementales.
- Interacciones entre partículas elementales.
- Leyes de conservación.
- Estructura de las partículas: las familias.

BIBLIOGRAFÍA

No se incluyen libros para cuya comprensión el conocimiento de Teoría Cuántica de Campos es estrictamente necesario.

Álvarez-Estrada, R. F. y Ramón Medrano, M. (2003). *Partículas elementales*. México: Fondo de Cultura Económica.

Introducción a la materia con un tono divulgador y formalismo matemático mínimo. Incluye modelos teóricos y una breve introducción a la Teoría de Cuerdas (próxima versión electrónica, actualizada y ampliada).

Close, F., Marten, M. y Sutton, C (2004). *The Particle Odyssey*. Reino Unido: Oxford University Press.

Fritzsche, H. (2005). *Elementary Particles Building Blocks of Matter*. Singapur: World Scientific Co.

Exposición de los objetos elementales constituyentes de las partículas y de sus interacciones. Sin formalismo matemático.

Huang, K. (2007). *Fundamental Forces of Nature*. Singapur: World Scientific Co.

Teorías de las interacciones fundamentales. No es divulgativo.

Veltman, M. J. G. (2003). *Facts and Mysteries in Elementary Particle Physics*. Singapur: World Scientific Co.

Exposición accesible de la Física de Partículas dentro de los marcos de Mecánica Cuántica, Relatividad y Teorías de las Interacciones Fundamentales. Detectores y aceleradores.

Ynduráin, F. J. (2001). *Electrones, neutrinos y quarks*. España: Editorial Crítica.

Direcciones electrónicas

www.cerncourier.com
www.larecherche.fr
www.iop.org
www.newscientist.com
www.physicstoday.org
www.physicsweb.org
www.sciam.com

Tablas de partículas

www.cern.ch/library

39

Aspectos generales de las partículas elementales

Marina Ramón Medrano

39.1. PARTÍCULA ELEMENTAL

La pregunta «¿qué es una partícula elemental?» no tiene una respuesta inmediata. No sólo debido a la diversidad de partículas, y a las diferentes propiedades asociadas a ellas, sino a que la misma pregunta no está correctamente planteada. La clave está en la palabra *elemental*. ¿Qué es un objeto elemental? Una definición posible sería: entidad indivisible, constituyente de una entidad superior o más compleja. Pero, por otra parte, hemos visto que, mientras en Física Atómica (capítulos 19-23) el núcleo es un objeto puntual (sin estructura) dentro del átomo (el sistema cuántico constituido por núcleos y electrones), en Física Nuclear (capítulos 34-38) ese mismo núcleo ya *no* es elemental, sino que está formado por protones y neutrones. Esta percepción diferente del núcleo radica en que en el primer caso estamos observando fenómenos físicos a una distancia del orden de 10^{-8} cm = 1 angström (1 Å) —o bien con energías características del orden de los electrón-voltios (eV)—, mientras que en el segundo las distancias son del orden de 10^{-13} cm = 1 fermi (1 F) —o energías del orden de los megaelectrón voltios (1 MeV = 10^6 eV)—. En conclusión, el hecho de que un objeto físico sea considerado elemental depende de las distancias que seamos capaces de medir, o equivalentemente (relación de De Broglie, capítulo 3) del orden de las energías puestas en juego en los procesos físicos en que dicho objeto interviene. Siguiendo con el ejemplo anterior, si nos adentramos a distancias del orden de 10^{-16} cm —o energías del orden de los gigalectrón voltios (1 GeV = 10^9 eV)—, observaremos que tanto el protón como el neutrón *no* son objetos elementales, sino que están constituidos de otros tres —llamados *quarks*—, que a esas distancias, o energías, aparecen como elementales (capítulo 42). En el rango de energías de que disponemos en los aceleradores actuales (apéndice N) nuestro conocimiento de la composición de la materia se detiene en este estadio. Otros objetos que, hoy por hoy, se consideran elementales son, por ejemplo, el electrón y el fotón, ya familiares a lo largo del texto.

39.2. MASA Y CARGA. UNIDADES NATURALES

Las primeras propiedades que se observan en una partícula son su masa y su carga eléctrica. La carga eléctrica total es siempre conservada en un proceso físico (capítulo 41). Por tanto, conocida la carga de una partícula, y tomada ésta como unidad, podemos de-

finir las de las restantes relativamente a ella. La unidad elegida es el valor absoluto de la carga del electrón $|e|$:

$$|e| = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$$

Por ejemplo, las cargas del protón (p), electrón (e) y fotón (γ) —referidas a esta unidad— son ahora:

$$q_p = 1 \quad q_e = -1 \quad q_\gamma = 0$$

Hasta ahora sólo se han observado partículas libres con carga eléctrica igual a un múltiplo entero (positivo, negativo o nulo) de esta unidad (capítulo 42).

Las masas en reposo (apéndice D) de las partículas, dadas sus pequeñas dimensiones (del orden de 10^{-13} cm- 10^{-16} cm), son extraordinariamente pequeñas comparadas con las de cualquier objeto macroscópico. Por ejemplo, la masa del electrón en el Sistema Internacional (SI) es igual a 9.109×10^{-31} kg, cifra que, obviamente, no es práctica para cálculos. Se impone, por tanto, introducir unidades idóneas para el estudio de los procesos físicos descritos por las partículas y sus interacciones. Éstas serán las llamadas Unidades Naturales (véase también apéndice A):

i) Las dos constantes fundamentales de la Mecánica Cuántica Relativista (debido a las altas energías los procesos son relativistas) son \hbar (constante reducida de Planck) y c (la velocidad de la luz en el vacío):

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$c = 2.988 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

En el sistema de Unidades Naturales se elige:

$$\boxed{\hbar = c = 1} \quad [39.2.1]$$

y, dado que \hbar tiene dimensiones de acción ($[ML^2/T]$) y c de velocidad ($[L/T]$), tendremos como consecuencia la ecuación:

$$[L] = [T] = [M]^{-1} \quad [39.2.2]$$

es decir, la longitud y el tiempo se miden en las mismas unidades, y la masa en sus inversas.

ii) Por otra parte, la expresión en dimensiones de la energía es:

$$[E] = \left[\frac{ML^2}{T^2} \right]$$

luego se deduce de [39.2.2]

$$[E] = [M]$$

es decir, la masa se mide en unidades de energía. En resumen, considerando, por ejemplo, como unidad de energía el eV ($1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$), podemos escribir la tabla 39.1:

TABLA 39.1
Sistema de Unidades Naturales ($\hbar = c = 1$)

Magnitud	Unidades ($\hbar = c = 1$)
L (longitud)	$(\text{eV})^{-1}$
T (tiempo)	$(\text{eV})^{-1}$
M (masa)	(eV)

Sin embargo, dado el rango de energías que intervienen en los procesos con partículas, las magnitudes anteriores se expresarán, preferentemente, en función de MeV ($1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV}$) y de GeV ($1 \text{ GeV} = 10^9 \text{ eV} = 10^3 \text{ MeV}$).

Volviendo al caso del electrón, su energía en reposo (apéndice D) en el SI y en el Sistema de Unidades Naturales viene dada por:

$$\begin{aligned} E &= mc^2 = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (2.998 \times 10^8 \text{ m} \times \text{s}^{-1})^2 \\ &= 81.872 \times 10^{-15} \text{ J} \\ &= 0.511 \text{ MeV} \end{aligned}$$

Por tanto, la masa en reposo del electrón en el sistema de Unidades Naturales vendrá dada por:

$$m_e = 0.511 \text{ MeV}$$

De la igualdad de la masa en ambos sistemas se deduce la equivalencia:

$$1 \text{ kg} = 5.609 \times 10^{29} \text{ MeV}$$

39.3. PRIMEROS EJEMPLOS: PROTÓN, NEUTRÓN, ELECTRÓN Y FOTÓN

39.3.1. Fotón (γ)

En el capítulo 2 se ha visto que los efectos fotoeléctrico y Compton corroboran la naturaleza corpuscular de la radiación. En ellos, la energía de la radiación electromagné-

tica aparece concentrada en un gran número de «paquetes» (o *cuantos*) llamados fotones. El fotón es una partícula *elemental* que se mueve a la velocidad de la luz (c), y cuya masa *en reposo* es, por tanto, nula ($m_\gamma = 0$) (capítulos 2 y 15). Su carga eléctrica es nula ($q_\gamma = 0$) y su espín es igual a 1 ($s_\gamma = 1$). Como el espín es entero, el fotón es un bosón.

El papel del fotón como cuanto *mediador* de la interacción electromagnética, entre partículas, será considerado en el capítulo 40.

39.3.2. Electrón (e)

Es conocido que su descubrimiento fue debido a J. J. Thomson (1897) al estudiar las descargas eléctricas a través de gases enrarecidos. Las descargas eran producidas por el paso del cátodo al ánodo (ambos en el interior de un tubo que contenía un gas a baja presión) de haces de electrones. Thomson determinó el cociente e/m_e midiendo las desviaciones sufridas por un haz extraído del interior del tubo al pasar por campos eléctrico y magnético. Posteriormente, R. A. Millikan (1906-1916) —mediante «el método de la gota equilibrada»— determinó e . Como hemos visto en las unidades elegidas, su masa, en reposo, es igual a 0.511 MeV, y su carga es igual a -1 . El espín del electrón es igual a $1/2$ ($s_e = 1/2$) (capítulo 13), y es, por tanto, un fermión.

39.3.3. Protón (p)

Si en el anterior tubo de descarga se perfora el cátodo, se observará detrás de él un haz de partículas materiales cargadas positivamente (E. Goldstein, 1886). El fenómeno es debido a que los haces de electrones ionizan los átomos del gas enrarecido a su paso por éste. El cociente de la carga/masa de dichas partículas se determina por la desviación sufrida por un haz en presencia de campos eléctrico y magnético (Thomson, 1911). La determinación de su masa se realiza mediante el espectrógrafo de masas (F. W. Aston, 1919, capítulo 36). Si el gas elegido es hidrógeno, las partículas atraídas por el cátodo serán, naturalmente, protones. En nuestro sistema de unidades la masa del protón (m_p) es 938.27 MeV, y la carga (q_p) es igual a 1. La estructura hiperfina del espectro atómico es evidencia del espín del protón (y del neutrón). El protón tiene espín (s_p) igual a $1/2$ (D. M. Dennison, 1927), y es, por tanto, un fermión.

39.3.4. Neutrón (n)

En 1920, E. Rutherford predijo la existencia de partículas neutras —con masa ligeramente superior a la del protón— dentro del núcleo. Posteriormente, al bombardear el berilio (${}^9\text{Be}_4$) con partículas α (${}^4\text{He}_2$) se observó la emisión de una radiación de alto poder de penetración, que no era desviada por campos eléctricos y magnéticos, y que al incidir en una muestra de parafina, por ejemplo, originaba un haz de protones (que eran detec-

tados). La radiación, desconocida hasta entonces, está constituida por neutrones (J. Chadwick, 1932) que se producen en la reacción nuclear:



donde ${}^{12}\text{C}_6$ es un isótopo del carbono. Los valores de la masa (m_n), la carga (q_n) y el espín son:

$$m_n = 939.57 \text{ MeV} \quad q_n = 0 \quad s_n = \frac{1}{2}$$

39.4. RAYOS CÓSMICOS: NUEVAS PARTÍCULAS. ANTIPARTÍCULAS

A finales del siglo XIX y principios del XX se suponía que la conductividad eléctrica del aire se debía, exclusivamente, a la ionización producida en él por las sustancias radiactivas presentes en la corteza terrestre; por ello, un electroscopio se descargaba lentamente. Sin embargo, aislando este aparato con placas de plomo la pérdida de carga no se eliminaba totalmente. Más aún, la conductividad del aire aumentaba con la altura (cuando debería haber disminuido), como se comprobó mediante aparatos de medida en globos sonda (1910, 5200 m, y luego con posteriores mediciones a alturas superiores a 30 000 m sobre el nivel del mar). Ambos hechos eran señales inequívocas de la existencia de una radiación, de gran energía, que llegaba desde el espacio exterior y era absorbida por la atmósfera terrestre. La intensidad de estos *rayos cósmicos* disminuía desde la altura de la estratosfera hasta el interior de la Tierra. La radiación estaba constituida esencialmente por partículas cargadas eléctricamente, pues la intensidad aumentaba con la latitud geomagnética (en el Ecuador es un 14% más baja que en latitudes por encima de los 40°)—especialmente a grandes altitudes— debido al campo magnético terrestre (que curva las trayectorias). Asimismo, se dedujo que la mayoría de partículas estaban cargadas positivamente por ser mayor la radiación en la dirección Oeste que en la Este.

Los rayos cósmicos se clasifican en primarios y secundarios. Los primeros provienen directamente del espacio exterior, y al chocar con los núcleos de la atmósfera terrestre (oxígeno y nitrógeno) originan los segundos.

Datos obtenidos a partir de satélites artificiales indican que la composición aproximada de los rayos cósmicos primarios es:

Protones	77%
Partículas α	21%
Núcleos atómicos de masa intermedia o alta (níquel, oxígeno, magnesio, silicio, hierro, etc.)	2%

con una energía media del orden de 20×10^3 MeV. Una pequeña proporción de ellos (inferior al 10%) lleva energías muy elevadas (del orden de 10^{13} MeV). Es obvio, entonces,

que en su choque con la atmósfera terrestre serán capaces de producir una gran riqueza de fenómenos y una pléyade de partículas. Hasta la aparición de los primeros aceleradores en los años cincuenta, los rayos cósmicos secundarios fueron la fuente para el descubrimiento de nuevas partículas. Además de fotones de alta energía, de neutrones y de electrones, se encontraron positrones, muones, piones, partículas extrañas, etc.

En proyectos futuros, ligados a la Estación Espacial Internacional, se investigará la existencia de rayos cósmicos con energías superiores a 10^{20} eV.

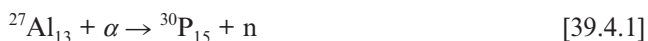
A continuación pasamos a comentar brevemente estas nuevas partículas.

39.4.1. Positrón (e^+). Antipartículas

El positrón fue descubierto por C. D. Anderson en 1932 al analizar las trazas, dejadas por los rayos cósmicos secundarios cargados, en cámaras de niebla (véase bibliografía), en las que se habían aplicado campos magnéticos externos. Las fotografías indicaban que algunas de las trazas correspondían a partículas del mismo poder ionizante que el electrón, pero se curvaban en sentido *opuesto* a las de éste. La partícula era el positrón (e^+), que tiene la misma masa (0.511 MeV) y espín ($1/2$) que el electrón, pero carga de signo opuesto (-1). La existencia del positrón había sido predicha por P. A. Dirac a partir de la ecuación relativista para el electrón (1927).

El positrón es la antipartícula del electrón. Dada una partícula, su correspondiente *antipartícula* tiene iguales masa y espín, pero sus cargas (además de la carga eléctrica existen otras, capítulos 41 y 42) son de signo opuesto. Un positrón y un electrón se *aniquilan* mutuamente dando lugar a uno (en presencia de un núcleo) o dos fotones (capítulo 2). El fenómeno inverso, *creación de pares*, se da también.

Encontramos, asimismo, emisión de positrones en los fenómenos de radiactividad artificial (I. Curie-Joliot y F. Joliot, 1934). Al bombardear aluminio (^{27}Al) con partículas α se produce un isótopo inestable del fósforo (^{30}P), emitiéndose un neutrón (n):



El fósforo, a su vez, se desintegra espontáneamente dando un silicio estable (^{30}Si) y un positrón:



39.4.2. Muones (μ^+ , μ^-)

Análogamente al caso anterior, C. D. Anderson y S. H. Neddenmeyer descubrieron dos nuevas partículas —los muones— al analizar las trazas dejadas por los rayos cósmicos en cámaras de burbujas (véase bibliografía). Tienen iguales masa ($m_\mu = 105.66$ MeV) y espín ($s_\mu = 1/2$), pero cargas de signo contrario. El μ^+ es la antipartícula del μ^- ; sus cargas eléctricas respectivas son $+1$ y -1 . Los muones interaccionan muy débilmente con los

núcleos atómicos y son capaces, por tanto, de recorrer libremente grandes distancias; por ello, la mitad de la radiación cósmica secundaria que alcanza la superficie terrestre está constituida por estas partículas. Desde el punto de vista de las interacciones (capítulo 40) el muon se comporta como un electrón pesado; las razones de su diferencia de masas no han sido aún suficientemente aclaradas.

39.4.3. Piones (π^+ , π^- , π^0)

En 1947, C. G. Lattes, H. Muirhead, G. Occhialini y C. F. Powell analizaron placas de emulsión nuclear (véase bibliografía) expuestas durante días a rayos cósmicos a gran altura en la atmósfera. Detectaron dos partículas cargadas, los piones π^+ y π^- (cargas eléctricas respectivas +1 y -1), de iguales masa ($m_{\pi^\pm} = 139.57$ MeV) y espín ($s_{\pi^\pm} = 0$). Una es la antipartícula de la otra, y viceversa. En 1948, Lattes y E. Gardner obtuvieron haces de piones cargados en el ciclotrón de Berkeley (Estados Unidos) bombardeando un blanco de carbono con partículas α .

Existe también un pion neutro, π^0 , de masa ligeramente inferior ($m_{\pi^0} = 134.97$ MeV) e igual valor del espín ($s_{\pi^0} = 0$). El π^0 es su propia antipartícula. Fue detectado indirectamente, a partir de su desintegración en dos fotones, por R. F. Björklund, W. E. Crandall, B. J. Hoyer y H. York, en 1950.

39.5. CLASIFICACIÓN DE PARTÍCULAS

Hasta ahora sólo hemos ido introduciendo nuevas partículas sin establecer relaciones entre ellas; es decir, hemos comenzado a escribir una lista. En la década de los años sesenta esta lista superaba ya las 200. Es obvio entonces que se necesita establecer una clasificación previa apoyándonos en sus propiedades más evidentes (al igual que los elementos químicos ordenados en la tabla periódica).

Los primeros criterios de clasificación son los siguientes:

- a) Espín entero o semientero.
- b) Tipo de interacciones en que intervienen.
- c) Estabilidad o inestabilidad de la partícula.

Desarrollando brevemente estos puntos, y poniendo como ejemplo las partículas hasta ahora consideradas, tendremos la siguiente definición.

39.5.1. Fermiones y bosones

Las partículas con espín entero se llaman bosones. Ejemplos: fotón ($s_\gamma = 1$); piones (π^\pm , π^0 ; $s_\pi = 0$).

Con espín semientero son los fermiones. Ejemplos: electrón (e^-), positrón (e^+), protón (p), neutrón (n) y muones (μ^+ , μ^-), todos ellos con $s = 1/2$.

Ambos tipos de partículas obedecen a estadísticas diferentes. *Bosones* y *fermiones* satisfacen las estadísticas de Bose-Einstein y Fermi-Dirac, respectivamente (capítulo 16).

39.5.2. Interacciones elementales

Las partículas pueden intervenir en interacciones fuertes (ejemplo: atracción de protones y neutrones en el núcleo), débiles (ejemplo: la desintegración beta del neutrón), y electromagnéticas (ejemplo: la atracción del electrón y el protón en el átomo de hidrógeno). A las energías actuales la interacción gravitatoria entre partículas es despreciable frente a las demás¹. Las interacciones serán estudiadas en el próximo capítulo.

39.5.3. Estabilidad e inestabilidad. Vida media

Algunas partículas (A) se desintegran (vía las tres interacciones elementales mencionadas anteriormente) en dos o más partículas de menor masa (a_i ; $i = 1, \dots, N$) (ejercicio 42.4):

$$A \rightarrow a_1 + a_2 + \dots + a_N \quad [39.5.1]$$

Una misma partícula A puede tener varios *modos* o *canales* de desintegración; es decir, diversos estados finales constituidos por conjuntos $\{a_i; i = 1, \dots, N\}$ diferentes de partículas. Se define entonces el ritmo de desintegración de una partícula (ζ) como la probabilidad de desintegración de dicha partícula por unidad de tiempo, considerando *todos* los canales posibles:

$$\zeta = k \sum_f \delta^{(4)}(P_f - P) |T_f|^2 \quad [39.5.2]$$

donde $|T_f|^2$ es la probabilidad de transición del estado inicial de la partícula A a un estado final determinado (f); $\delta^{(4)}(P_f - P)$ es la delta de Dirac de conservación del cuadrimomento total (apéndice D; P cuadrimomento de la partícula inicial A, P_f cuadrimomento total de las partículas que constituyen el estado final f); el sumatorio está extendido a todos los posibles estados finales, y k incluye todos los factores de normalización. Para hallar la probabilidad de transición es necesario conocer la *dinámica* de la interacción que interviene (es decir, el hamiltoniano de interacción); el cálculo se realiza habitualmente en el marco de la teoría de perturbaciones.

¹ Sin embargo, la interacción gravitatoria que sufre un neutrón lento en el campo de la Tierra es pequeña, pero detectable (véase apéndice F).

Se llama entonces *Vida media* (τ) de una partícula al inverso del ritmo de desintegración:

$$\tau = \zeta^{-1} \quad [39.5.3]$$

Es obvio que cuanto mayor sea la probabilidad de una partícula de desintegrarse, menos «vivirá». Entre las ya mencionadas, el electrón (e^-), el positrón (e^+) y el fotón (γ) *no* se desintegran; son, por tanto, *estables*. Algunas teorías predicen la desintegración del protón (p), pero aún no se ha encontrado una evidencia experimental satisfactoria; su vida media sería mayor que 10^{32} años. El neutrón (n) vive casi 15 minutos; la vida media de los piones π^\pm es 2.6×10^{-8} s; la del pion neutro π^0 , 8.4×10^{-17} s, y la de los muones μ^\pm , 2.2×10^{-6} s. Estas últimas partículas se incluyen, sin embargo, en la lista general de las partículas estables. Por otra parte, partículas como, por ejemplo, las Resonancias (epígrafe 40.3.1), que viven del orden de 10^{-23} s, son llamadas inestables (dada la brevedad del tiempo, sus propiedades son deducidas a partir de sus productos de desintegración).

La vida media será considerada nuevamente en el siguiente capítulo de interacciones fundamentales. En las tablas de partículas (1-7, pp. 971-974) se pueden leer las vidas medias de las principales partículas.

40

Interacciones entre partículas elementales

Marina Ramón Medrano

40.1. INTERACCIONES FUNDAMENTALES

En la Naturaleza existen cuatro interacciones fundamentales: electromagnética, fuerte, débil y gravitatoria. Ejemplos: la repulsión entre electrones, la atracción entre nucleones (protones y neutrones) en el núcleo, la desintegración beta, y la atracción entre dos partículas cualesquiera debido a sus masas, respectivamente. Como se ha visto a lo largo de este libro, la interacción electromagnética es la principal responsable de la existencia de átomos y moléculas, y la interacción fuerte lo es de la de los núcleos. A las energías presentes las intensidades de las cuatro interacciones son muy distintas. Por otra parte, cuanto más intensa sea una interacción *mayor* será la probabilidad de que ésta tenga lugar, y, en consecuencia, *menor* será la vida media de la partícula cuya vía de desintegración principal sea dicha interacción. La situación puede resumirse en la tabla 40.1.

TABLA 40.1
Interacciones fundamentales

Interacción	Intensidad	Vida media
Fuerte	$\alpha_F \sim 1 - 10$	$10^{-22} - 10^{-25}$ s
Electromagnética	$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} = \frac{1}{137.036} \sim 10^{-2}$	$10^{-16} - 10^{-20}$ s
Débil	$\frac{G_F cm_p^2}{\hbar^3} \sim 10^{-5}$	$10^{-6} - 10^{-12}$ s
Gravitatoria	$\frac{Gm_p^2}{\hbar c} \sim 10^{-38}$	

En ella, α es la constante de estructura fina de las interacciones electromagnéticas ya introducida en capítulos anteriores; G_F y G , las constantes llamadas de Fermi y de Newton, respectivamente, y ambas tienen dimensiones; m_p es la masa del protón, y α_F la constante

correspondiente a las interacciones fuertes. Obsérvese que para poder comparar estas interacciones entre sí se tienen que introducir expresiones *adimensionales*, en analogía con la constante de estructura fina α (por ello, para mayor claridad, hemos conservado \hbar y c sin hacer uso del sistema de unidades naturales). De la tabla anterior resulta obvio que, dada la pequeña intensidad de la interacción gravitatoria, en los fenómenos entre partículas elementales —y en el rango de las energías presentes— se considerarán sólo las tres primeras interacciones fundamentales (fuerte, débil y electromagnética). Sin embargo, como se sabe, la interacción gravitatoria es fundamental a escala cósmica, por las grandes masas puestas en juego y por ser una fuerza atractiva. Al final de este capítulo comentaremos brevemente el interés y la importancia de la interacción gravitatoria en una escala microscópica.

Como ejemplos ilustrativos de vía de desintegración elegida y vida media de una partícula podemos tomar a los piones cargados (π^\pm) y al pion neutro (π^0). Los piones cargados se desintegran vía interacción débil, preferentemente (casi un 100%) del modo siguiente:

$$\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu \quad [40.1.1]$$

$$\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu \quad [40.1.2]$$

donde μ^\pm son los muones cargados y ν_μ y $\bar{\nu}_\mu$ son dos partículas elementales llamadas neutrino y antineutrino muónico, respectivamente, de las que nos ocuparemos más adelante. La vida media de los μ^\pm es 2.6×10^{-8} s (véase tabla de partículas 3). En cambio, el π^0 se desintegra preferentemente (98.78%), vía interacción electromagnética, en dos fotones:

$$\pi^0 \rightarrow \gamma + \gamma \quad [40.1.3]$$

siendo su vida media igual a 8.4×10^{-17} s (véase tabla de partículas 3, p. 972).

40.2. INTERACCIÓN ELECTROMAGNÉTICA

Sabemos, por ejemplo, que dos electrones se repelen entre sí por tener cargas eléctricas (iguales en este caso) de igual signo. La interpretación *cuántica* de esta interacción es la siguiente: un electrón emite un fotón (γ , el cuanto de la radiación electromagnética) que se propaga y es absorbido por el otro electrón, y al revés. El fotón, por tanto, transporta energía y momento de un electrón a otro, y ambos se desviarán de su dirección inicial.

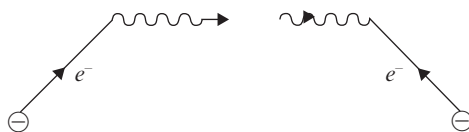


Figura 40.1. Interpretación cuántica de la interacción electromagnética entre dos electrones mediante el intercambio del fotón como cuanto mediador.

Esta interpretación es válida para *cualquier* partícula cargada eléctricamente; diremos, por tanto, que el fotón es el *mediador* de la interacción electromagnética. Como se considera que la masa del fotón es nula (cota superior experimental: 1×10^{-18} eV), el *alcance*

de la interacción es infinito. Una manera muy simplificada de ver esto es la siguiente: *supongamos* que dos partículas que se atraen están sometidas al potencial de Yukawa (epígrafes 6.10 y 36.4):

$$V(r) \sim -\frac{e^{-(mrc/\hbar)}}{r} \quad [40.2.1]$$

(si se repelen: $- \rightarrow +$), donde r es la distancia entre ellas y m es una constante con dimensiones de masa (el exponente es, naturalmente, adimensional). El alcance de la interacción vendrá dado entonces por:

$$\frac{mrc}{\hbar} \sim 1 \quad [40.2.2]$$

y en unidades naturales: $r \sim m^{-1}$. Si m es la masa del cuanto mediador, m^{-1} nos dará el alcance de dicha interacción. Para $m = 0$, el potencial es el coulombiano y el alcance infinito (capítulo 19).

40.3. INTERACCIONES FUERTES (RESONANCIAS; PARTÍCULAS EXTRAÑAS)

En capítulos anteriores (34-38) se ha visto que las interacciones fuertes eran responsables de la existencia de núcleos atómicos. También se vio que el alcance de las fuerzas nucleares era *corto*, del orden de fermis ($1 \text{ F} = 0.51 \times 10^{-2} (\text{MeV})^{-1}$). Si ahora hacemos la hipótesis que las interacciones fuertes son también mediadas por un cuanto —en completa analogía al caso anterior de las interacciones electromagnéticas—, la masa de dicho cuanto vendrá dada por (ecuaciones [40.2.4] y [40.2.5]):

$$m \sim 10^2 \text{ MeV} (= r^{-1}) \quad [40.3.1]$$

La anterior hipótesis fue debida a H. Yukawa (1935). En principio, se pensó en los muones (μ^\pm) como partícula mediadora, pero pronto se descubrió que no intervenían en interacciones fuertes; el posterior descubrimiento de los piones (π^\pm, π^0), y el hecho de que éstos *sí* intervenían en interacciones fuertes, condujeron a identificarlos como cuantos mediadores de las interacciones fuertes. En una figura análoga a la 40.1 tenemos, para dos nucleones (protón o neutrón):

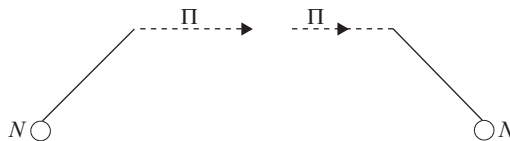


Figura 40.2. Interpretación cuántica de la interacción fuerte entre dos nucleones (protón o neutrón) mediante el intercambio de un pión.

Sin embargo, la identificación del pion como cuanto mediador de las interacciones fuertes sólo es válida a bajas energías (MeV). A energías altas (GeV) distinguiríamos tanto en el protón como en el neutrón tres constituyentes puntuales y en los piones dos. Estos objetos elementales son los *quarks* (capítulo 42). La interacción fuerte ha de darse, por tanto, directamente *entre quarks*. El cuanto mediador entre dos quarks es entonces el *gluon* (capítulo 42), cuya evidencia experimental, a diferencia del fotón, es indirecta.

40.3.1. Resonancias

Consideremos las interacciones *fuertes* pion-nucleón (πN). Por ejemplo, la dispersión de piones π^+ incidiendo sobre protones. Para esta colisión, los datos experimentales muestran que, a una energía total en el centro de masas (apéndice D) de unos 1232 MeV, la sección eficaz total (probabilidad de transición —del estado inicial a todos los estados finales accesibles— por unidad de tiempo y de flujo incidente; epígrafes 18.1 y 34.2) tiene un *máximo*; dicho máximo es estrecho, siendo su *anchura* de unos 115 MeV. La interpretación es la siguiente: durante un brevísimo intervalo de tiempo, del orden de 10^{-23} s (ejercicio 42.2) el π^+ y el p han formado un estado *ligado* al que llamaremos Δ^{++} (Δ : delta; + +, por tener 2 cargas eléctricas positivas). Este estado se desintegra (vía interacción fuerte) dando nuevamente el pion y el protón constituyentes. Dado que la partícula Δ^{++} tiene una vida media tan corta ($\sim 10^{-23}$ s), sus propiedades se deducirán a partir de las de sus partículas constituyentes ($m_{\Delta^{++}} = 1232$ MeV; $q_{\Delta^{++}} = 2$; $s_{\Delta^{++}} = 3/2$). Este tipo de partículas, que se producen y se desintegran vía interacción fuerte, se conocen con el nombre de *Resonancias*. También en la interacción de dos piones ($\pi\pi$) se producen resonancias. El número de resonancias es muy grande (véanse tablas de partículas 4 y 5, en donde se incluyen algunas de las más ligeras).

40.3.2. Partículas extrañas

En 1947, G. D. Rochester y C. C. Butler detectaron en los rayos cósmicos, y en colisiones pion-nucleón (πN) y nucleón-nucleón (NN), unas partículas —más pesadas que las conocidas hasta entonces— que se producían por parejas (*producción asociada*), y que, a pesar de producirse vía interacción fuerte, tenían vidas medias largas ($10^{-10} - 10^{-8}$ s). Por todo ello fueron llamadas «extrañas». Sin embargo, veremos que dicho adjetivo tiene un significado más profundo que el puramente anecdótico.

Las partículas extrañas más ligeras son: los kaones (K^+ , K^- , K^0), la lambda (Λ^0), las sigmas (Σ^+ , Σ^- , Σ^0) y las Xi (Ξ^- , Ξ^0) (tabla 41.2 y tablas de partículas 2 y 3, pp. 971, 972). Algunos ejemplos de producción asociada son los siguientes:



Si ahora *asignamos* a Λ^0 , K^0 , Σ^- y K^+ un nuevo número cuántico llamado *Extrañeza* (S), que sea *aditivo* como la carga eléctrica e igual a -1 , $+1$, -1 y $+1$, respectivamente (mientras para piones y nucleones $S = 0$), tendremos que los anteriores procesos conservan la extrañeza (epígrafe 41.5.3), siendo ésta la causa de la curiosa producción asociada. Por otra parte, las partículas extrañas se desintegran vía débil, de ahí la razón de su larga vida media.

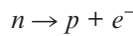
40.4. INTERACCIONES DÉBILES: PARTÍCULAS W^\pm , Z^0

El neutrón (n) no es estrictamente estable (como el e^-), sino que se desintegra según el proceso ($\sim 100\%$):



(desintegración β , capítulo 37) donde $\bar{\nu}_e$ es una partícula elemental llamada antineutrino electrónico. El neutrón tiene, sin embargo, una vida media larga, $\tau = 880.1 \pm 1.1$ s; por tanto, la vía de desintegración no puede ser ni fuerte ni electromagnética. El proceso [40.4.8] es un ejemplo de una tercera fuerza elemental que se conoce con el nombre de interacción *débil*, que ya ha sido mencionada.

Así como el protón interviene en las tres interacciones fundamentales (fuerte, electromagnética y débil) y el neutrón y el electrón en dos de ellas (fuerte y débil, y electromagnética y débil, respectivamente), el antineutrino $\bar{\nu}_e$ (al igual que su antipartícula, el neutrino ν_e) *sólo* lo hace en interacciones débiles (de ahí la dificultad de su detección; un (anti) neutrino puede atravesar la Tierra sin haber sufrido interacción alguna). Por ello, se pensó, en principio, que el proceso [40.4.8] era simplemente:



(p y e^- , como partículas cargadas, eran fácilmente detectables). Pero el hecho de que el momento del electrón tuviese valores distintos, variando de forma continua, estaba en flagrante contradicción con las leyes de conservación de la energía y el momento (epígrafe 41.2.1) (véase ejercicio 42.6). Algunos físicos aceptaron la violación de la conservación de la energía, pero W. Pauli (1930) prefirió proponer la existencia de una nueva partícula (no cargada eléctricamente) y así dar cuenta del espectro continuo de momentos del e^- , preservando al mismo tiempo la conservación de energía (y del momento). En 1953, C. L. Cowan y F. Reines detectaron *indirectamente* la existencia de antineutrinos, provenientes de la desintegración β del neutrón, mediante la siguiente serie de reacciones sucesivas (que se producían en el seno de un recinto que contenía agua y cloruro de cadmio (CdCl_2)):



donde ${}^{113}\text{Cd}$ y ${}^{114}\text{Cd}$ son dos isótopos del cadmio. Los *tres* fotones finales fueron detectados.

El ν_e y el $\bar{\nu}_e$ son partículas neutras ($q = 0$) de masa prácticamente nula (se cree del orden de 10^{-2} eV), estables (no se desintegran) y espín igual a $1/2$ (en unidades de \hbar). Definiendo la *helicidad* (epígrafe 37.7) como la proyección del espín sobre la dirección de movimiento ($\lambda = \mathbf{s} \times \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$; \mathbf{s} y \mathbf{p} , espín y momento de la partícula), los experimentos asignan, hasta ahora, *helicidad positiva* ($\lambda = 1/2$) y *negativa* ($\lambda = -1/2$) a los llamados antineutrino ($\bar{\nu}_e$) y neutrino (ν_e), respectivamente. En este punto es interesante recordar que el electrón (e^-), de espín $1/2$ y de masa 0.51 MeV, tiene las *dos* helicidades ($\lambda = 1/2$, $\lambda = -1/2$), pero los llamados ν_e y $\bar{\nu}_e$ serían partículas distintas (intervienen en diferentes reacciones). Las interacciones débiles violan *Paridad* (epígrafe 41.7), y conservarían los números leptónicos (epígrafe 41.5.2, y apéndice Q).

Se ha dicho ya que las partículas que consideramos prácticamente como *estables* son aquellas que se desintegran vía interacción electromagnética y débil. Entre las que se desintegran vía esta última, tenemos los π^\pm , los μ^\pm y las partículas extrañas.

40.4.1. Piones cargados (π^\pm)

Véanse ecuaciones [40.1.1] y [40.1.2].

40.4.2. Muones (μ^\pm)

Los procesos de desintegración son ($\sim 100\%$):



El neutrino (ν_μ) y antineutrino ($\bar{\nu}_\mu$) muónicos son distintos a los correspondientes electrónicos. Son partículas neutras ($q = 0$) que, al igual que estos últimos, *sólo* intervienen en interacciones débiles; su espín es igual a $1/2$ y su masa se cree pequeña, pero superior al (anti)neutrino electrónico. También la *helicidad* del ν_μ es negativa, y la del $\bar{\nu}_\mu$ positiva ($\lambda = -1/2$, $1/2$, respectivamente).

40.4.3. Partículas extrañas

Algunos de los principales modos de desintegración para algunas de las partículas extrañas son los siguientes:



¹ Tanto por ciento que corresponde a este modo de desintegración.

(K^+ , μ^+ , $\bar{\nu}_\mu$ son las antipartículas de K^- , μ^- , ν_μ , respectivamente, y viceversa).

$$\begin{aligned} \Lambda^0 &\rightarrow p + \pi^- (64.1 \pm 0,5)\% \\ \Sigma^- &\rightarrow n + \pi^- (\sim 100)\% \\ \Xi^0 &\rightarrow \Lambda^0 + \pi^0 (\sim 100)\% \\ \Xi^- &\rightarrow \Lambda^0 + \pi^- (\sim 100)\% \end{aligned} \quad [40.4.5]$$

40.4.4. Mediadores de las interacciones débiles W^\pm , Z^0

En analogía con las interacciones electromagnéticas se propuso que las interacciones débiles fuesen mediadas también por cuantos (S. Glasgow, S. Weinberg y A. Salam, 1962-1968). En 1983, se hicieron colisionar haces de protones (p) y antiprotones (\bar{p}) —con una energía de 270 GeV cada uno— en el S.P.S. (superproton synchrotron, apéndice N) del C.E.R.N. (Ginebra). Allí se detectaron los cuantos mediadores de las interacciones débiles: los bosones cargados W^+ , W^- ($q = +1, -1$, respectivamente) y el bosón neutro Z^0 ($q = 0$). El espín de las tres partículas es igual a 1, y sus masas son: $m_{W^\pm} = 80.385 \pm 0.015$ GeV y $m_{Z^0} = 91.1876 \pm 0.0021$ GeV (1 GeV = 10^3 MeV). Como vemos, tienen unas masas muy grandes y, por tanto, el alcance de las interacciones débiles será corto (en efecto, es inferior a 10^{-17} m, cota cien veces menor que el alcance de las interacciones fuertes).

40.5. HADRONES (BARIONES Y MESONES) Y LEPTONES

Las partículas que intervienen en interacciones fuertes se llaman *hadrones* («hadros»: fuerte). Pueden ser fermiones o bosones: en el primer caso se llamarán *bariones*, y en el segundo *mesones*. Los hadrones *no* son partículas elementales, sino que están constituidas por otros objetos elementales (quarks, capítulo 42). Ejemplos de bariones son: n , p , Λ^0 , Σ^+ , Σ^0 , Σ^- , Ξ^0 y Ξ^- . Ejemplos de mesones: π^+ , π^- , π^0 , K^+ , K^- , K^0 y \bar{K}^0 (véanse las tablas de partículas 2 y 3, pp. 971, 972). Los hadrones, como ya se ha visto, pueden intervenir también en interacciones débiles y electromagnéticas.

Las partículas que no intervienen en interacciones fuertes se llaman *leptones* («leptos»: ligero). Pueden intervenir en interacciones electromagnéticas y débiles, como el e^- , e^+ , μ^- y μ^+ , o sólo en débiles, como ν_e , $\bar{\nu}_e$, ν_μ y $\bar{\nu}_\mu$.

De acuerdo con estos nombres, podemos decir, por ejemplo, que la ecuación [40.4.3] es una desintegración débil puramente leptónica, [40.4.4] semileptónica (intervienen los hadrones K^\pm) y [40.4.5] no leptónica.

Hadrones y leptones constituyen la *materia* que interviene en las interacciones fundamentales. Los *cuantos* que median las interacciones electromagnéticas (EM), fuertes (F) y débiles (D) son, respectivamente, el fotón (EM), los gluones (F) y los bosones W^+ , W^- y Z^0 .

40.6. INTERACCIÓN GRAVITATORIA

Si la constante de Newton G es la constante de la interacción gravitatoria, la energía y la longitud características de dicha interacción vendrán dadas por:

$$M_p = \left(\frac{\hbar c}{G}\right)^{1/2} \cong 1.2 \times 10^{19} \frac{\text{GeV}}{c^2} \quad [40.6.1]$$

$$L_p = \left(\frac{\hbar G}{c^3}\right)^{1/2} \cong 1.6 \times 10^{-33} \text{ cm}$$

A M_p y L_p se les conoce como la masa y la longitud de Planck, respectivamente. Como vemos, estas energías y estas distancias no son alcanzables en nuestros experimentos actuales (ni en los futuros); sin embargo, se conjetura que al cabo de 10^{-43} s después del Big-Bang energías y distancias serían de este orden (es decir, L_p sería del orden del diámetro del Universo), de aquí el nexo entre la cosmología y el mundo microscópico.

Al igual que las interacciones fundamentales ya consideradas, la gravitación sería mediada por un cuanto llamado gravitón (del que no hay evidencia). El gravitón sería una partícula elemental de espín igual a 2 y masa nula (las interacciones gravitatorias son de alcance infinito).

41

Leyes de conservación

Marina Ramón Medrano

41.1. SIMETRÍAS Y LEYES DE CONSERVACIÓN: ABSOLUTAS Y RELATIVAS

En capítulos anteriores se ha visto que el momento angular orbital (ℓ) se conservaba para un átomo de hidrógeno no relativista, sin considerar el espín; la conservación de ℓ era la consecuencia de la simetría esférica del sistema. Este ejemplo particular ilustra, sin embargo, un hecho general: si un sistema posee una simetría —es decir, es invariante bajo cierto tipo de transformaciones (rotaciones en el ejemplo anterior)—, existirá entonces una magnitud o propiedad conservada.

Consideremos ahora un proceso de dispersión general entre partículas. Y supongamos que n partículas (estado inicial; a_i ; $i = 1, \dots, n$) interactúan produciendo m partículas (estado final; b_i ; $i = 1, \dots, m$):

$$a_1 + a_2 + \dots + a_n \rightarrow b_1 + b_2 + \dots + b_m \quad [41.1.1]$$

Si el tipo de interacción es tal que conserva una determinada magnitud, el valor de ésta para el estado *inicial* será el *mismo* que para el estado final.

Por ejemplo, tomemos la conservación de la carga eléctrica (q). Esto significa que la carga del estado inicial (*suma* de las cargas iniciales) ha de ser igual a la del estado final (*suma* de las cargas finales):

$$q_{a_1} + q_{a_2} + \dots + q_{a_n} = q_{b_1} + q_{b_2} + \dots + q_{b_m} \quad [41.1.2]$$

La carga eléctrica es conservada por *todas* las interacciones. Se trata, por tanto, de una *ley absoluta*. Sin embargo, existen otras cargas, como, por ejemplo, la extrañeza (S), que *no* son conservadas por interacciones débiles; S da lugar, entonces, a una *ley* de conservación *relativa*. Antes de analizarlas una a una pasaremos a enumerar las de ambas clases.

Las leyes de conservación absoluta (al menos dentro de los límites experimentales) son: (1) la de energía-momento; (2) momento angular total, y (3) carga eléctrica. Las de conservación relativa son: (1) isospín (I); (2) números bariónico (B), y leptónico (L), Extrañeza (S) (y «encanto», «belleza», «verdad», capítulo 42), y las invariancias bajo; (3) inversión espacial (P: *paridad*); (4) conjugación de carga (C); (5) conjugación de carga e inversión espacial (CP), y (6) inversión temporal (T). La invariancia de un proceso bajo

conjugación de carga, inversión espacial e inversión temporal (CPT; es decir, la combinación de las *tres*) se considera, aún hoy, una ley absoluta.

La importancia de las leyes de conservación es muy grande, pues, dado un conjunto inicial de partículas (a_i), nos permite predecir propiedades generales de los posibles estados finales (b_j), obtenidos tras la interacción de las a_i . En la práctica las únicas reacciones viables —hasta ahora— son aquellas que tienen sólo dos partículas en el estado inicial. Al final del capítulo se dará un cuadro resumen (41.3) en el que se relacionan las interacciones fundamentales con simetrías y magnitudes preservadas.

41.2. LEYES DE CONSERVACIÓN ESPACIO-TEMPORALES

Se trata de dos leyes de conservación absoluta:

- a) La de energía y momento.
- b) La de momento angular total.

41.2.1. Energía y momento

Consideremos nuevamente el proceso general [41.1.1]. Y sean E_1, E_2, \dots, E_n y p_1, p_2, \dots, p_n las energías y los momentos de las partículas iniciales (a_i ; $i = 1, \dots, n$); análogamente, para las finales tendremos E'_1, E'_2, \dots, E'_n y p'_1, p'_2, \dots, p'_n .

Entonces, para *toda* interacción se ha de verificar:

1. Conservación de la energía *total*

$$E_{a_1} + E_{a_2} + \dots + E_{a_n} = E_{b_1} + E_{b_2} + \dots + E_{b_n} \quad [41.2.1]$$

$$(E_{\text{inicial}} = E_{\text{final}})$$

2. Conservación del momento *total*

$$p_{a_1} + p_{a_2} + \dots + p_{a_n} = p_{b_1} + p_{b_2} + \dots + p_{b_n} \quad [41.2.2]$$

$$(p_{\text{inicial}} = p_{\text{final}})$$

La ecuación [41.2.2] expresa en realidad *tres* ecuaciones, una por cada componente del momento.

Aunque con *distintos* momentos y energías, las partículas del estado final pueden ser las *mismas* que las del inicial ($a_i \equiv b_j$; $m = n$); en este caso se dice que el proceso o reacción es *elástico*. En caso contrario, se llamaría *inelástico*.

Se puede probar que la conservación de la energía y del momento son consecuencia de la invariancia bajo traslaciones en el espacio-tiempo (tres dimensiones espaciales y una temporal).

41.2.2. Momento angular total

Esta ley dice que el momento angular total inicial (J_i) ha de ser igual al final (J_f), es decir, para [41.1.1]:

$$\mathbf{J}_{a_1} + \mathbf{J}_{a_2} + \cdots + \mathbf{J}_{a_n} = \mathbf{J}_{b_1} + \mathbf{J}_{b_2} + \cdots + \mathbf{J}_{b_n} \quad [41.2.3]$$

($\mathbf{J}_{\text{inicial}} = \mathbf{J}_{\text{final}}$)

donde $\mathbf{J} = \boldsymbol{\ell} + \mathbf{s}$ ($\boldsymbol{\ell}$ es el momento angular orbital y \mathbf{s} es el momento angular intrínseco o espín). La ecuación [41.2.3] expresa también *tres* ecuaciones, una por cada componente del operador momento angular total.

Se puede probar que la conservación del momento angular total del proceso es consecuencia de la invariancia de éste bajo rotaciones en el espacio tridimensional.

41.3. CONSERVACIÓN DE LA CARGA ELÉCTRICA

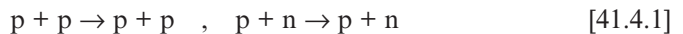
Es la tercera de las leyes absolutas de conservación, y, como hemos visto ya en la sección 41.1, nos dice que la carga eléctrica inicial ha de ser igual a la final.

Cualquier proceso físico ha de verificar las tres leyes de conservación anteriores (además de la invariancia bajo CPT, como veremos más adelante).

41.4. ISOSPÍN

En los capítulos precedentes de Física Nuclear se ha visto que —una vez descontadas las interacciones electromagnéticas y débiles— las interacciones fuertes no distinguían entre protones (p) y neutrones (n). Considerando, pues, *sólo* las fuerzas nucleares, se comprobaba experimentalmente que:

- a) Los procesos a baja energía ($E < 300$ MeV)



tenían las mismas secciones eficaces (consecuencia de la propiedad conocida como «independencia de carga» de las fuerzas nucleares).

- b) La energía del estado fundamental de los «núcleos espejo» (el número de protones de uno es igual al de neutrones del otro) era la misma. Ejemplos: ${}^7\text{Li}_3$ (litio) y ${}^7\text{Be}_4$ (berilio); ${}^{11}\text{B}_5$ (boro) y ${}^{11}\text{C}_6$ (carbono) (consecuencia de la «simetría de carga»).

Todo ello indujo a W. Heisenberg a proponer, en 1932, que el protón y el neutrón —en lo que se refiere sólo a interacciones fuertes— eran dos estados distintos de una *misma*

partícula, a la que llamó nucleón (N). En analogía con el electrón (que es *una* partícula, pero tiene *dos* estados de espín: $s = 1/2, s_3 = 1/2; s = 1/2, s_3 = -1/2$), el nucleón (N) poseería una propiedad intrínseca —*formalmente* parecida al espín— denominada isospín ($I = (I_1, I_2, I_3)$). El protón sería el estado de isospín: $I = 1/2, I_3 = 1/2$, y el neutrón el correspondiente a $I = 1/2, I_3 = -1/2$. Decimos entonces que la pareja (p,n) forma un *doblete* de isospín.

Al igual que para el espín podemos representar las tres componentes del (operador) isospín —para $I = 1/2$ — por matrices 2×2 :

$$I = \frac{\tau}{2} \quad [41.4.2]$$

donde $\tau = (\tau_1, \tau_2, \tau_3)$ son las tres matrices de Pauli:

$$\tau_1 \equiv \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \tau_2 \equiv \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \tau_3 \equiv \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad [41.4.3]$$

y los estados del protón ($|p\rangle$) y del neutrón ($|n\rangle$) —sobre los que I actúa— vendrían dados por los bi-espinores siguientes:

$$|p\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad [41.4.4]$$

Análogamente, sucederá con todas las partículas que intervienen en interacciones fuertes. Por ejemplo, los piones serían tres estados de isospín ($I = 1$) de una misma partícula, constituyendo un *tripleto*. Tendríamos la asignación siguiente:

$$\begin{aligned} \pi^+ : I = 1, \quad I_3 = 1 \\ \pi^0 : I = 1, \quad I_3 = 0 \\ \pi^- : I = 1, \quad I_3 = -1 \end{aligned} \quad [41.4.5]$$

Y, así, también para las partículas extrañas, donde tendremos: Λ^0 (singleto: $I = 0, I_3 = 0$); (K^+, K^0), (\bar{K}^0, K^-) y (Ξ^0, Ξ^-) dobletes ($I = 1/2$), y ($\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-$) tripleto ($I = 1$).

Mientras que (I_1, I_2, I_3) son conservadas por las interacciones fuertes, sólo I_3 es conservada por las interacciones electromagnéticas. Las interacciones débiles *no* conservan el isospín.

La introducción de isospín permite relacionar secciones eficaces de procesos fuertes (ejercicio 42.20).

41.5. NÚMEROS CUÁNTICOS INTERNOS ADITIVOS

Las partículas poseen otras propiedades internas (independientes del espacio-tiempo en que se mueven) que son conservadas por algunas interacciones, y a las que se asocia, por tanto, un número cuántico. Vamos a considerar los siguientes: números bariónicos (B) y leptónicos (L_e , L_μ , L_τ); extrañeza (S); «encanto» (C); «belleza» (B), y «verdad» (T). Todos son *aditivos*; es decir —al igual que ocurría con la carga eléctrica—, dado un conjunto de partículas, el número cuántico total que se les asocia es *igual* a la suma de los individuales. Para cualquiera de los números cuánticos anteriores, los valores asignados a una partícula y su correspondiente antipartícula son iguales en valor absoluto, pero de *signo contrario*.

La conservación de un número cuántico en el proceso [41.1.1] implicará que su valor en el estado inicial y final es el *mismo*.

41.5.1. Número (o carga) barónico (B)

El nombre viene de «baryos» (pesado) y es un número que se asigna a los hadrones. Consideremos los siguientes procesos:

1. Una colisión protón-protón a energía alta (por ejemplo: el protón-blanco —perteneciente a un átomo de hidrógeno— prácticamente en reposo, y el protón-proyectil incidiendo con una energía de unos 6 GeV):



Este proceso se utiliza para la producción de antiprotones (\bar{p}) (\Rightarrow indica interacción fuerte).

2. Producciones de π^+ y π^- :



(se envía un haz de protones, con energía cinética de unos 500 MeV, sobre un blanco de berilio o grafito).

3. $p + p \Rightarrow$ Varios piones [41.5.4]

Este último proceso no ha sido jamás observado (aunque no violase las leyes de conservación vistas hasta ahora); en cambio, sí lo han sido los anteriores. Esto nos indica que ha de existir una propiedad cuya conservación, necesaria, es satisfecha por las reacciones físicamente viables. Introducimos, por tanto, un nuevo número cuántico intrínseco y adi-

tivo llamado número bariónico (B). Asignemos a las anteriores partículas los valores siguientes:

$$\begin{aligned} B(p) &= 1 & B(\bar{p}) &= -1 \\ B(\pi^+) &= 0 & B(\pi^-) &= 0 \\ B(n) &= 1 \end{aligned} \quad [41.5.5]$$

(Obsérvese que B para p y \bar{p} tiene valores opuestos.) Según ello, para los distintos procesos, los correspondientes valores del número bariónico inicial y final son:

$$\begin{aligned} 1. \quad B_{\text{inicial}} &= 2 B(p) = 2 \\ B_{\text{final}} &= 3 B(p) + B(\bar{p}) = 2 \end{aligned} \quad [41.5.6]$$

$$\begin{aligned} 2. \quad B_{\text{inicial}} &= 2 B(p) = 2 \\ B_{\text{final}} &= B(p) + B(n) + B(\pi^+) = 2 \end{aligned} \quad [41.5.7]$$

$$\begin{aligned} B_{\text{inicial}} &= B(p) + B(n) = 2 \\ B_{\text{final}} &= 2 B(p) + B(\pi^-) = 2 \end{aligned} \quad [41.5.8]$$

$$\begin{aligned} 3. \quad B_{\text{inicial}} &= 2 B(p) = 2 \\ B_{\text{final}} &= 0 \end{aligned} \quad [41.5.9]$$

Luego vemos que el único proceso que no conserva B es precisamente el que no se daba experimentalmente.

Es interesante señalar que el n —cuya carga eléctrica es nula— *no* coincide con su antipartícula —cuya carga eléctrica sería también nula—, pues el antineutrón (\bar{n}) tendrá un número bariónico de signo opuesto: $B(\bar{n}) = -1$. Como vemos, protones y neutrones (ambos fermiones) tienen B igual a 1, y los piones (bosones) B igual a cero. Llamaremos a los primeros (p, n) *bariones*, y a los segundos *mesones* (tablas de partículas 2 y 3) (a los leptones se les asignaría $B = 0$).

Hasta 1974 se creyó que B era conservado por todas las interacciones. Pero aparecieron ciertas teorías (véase bibliografía) que predecían la desintegración del protón. Por ejemplo, podía, quizá, darse:

$$p \rightarrow K^0 + e^+ \quad [41.5.10]$$

Este proceso *no* conserva B, pues el número bariónico inicial es igual a 1 y el final igual a 0 (K^0 es un mesón y e^+ un leptón, luego $B(K^0) = B(e^+) = 0$). Hasta ahora, sin embargo —y a pesar de costosos experimentos—, no hay evidencia totalmente clara de la inestabilidad del protón. Los resultados experimentales obtenidos apuntan a que la vida

media del protón sería del orden de 10^{32} años. Esto *no* quiere decir que tengamos que esperar este tiempo para observar la desintegración de un protón (¡la edad del Universo es aproximadamente 13.8×10^9 años!), sino que para detectar un suceso en un año necesitaríamos contar con, al menos, 10^{32} protones. Es curioso señalar que la inestabilidad del protón no sería demasiado dramática: por ejemplo, la Tierra perdería tan sólo unos miligramos de materia al año por este mecanismo.

41.5.2. Números (o cargas) leptónicos (L_e , L_μ , L_τ)

Consideremos la desintegración vía interacción débil de los muones:

$$\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu \quad [41.5.11]$$

$$\mu^+ \rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu \quad [41.5.12]$$

Es obvio que en el estado final de [41.5.11] no podemos sustituir e^- por e^+ , pues la carga eléctrica no se conservaría. Pero, ¿por qué se producen en el proceso [41.5.11] $\bar{\nu}_e$ y ν_μ , y no ν_e y $\bar{\nu}_\mu$ (y viceversa para [41.5.12])? Recordemos que ν_e , ν_μ y $\bar{\nu}_e$, $\bar{\nu}_\mu$ (las correspondientes antipartículas) son partículas elementales aparentemente *distintas* entre sí. Con un razonamiento análogo al que conducía a la existencia del número bariónico, diremos que la inviabilidad física de estados finales distintos de [41.5.11] y [41.5.12] es debida a la existencia de números cuánticos internos —aditivos también— que podemos asociar a los leptones. Considerando sólo los leptones de los procesos anteriores, introduciremos *dos* números leptónicos diferentes: a) L_e : número *electrónico*, y b) L_μ : número muónico. Las asignaciones quedan resumidas en la tabla 41.1.

En la tabla se muestra qué partículas y antipartículas tienen números cuánticos opuestos. La cuarta columna en el cuadro es el número *tautónico*, que surgió tras el descubrimiento del leptón pesado ($m_\tau = 1777$ MeV) llamado *tau* (τ). De él y de su correspondiente neutrino hablaremos en el capítulo siguiente.

Mediante la tabla 41.1 es muy sencillo ver ahora que no sólo los números leptónicos se conservan en los procesos [41.5.11] y [41.5.12], sino que lo hacen independientemente.

TABLA 41.1
Números leptónicos de electrones, muones
y sus correspondientes neutrinos

Partículas	L_e	L_μ	L_τ
e^-, ν_e	1	0	0
$e^+, \bar{\nu}_e$	-1	0	0
μ^-, ν_μ	0	1	0
$\mu^+, \bar{\nu}_\mu$	0	-1	0

Discutiremos más adelante la conservación de los números leptónicos en el contexto de la oscilación de neutrinos (apéndice Q).

Volviendo a la ecuación [41.5.10] de la desintegración del protón, vemos que en este proceso no se conserva *ni* el número bariónico *ni* el leptónico (el electrónico concretamente). En efecto, los valores iniciales y finales son:

$$\begin{aligned} B_{\text{inicial}} = B(p) = 1 & \quad B_{\text{final}} = 0 \\ L_{e\text{ inicial}} = 0 & \quad L_{e\text{ final}} = L_e(e^+) = -1 \end{aligned}$$

y, sin embargo, se cumpliría:

$$\Delta B = \Delta L_e \tag{41.5.13}$$

donde $\Delta B = B_{\text{final}} - B_{\text{inicial}}$ y $\Delta L_e = L_{e\text{ final}} - L_{e\text{ inicial}}$. La desintegración del protón aún no ha sido corroborada experimentalmente. Es interesante señalar que un mecanismo causante de la no conservación de los números bariónico y leptónico podría explicar el hecho de que en nuestro Universo haya más materia que antimateria; de aquí también que las teorías de partículas elementales puedan tener implicaciones cosmológicas.

41.5.3. Extrañeza (S)

La extrañeza (S) fue ya considerada al hablar de la producción asociada de partículas extrañas en el apartado 40.4.3. Por ejemplo, tomando el proceso siguiente:



y con las asignaciones $S(\Lambda^0) = -1$, $S(K^0) = +1$ y $S(\pi^-) = S(p) = 0$, tendríamos:

$$S_{\text{inicial}} = 0 \quad S_{\text{final}} = S(\Lambda^0) + S(K^0) = 0$$

Las interacciones fuertes y electromagnéticas conservan la extrañeza, no así las interacciones débiles. En la tabla 41.2 se da el valor de S para los hadrones extraños más ligeros.

TABLA 41.2
Partículas extrañas

Mesones extraños	S	Bariones extraños	S
K^+, K^0	1	$\Lambda^0, \Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-$	-1
K^-, \bar{K}^0	-1	Ξ^0, Ξ^-	-2
		Ω^-	-3

En el cuadro de los mesones hemos incluido partículas (K^+ , K^0) y sus correspondientes antipartículas (K^- , \bar{K}^0). En el de los bariones sólo se han escrito las partículas. Una partícula y su correspondiente antipartícula tienen extrañezas de signo contrario.

41.5.4. «Encanto» (C), «belleza» (B) y «verdad» (T)

Estas tres propiedades hadrónicas —de sorprendentes nombres— son análogas a la extrañeza (se habla de hadrones «encantados» como antes se hacía de «extraños»). Son nuevos números cuánticos internos —y aditivos— que se asocian a los objetos elementales (quarks) que forman los hadrones, y de los que hablaremos más extensamente en el capítulo siguiente. Al igual que con la extrañeza, C, B y T no son conservados por las interacciones débiles, pero sí por fuertes y electromagnéticas.

La «extrañeza» (S), el «encanto» (C), la «belleza» (B) y la «verdad» (T) son también consideradas como cargas.

41.6. RELACIÓN DE GELL-MANN Y NISHIJIMA

M. Gell-Mann y K. Nishijima propusieron (1953) la fórmula:

$$Q = I_3 + \frac{B + S}{2} \quad [41.6.1]$$

(Q : carga eléctrica; I_3 : tercera componente de isospín; B: número bariónico, y S: extrañeza), que es válida para *todos los hadrones*. Por ejemplo, para el protón:

$$I_3 = \frac{1}{2} \quad , \quad B = 1 \quad , \quad S = 0 \rightarrow Q = 1$$

La suma de B y S se llama hipercarga (Y).

De la ecuación [41.6.1] se puede deducir también que la tercera componente de isospín (I_3) es conservada por las interacciones electromagnéticas (I_1 , I_2 no lo son), pues Q , B y S lo son.

La relación [41.6.1] puede generalizarse añadiendo el «encanto», la «belleza» y la «verdad» de la forma:

$$Q = I_3 + \frac{B + S + C + B + T}{2} \quad [41.6.2]$$

41.7. INVERSIÓN ESPACIAL (P: PARIDAD)

La paridad (P) o inversión espacial es una operación que pasa de \mathbf{r} a $-\mathbf{r}$, donde \mathbf{r} es el vector de posición de cada una de las partículas¹ (figura 41.1).

Con ayuda de la figura 41.1 se puede ver que la operación de paridad (P) puede descomponerse en una *reflexión especular* (P_e) y una *rotación* (R) de 180° ; el espejo será el plano XZ , e Y el eje de rotación. Formalmente, se escribe:

$$P = P_e^{XZ} \cdot R_{180^\circ}^Y \quad [41.7.1]$$

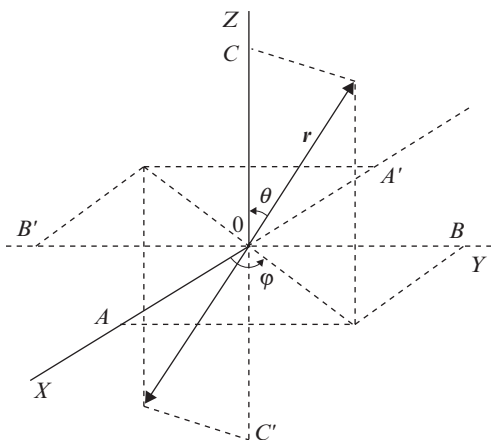


Figura 41.1. Operación de inversión espacial (paridad).

En efecto, la acción sucesiva de $R_{180^\circ}^Y$ y P_e^{XZ} sobre las coordenadas de $\mathbf{r} = (OA, OB, OC)$ es:

$$\begin{aligned} \overline{OA} &\xrightarrow{R_{180^\circ}^Y} \overline{OA'} = -\overline{OA} & \xrightarrow{P_e^{XZ}} -\overline{OA} \\ \overline{OB} &\xrightarrow{R_{180^\circ}^Y} \overline{OB} & \xrightarrow{P_e^{XZ}} \overline{OB'} = -\overline{OB} \\ \overline{OC} &\xrightarrow{R_{180^\circ}^Y} \overline{OC'} = -\overline{OC} & \xrightarrow{P_e^{XZ}} -\overline{OC} \end{aligned} \quad [41.7.2]$$

pero $(-\overline{OA}, -\overline{OB}, -\overline{OC})$ son precisamente las coordenadas de $-\mathbf{r}$.

¹ Recuérdese, por ejemplo, que el hamiltoniano del átomo de hidrógeno es invariante bajo paridad (ante el cambio $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, o en coordenadas esféricas, $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \varphi + \pi$; figura 41.1). Por ello, los estados, es decir, las funciones de onda $\phi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ tienen una paridad determinada, pues $Y_\ell^m(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta, \varphi)$. Para $\ell = \text{par}$, la función es *par* ($\psi(-\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$); para $\ell = \text{impar}$, la función es *impar* ($\psi(-\mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r})$); $(-1)^\ell$ es la *paridad orbital* debida al movimiento relativo de electrón y protón.

Como siempre tenemos invariancia bajo rotaciones (apartado 41.2.2), diremos entonces que un proceso ($i \rightarrow f$) es invariante bajo paridad si su imagen *especular* $i^e \rightarrow f^e$ es posible y, además, con la *misma* probabilidad: $P(i \rightarrow f) = P(i^e \rightarrow f^e)$. En caso contrario, diremos que la interacción, responsable de dicho proceso, viola paridad.

Hasta 1956 se creía que la paridad se conservaba, pero en ese año T. D. Lee y C. N. Yang propusieron que sólo las interacciones fuertes y electromagnéticas la conservaban, y no así las débiles. En 1957, C. S. Wu y colaboradores demostraron experimentalmente que las interacciones débiles violaban paridad. Para ello consideraron la desintegración β del cobalto (Co) (capítulo 37).

La existencia de neutrinos y antineutrinos, que sólo intervienen en interacciones débiles, es fiel reflejo de la violación de paridad por dichas interacciones. En efecto, las imágenes especulares de ν y $\bar{\nu}$ tienen la helicidad *errónea* y, por tanto, *no* son partículas físicas (figura 41.2).

Vemos, pues, que las interacciones débiles distinguen el neutrino *levógiro* del antineutrino *dextrógiro*, o, en otras palabras, distinguen la derecha de la izquierda (la imagen especular de la mano derecha es la mano izquierda).

Si la paridad se conserva en una reacción entre partículas (mediada, por tanto, por interacciones fuertes, o electromagnéticas), se puede asignar a cada una de ellas un número cuántico llamado *paridad intrínseca* (η), que es igual a +1 o -1 (inicialmente habrá una asignación arbitraria, por ejemplo, la del protón igual a +1, y luego las demás serán con relación a ella). Si se trata de bosones, la paridad intrínseca de una partícula y de su correspondiente antipartícula serán iguales; si son fermiones, serán de signo opuesto.

La paridad del estado de dos partículas A y B viene dada por:

$$P(A, B) = \eta_A \eta_B (-1)^\ell \quad [41.7.3]$$

donde η_A, η_B son las paridades intrínsecas y $(-1)^\ell$ es la paridad orbital (véase nota 1), siendo ℓ el momento angular orbital relativo entre ellas.

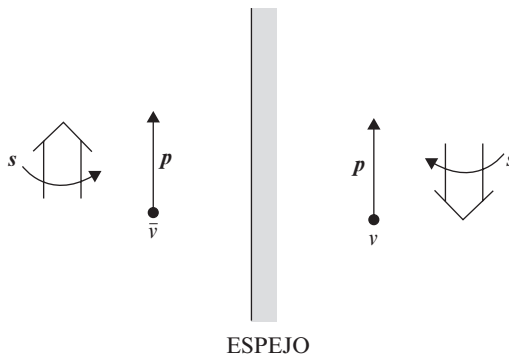


Figura 41.2. Imagen especular de un antineutrino ($\bar{\nu}$); p es el momento, y s el espín (su comportamiento en la reflexión especular es similar al de un tornillo). Análogamente sucedería para el neutrino (ν) (salvo que s sería antiparalelo a p).

41.8. CONJUGACIÓN DE CARGA (C)

La conjugación de carga (C) es una operación que cambia una partícula de momento \mathbf{p} y espín s en su correspondiente antipartícula con el mismo momento y espín².

Las interacciones fuertes y electromagnéticas preservan esta simetría. Físicamente, esto quiere decir, por ejemplo, que la energía del estado fundamental del antideuterio (núcleo: $(\bar{p}, \bar{n}); e^+$) es la misma que la del deuterio (núcleo: $(p, n); e^-$).

En general, el hecho de que un proceso, ecuación [41.1.1] ($i \rightarrow f$), sea invariante bajo conjugación de carga (es decir, el tipo de interacción que lo media preserve esta simetría) significa que la dispersión ($\bar{i} \rightarrow \bar{f}$):

$$\bar{a}_1 + \bar{a}_2 + \dots + \bar{a}_n \rightarrow \bar{b}_1 + \bar{b}_2 + \dots + \bar{b}_m \quad [41.8.1]$$

(donde \bar{a}_i ($i = 1, \dots, n$) y \bar{b}_j ($j = 1, \dots, m$) son las correspondientes antipartículas de las a_i y b_j), no sólo es posible, sino que, además, sucede con la misma probabilidad que [41.1.1]: $P(i \rightarrow f) = P(\bar{i} \rightarrow \bar{f})$.

Por el contrario, las interacciones débiles no conservan la invariancia bajo la operación de conjugación de carga. En efecto, consideremos nuevamente, por ejemplo, un neutrino; gráficamente, podríamos representar la acción de C sobre él como (figura 41.3):

Como vemos, el neutrino (ν) ha sido sustituido por un antineutrino ($\bar{\nu}$) que *no* es físico (tiene la helicidad errónea, al no cambiar C ni \mathbf{p} , ni s).

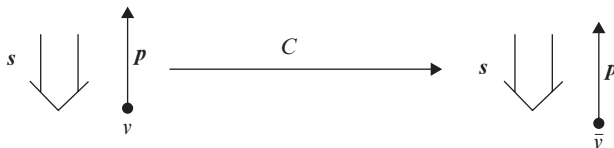


Figura 41.3. Acción de la operación conjugación de carga (C) sobre un neutrino (ν).

41.9. SIMETRÍA CP

41.9.1. Invariancia bajo CP

Ahora vamos a considerar la acción *sucesiva* de la inversión espacial —o paridad (P)— y la de la conjugación de carga (C). Como las interacciones fuertes y electromagnéticas son invariantes bajo P y C *separadamente*, también, obviamente, lo serán cuando apliquemos dichas operaciones sucesivamente; pero, ¿y las interacciones débiles? Estas últimas, que *no* conservan P y C, tomadas individualmente, podrían quizá conservar la combinación CP. Para ello, volvamos al neutrino (o al antineutrino); la acción sucesiva de P y C es la de la figura 41.4.

² Decimos que el estado correspondiente a un conjunto de partículas es *autoestado* de C cuando cada una de las cargas totales (eléctrica, extrañeza, etc.) de dicho estado es nula, por ejemplo, el positronio, estado ligado de e^- y e^+ cuya carga eléctrica total y número leptónico electrónico total es igual a cero.

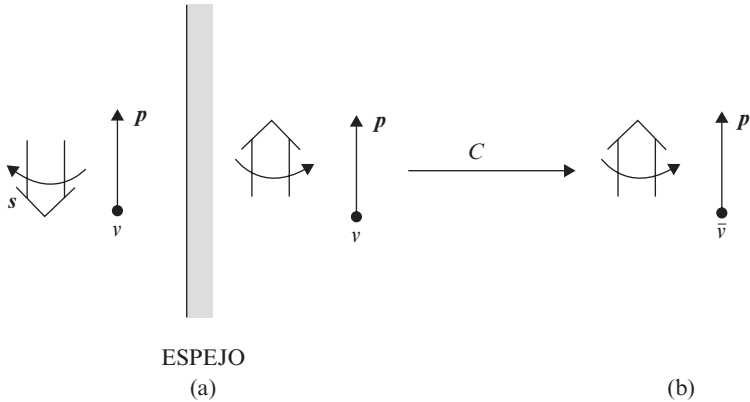


Figura 41.4. Acción sucesiva de las operaciones de paridad (a) y conjugación de carga (b) sobre un neutrino (ν).

Como se ve en la figura 41.4, sólo la imagen especular no es físicamente aceptable (¡sería un neutrino dextrógiro!); pero la acción de C sobre dicha imagen especular da un resultado perfectamente físico: un antineutrino dextrógiro. Luego aparentemente conservan CP. Sin embargo, no va a ser así, aunque la violación de CP sea pequeña.

41.9.2. Los kaones neutros (K^0, \bar{K}^0): violación de CP

Los kaones neutros K^0 y \bar{K}^0 —uno antipartícula del otro— han sido ya introducidos como ejemplos de partículas extrañas (apartado 40.4.3). Se producen —e intervienen— en procesos *fuertes* diferentes por tener extrañezas opuestas y ser S conservada en ellos. En cuanto a interacciones fuertes se refiere, K^0 y \bar{K}^0 son las partículas (distintas) detectadas.

Sin embargo, si formásemos un haz *sólo*, por ejemplo, de K^0 , nos encontraríamos que al cabo de 8.9×10^{-11} s podríamos tener procesos *fuertes* característicos no sólo de K^0 , sino también de \bar{K}^0 . ¿Qué ha pasado? Esperábamos, por otra parte, que los kaones neutros se desintegrasen, como otros hadrones extraños, vía interacción débil, *pero* el hecho es que, en cuanto a esta última interacción se refiere, las partículas neutras, que en realidad sufren la desintegración, no son K^0 y \bar{K}^0 , *sino* las llamadas ¡ K_S^0 y K_L^0 ! Las vidas medias respectivas de K_S^0 (s de «short», corto en inglés) y K_L^0 (L de «long», largo) son:

$$\tau_s = 8.9 \times 10^{-11} \text{ s} \quad ; \quad \tau_L = 5.2 \times 10^{-8} \text{ s} \quad [41.9.1]$$

(K_L^0 vive unas 100 veces más que el K_S^0 , de aquí los nombres). Luego la explicación buscada es la siguiente: tanto el K^0 , como el \bar{K}^0 , pueden estar en *dos* estados diferentes (con una cierta probabilidad), que son los denominados K_S^0 y K_L^0 (y viceversa)³. En interacciones fuertes, los kaones neutros se presentan como K^0 y \bar{K}^0 , y en débiles como K_S^0 y

³ Los estados fuertes $|K^0\rangle$ y $|\bar{K}^0\rangle$ son combinaciones lineales independientes de los estados débiles $|K_S^0\rangle$ $|K_L^0\rangle$ (y viceversa).

K_L^0 . Al cabo de 8.9×10^{-11} s la componente K_S^0 del K^0 se ha desintegrado, y nos quedamos solamente con K_L^0 , que a su vez puede estar en los estados K^0 y \bar{K}^0 .

Pero la anterior *no* es la última sorpresa que nos depara el curioso sistema de los kaones neutros. El K_S^0 se desintegra preferentemente en *dos* piones, y el K_L^0 en *tres* piones. Por ejemplo:

$$\begin{aligned} K_S^0 &\rightarrow \pi^+ + \pi^- (68.61 \pm 0.28)\% & ; & & K_L^0 &\rightarrow \pi^0 + \pi^0 + \pi^0 (21.12 \pm 0.27)\% \\ K_S^0 &\rightarrow \pi^0 + \pi^0 (31.39 \pm 0.28)\% & ; & & K_L^0 &\rightarrow \pi^+ + \pi^- + \pi^0 (12.56 \pm 0.20)\% \end{aligned} \quad [41.9.2]$$

Se puede probar que estas desintegraciones débiles conservan CP. Pero en 1964 J. H. Christenson, J. W. Cronin, V. L. Fitch y R. Turlay descubrieron experimentalmente el proceso:

$$K_L^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^- \quad [41.9.3]$$

que viola CP. Esta desintegración ocurre con una probabilidad pequeña, pues el cociente de ella sobre la probabilidad total de desintegración de K_L^0 es del orden de 10^{-3} . La conclusión final es, por tanto, que las interacciones débiles *no* conservan CP, aunque la violación de esta simetría sea *muy pequeña*.

Recientemente, la violación de CP ha sido detectada también en el sistema constituido por las partículas B^0 y \bar{B}^0 (véase 42.5).

41.10. INVERSIÓN TEMPORAL (T)

Consideremos nuevamente un proceso general ($i \rightarrow f$):

$$a_1 + a_2 + \dots + a_n \rightarrow b_1 + b_2 + \dots + b_m \quad [41.10.1]$$

donde p_i y s_i ($i = 1, \dots, n$) son los momentos y espines de las partículas iniciales (a_i), y p'_j y s'_j ($j = 1, \dots, m$) los correspondientes a las finales (b_j). La operación de inversión temporal (T), aplicada a este proceso, consiste, como su nombre indica, en una inversión de la «flecha del tiempo», que en términos de su acción sobre momentos y espines será, por tanto:

$$\begin{aligned} p_i &\xrightarrow{T} -p_i & p'_j &\xrightarrow{T} -p'_j \\ s_i &\xrightarrow{T} -s_i & s'_j &\xrightarrow{T} -s'_j \end{aligned} \quad [41.10.2]$$

En otras palabras, hemos dado «marcha atrás» en la «proyección» de la película del proceso inicial ($f^T \rightarrow i^T$).

El proceso es invariante bajo inversión temporal, si el proceso «inverso» ocurre con la misma probabilidad: $P(i \rightarrow f) = P(f^T \rightarrow i^T)$.

41.11. SIMETRÍA CPT

Experimentalmente, parece *hasta ahora* confirmarse que *todos* los procesos conocidos son invariantes bajo CPT, es decir, bajo la aplicación sucesiva de inversión temporal (T), paridad (P) y conjugación de carga (C). Por tanto, la simetría CPT entraría dentro de las leyes de conservación absolutas (apartados 41.2 y 41.3). Se puede demostrar que, como consecuencia, masas, espines, momentos magnéticos y vidas medias de las partículas y de sus correspondientes antipartículas serán iguales.

En el apartado 41.9.2 se ha visto que existe una pequeña violación de CP en los procesos débiles de los kaones neutros. Luego si CPT se conserva, se daría también una pequeña violación de T; en otras palabras, tendríamos una flecha microscópica del tiempo, al igual que la entropía proporciona una flecha macroscópica de él.

41.12. RESUMEN

Viene dado por la tabla 41.3.

TABLA 41.3

Leyes de conservación (+ indica conservada; – indica no conservada)

Cantidad conservada	Símbolo	Interacción fuerte	Interacción electromagnética	Interacción débil
Energía	E	+	+	+
Momento lineal	p	+	+	+
Momento angular total	J	+	+	+
Carga eléctrica	Q	+	+	+
Número bariónico*	B	+	+	+
Número leptónico electrónico*	L_e	+	+	+
Número leptónico muónico*	L_μ	+	+	+
Número leptónico tauónico*	L_τ	+	+	+
Isospín	I	+	–	–
Tercera componente de isospín	I_3	+	+	–
Paridad	P	+	+	–
Conjugación de carga	C	+	+	–
Conjugación de carga – Paridad**	CP	+	+	–
Inversión temporal**	T	+	+	–
Conjugación de carga – Paridad – – Inversión temporal	CPT	+	+	+
Extrañeza	S	+	+	–
Encanto	C	+	+	–
Belleza	B	+	+	–
Verdad	T	+	+	–

* Los números bariónico y leptónico podrían no ser conservados por posibles interacciones superdébiles (sin evidencia experimental hasta ahora).

** La violación de CP en interacciones débiles es muy pequeña (comparada, por ejemplo, con la de paridad).

42

Estructura de las partículas: las familias

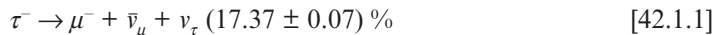
Marina Ramón Medrano

42.1. LAS TRES FAMILIAS LEPTÓNICAS: EL LEPTÓN PESADO (τ)

En el apartado 40.5 se han introducido los leptones como partículas *elementales* que intervienen en interacciones débiles y electromagnéticas. De ellos, se han visto el electrón (e^-), el neutrino electrónico (ν_e), el muon (μ^-) y el neutrino muónico (ν_μ), y sus correspondientes antipartículas. Al electrón y su neutrino se les asignaba $L_e = 1$, y al muon y su neutrino $L_\mu = 1$ [de signo contrario para las antipartículas (tabla 41.1)]. Ambos números leptónicos (L_μ y L_e) se conservaban *independientemente*. Esto nos indica que, considerando sólo los leptones anteriores, existen lo que podríamos llamar dos «familias» leptónicas: una, la constituida por e^- y ν_e (y sus antipartículas e^+ , $\bar{\nu}_e$), y otra, por μ^- y ν_μ (y μ^+ , $\bar{\nu}_\mu$).

En 1975, en los laboratorios de S.L.A.C. (Estados Unidos) y de D.E.S.Y. (Alemania), se descubrió un nuevo leptón, llamado *tau* (τ^-). Comparada su masa con la de sus predecesores ($m_{e^-} = 0.51$ MeV; $m_{\mu^-} = 105.66$ MeV), se trata de un leptón pesado, pues m_{τ^-} es igual a 1777 MeV (¡mayor que la masa de un protón!). Su vida media es $(290.6 \pm 1.1) \times 10^{-15}$ s.

El τ^- puede desintegrarse, por ejemplo, vía interacción débil, en muon y antineutrino muónico, pero, por conservación de la energía y el momento, se necesita la existencia de una tercera —y nueva— partícula. Se trata del *neutrino tauónico* (ν_τ) asociado al τ^- (como ν_e y ν_μ lo están a e^- y μ^- , respectivamente). El proceso sería el siguiente:



que nos sugiere la idea de asociar a τ y ν_τ un tercer número leptónico, denominado por tanto número leptónico tauónico (L_τ) (también conservado independientemente). Las antipartículas correspondientes a τ^- y ν_τ son, respectivamente, τ^+ y $\bar{\nu}_\tau$. La tabla 41.1 queda ahora completada con la 42.1.

TABLA 42.1

Asignación de números leptónicos a τ^- (τ^+) y ν_τ ($\bar{\nu}_\tau$)

Partícula	L_τ	L_e	L_μ
τ^-, ν_τ	1	0	0
$\tau^+, \bar{\nu}_\tau$	-1	0	0

Los espines de τ^- y τ^+ y ν_τ ($\bar{\nu}_\tau$) son iguales a 1/2, y todos ellos se considera que son objetos elementales, al igual que los leptones precedentes. La evidencia experimental del neutrino tauónico es también directa (en 2000, en el Laboratorio Enrico Fermi, Chicago, Estados Unidos).

Experimentalmente, la cota superior de las masas de los neutrinos ν_e, ν_μ, ν_τ (y de sus antineutrinos), llamados *activos* porque intervienen en interacciones débiles, se estima en 2 eV. A partir de datos cosmológicos, la cota superior desciende a 0.29 eV.

Resumiendo, hasta ahora se cree que las familias leptónicas activas son tres: la familia electrónica, la muónica y la tauónica (corroborado por las desintegraciones de Z^0 ; L.E.P., Ginebra (apéndice N).

Por otra parte, fenómenos físicos tales como el problema de los neutrinos solares (detección de menor flujo de neutrinos electrónicos que el esperado, según el modelo solar) y experimentos en curso, o en un futuro próximo, indican la existencia de transiciones de un tipo de neutrino a otro (por ejemplo, de un neutrino electrónico a uno muónico). A este fenómeno se le conoce con el nombre de oscilación de neutrinos, que conlleva la existencia de neutrinos con masa.

Los experimentos consideran no sólo la detección de neutrinos solares (producidos en las reacciones nucleares en el Sol), sino de los atmosféricos (producidos por colisiones de rayos cósmicos con la atmósfera terrestre), de los cósmicos (provenientes de fuentes cósmicas, como la Supernova SN1987A en la Gran Nube de Magallanes) y de los generados en reactores nucleares y aceleradores. Entre los experimentos más importantes, figuran: Superkamiokande, KamLAND y J-PARC (Japón); MINOS+, MINERvA, MiniBooNE y NovA (Estados Unidos); ANTARES y KM3NeT (mar Mediterráneo); Double Chooz (Francia); KARMEN (Alemania e Inglaterra); Daya Bay (China); RENO (Corea del Sur); BDNUT (lago Baikal, Rusia); SNO+ (Canadá); CERN (Suiza) y Gran Sasso (OPERA, ICARUS, BOREXINO, Italia).

La oscilación de neutrinos, incluyendo *activos* y *estériles* (y su posible relación con la *materia oscura* del Universo) es considerada en el apéndice Q.

42.2. ESTRUCTURA DE LOS HADRONES: LOS QUARKS

El «diámetro» de un hadrón es del orden del fermi (10^{-13} cm). Si se le golpea con otra partícula, cuya energía sea del orden de 1 MeV (10^6 eV), el hadrón se comportará como un objeto elemental. En otras palabras, el proyectil *no* era lo bastante energético (es decir,

su longitud de onda de De Broglie no era lo bastante pequeña; capítulo 3) para investigar distancias muy inferiores a un fermi. Por tanto, si se quiere conocer la estructura de un hadrón, necesitaremos proporcionar a la partícula-proytil (en un acelerador) una energía muy superior, en el rango del GeV ($1 \text{ GeV} = 10^3 \text{ MeV}$).

42.2.1. Estructura del protón: los quarks u («UP») y d («Down»)

A finales de la década de los años sesenta se llevaron a cabo experimentos electrón-nucleón ($e^- N$) en Stanford (Estados Unidos). Electrones acelerados a 20 GeV chocaban contra protones. El proyectil elegido —el electrón— tiene la ventaja de que, en esta colisión, sólo hemos de considerar interacciones electromagnéticas (si hubiese sido un protón, tendríamos, además, las fuertes). Luego la desviación que sufra el electrón estará determinada por la distribución de carga eléctrica en el *interior* del protón. Análogamente a lo que sucedía en el experimento de Rutherford con el átomo (capítulo 4), si la distribución es homogénea (el protón es *una* «bola», homogénea y extendida, de carga +1), el electrón se desviaría poco, pero si, por el contrario, la carga está concentrada en *unas* pequeñas «bolitas», se darían dos casos extremos:

- a) Que apenas se desvían.
- b) Que sufren grandes desviaciones, formando un ángulo de casi 180° con la dirección incidente.

Los resultados experimentales demostraron que el protón estaba constituido por *tres* cargas puntuales («diámetro» $\sim 10^{-16} \text{ cm}$) (figura 42.1).

Estos tres objetos elementales (puntuales) que existen en el interior del protón son los *quarks*, propuestos ya teórica, e independientemente, por M. Gell-Mann y G. Zweig en 1963. La conclusión es, entonces, que el protón *no* es una partícula elemental, sino que es un estado ligado de *tres* quarks.

A partir del protón podemos inferir propiedades de sus quarks constituyentes. Sabemos, por otra parte, que los números cuánticos son cantidades que pueden adscribirse a las partículas porque se conservan en una interacción. Tomemos, por ejemplo, la carga

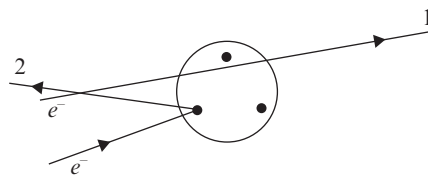


Figura 42.1. Distribución puntual de la carga del protón. El electrón (e^-) 1 casi no se desvía, y el 2 casi vuelve en sentido contrario al incidente.

eléctrica; como ésta es un número cuántico aditivo para reproducir la carga +1 del protón, los quarks podrán tener carga *fraccionaria* (!). En este caso dos quarks podrían tener carga +2/3 y el tercero igual a -1/3:

$$q_p = 1 = 2 \times \left(\frac{2}{3}\right) + \left(-\frac{1}{3}\right) \quad [42.2.1]$$

El número bariónico (también aditivo) del protón era 1, luego podemos asignar el valor 1/3 a cada uno de los quarks:

$$B_p = 1 = 3 \times \left(\frac{1}{3}\right) \quad [42.2.2]$$

Asimismo, el espín 1/2 del protón puede reproducirse si los quarks constituyentes tienen espín igual a 1/2:

$$\uparrow \quad \downarrow \quad \uparrow = 1/2 \quad [42.2.3]$$

donde cada círculo representaría un quark y la flecha indicaría la dirección de su espín (los momentos angulares orbitales relativos serían nulos; dada la pequeña masa del protón —frente a otros bariones—, el estado ligado de los tres quarks sería el fundamental).

Consideremos ahora el neutrón (n), que, como sabemos, es un barión ($B = 1$) de espín igual a 1/2 y masa similar a la del protón. La discusión referente al número bariónico y al espín de los quarks es igualmente aplicable al neutrón, dando las mismas conclusiones sobre los quarks ($s_{\text{quark}} = 1/2$; $B_{\text{quark}} = 1/3$). Pero como el neutrón tiene carga eléctrica nula se necesitaría ahora un quark con carga 2/3 y dos con -1/3:

$$q_n = 0 = \frac{2}{3} + 2 \times \left(-\frac{1}{3}\right) \quad [42.2.4]$$

Los sencillos argumentos anteriores parecen indicar —para la formación de p y n— la existencia de *dos* quarks *distintos*: uno con carga +2/3 y otro con -1/3, ambos con número bariónico y espín igual a 1/3 y 1/2, respectivamente. Por otra parte, protón y neutrón forman un doblete de isospín (apartado 41.4), luego también estos dos quarks deberían poseer esta propiedad intrínseca. Para reproducir el doblete de isospín ($I = 1/2$) (p,n), los dos quarks formarán, asimismo, un doblete de isospín (ejercicio: 42.14). El quark correspondiente al estado de isospín $I = 1/2$, $I_3 = 1/2$ será el u (de «up»: arriba, en inglés), y el $I = 1/2$, $I_3 = -1/2$, el d (de «down»: abajo); luego las cargas eléctricas serán iguales a 2/3 y -1/3, respectivamente ([41.6.1]).

Resumimos las propiedades de los quarks u y d en la tabla 42.2.

TABLA 42.2

Los quarks u («up») y d («down»); q (carga eléctrica), B (número bariónico), I (isospín), I_3 (tercera componente de isospín), S (extrañeza)

Quark	q	Espín	B	I	I_3	S
u	2/3	1/2	1/3	1/2	1/2	0
d	-1/3	1/2	1/3	1/2	-1/2	0

En la tabla 42.2 hemos añadido una última columna para la extrañeza (S), asignando valores nulos para ella, pues ni el p ni el n son bariones extraños.

Finalmente, entonces, la configuración en quarks de un protón y un neutrón vendrá dada por:

$$\begin{aligned} p &: u u d \\ n &: u d d \end{aligned} \quad [42.2.5]$$

A los antiquarks \bar{u} y \bar{d} se les asignará carga eléctrica (q), número bariónico (B) y tercera componente de isospín (I_3) de signo opuesto ($q = -2/3, +1/3$; $B = -1/3, -1/3$; $I_3 = -1/2, 1/2$, respectivamente). Espín e Isospín son iguales a los de u y d .

42.2.2. Estructura de los mesones no extraños

Éstos también estarán constituidos por los quarks u y d (y sus antiquarks); los mesones son bosones (no fermiones, como los bariones), y estarán formados por *dos* objetos elementales (no tres, como los bariones), concretamente, por *un* quark y *un* antiquark. Por ejemplo: el π^- (espín = 0; $q = -1$; $B = 0$; $I = 1$, $I_3 = -1$; $S = 0$) será un estado ligado de \bar{u} y d . En efecto:

$$\begin{aligned} \text{Espín} &= \uparrow \downarrow = 0 \\ q_{\pi^-} &= q_{\bar{u}} + q_d = -\frac{2}{3} - \frac{1}{3} = -1 \\ B_{\pi^-} &= B_{\bar{u}} + B_d = -\frac{1}{3} + \frac{1}{3} = 0 \\ I_3 &= I_3(\bar{u}) + I_3(d) = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -1 \end{aligned} \quad [42.2.6]$$

En general, resumiendo:

1. Las partículas hadrónicas *no* son elementales; sus constituyentes, los quarks, sí lo son.
2. Los bariones están formados por *tres* quarks; los mesones por *un* quark y *un* antiquark.

A continuación, introduciremos otros cuatro quarks (y sus correspondientes anti-quarks). Obsérvese, que así, el número de quarks será igual al de leptones (apartado 42.1).

42.3. EL TERCER QUARK: s («STRANGE»: EXTRAÑO)

El barión extraño ($S = -1$) más ligero ($m_{\Lambda} = 1115.7$ MeV) es Λ^0 . Pero, ahora, en su composición tiene que entrar un nuevo quark, distinto de u y d, que sea portador de la extrañeza; éste será el denominado s (de «strange»: extraño en inglés). Para reproducir el espín ($= 1/2$), la carga eléctrica ($= 0$), el número bariónico ($= 1$), la extrañeza ($= -1$) y el estado de isospín ($I = 0, I_3 = 0$) de Λ^0 , el quark s tendrá las siguientes asignaciones (tabla 42.3):

TABLA 42.3
El quark s («strange»: extraño)

Quark	q	Espín	B	I	I_3	S
s	$-1/3$	$1/2$	$1/3$	0	0	-1

La configuración en quarks de Λ^0 vendrá dada por:

$$\Lambda^0 : u d s \quad [42.3.1]$$

Entre los bariones estables extraños Λ^0 (u d s), Σ^+ (u u s), Σ^0 (u d s), Σ^- (d d s) tienen $S = -1$, como indican sus configuraciones entre paréntesis; Ξ^0 (u s s) y Ξ^- (d s s) tendrán $S = -2$, y finalmente Ω^- (s s s) tendrá $S = -3$ (véase tabla de partículas 2).

Comparando la configuración del n (u d d) con la de Λ^0 (u d s), vemos que se ha sustituido un quark d por un quark s; por otra parte, la masa de Λ^0 excede a la n en unos 176 MeV, luego el quark s pesará más que el d. El antiquark \bar{s} tendrá la misma masa, espín e isospín que s; las tres cargas (eléctrica, número bariónico y extrañeza) serán de signo opuesto ($q = 1/3, B = -1/3, S = 1$). El quark s es un singlete de isospín.

Los mesones extraños estarán constituidos naturalmente por un quark y un antiquark, pero el quark s tendrá que formar parte de su configuración. Por ejemplo, los mesones extraños estables: K^+ (u \bar{s}), K^0 (d \bar{s}), \bar{K}^0 (\bar{d} s) y K^- (\bar{u} s). (Esta lista incluye partículas $-K^+$, K^0- y antipartículas $-K^-$, \bar{K}^0-) (véase tabla de partículas 3).

La materia hadrónica que nos rodea está constituida por los quarks u, d y s (y sus antiquarks)¹. A altas energías, en los aceleradores se encuentran hadrones formados por nuevos quarks más pesados que los anteriores. De ellos nos ocuparemos a continuación.

42.4. EL CUARTO QUARK: c («CHARM»: ENCANTO)

Si se relaciona el número de leptones y quarks conocidos en la década de los años sesenta, tendríamos:

$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ e^- \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \quad [42.4.1]$$

$$\begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu^- \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} ? \\ s \end{pmatrix} \quad [42.4.2]$$

es decir, había dos familias leptónicas y «una y media» *familias hadrónicas*. La primera familia, leptónica y hadrónica [42.4.1], constituía la materia ordinaria (Tierra, estrellas, etcétera); la segunda familia, [42.4.2], aparecería en rayos cósmicos y aceleradores de altas energías. Esta disimetría entre el mundo leptónico y el hadrónico indujo, en 1964, a S. Glashow a bautizar al hipotético cuarto quark como «c», de «charm» (encanto, en inglés). Dicho quark tendría una carga eléctrica igual a 2/3 (como u) y sería más pesado que s, puesto que no se habían detectado hadrones constituidos por él (las energías alcanzadas en los aceleradores no eran aún las suficientes). En 1970, S. Glashow, Y. Iliopoulos y L. Maiani demostraron, mediante cálculo, la necesidad de la existencia de un cuarto quark para explicar hechos experimentales como el siguiente: el K_s^0 prácticamente no se desintegraba en una pareja de muones ($K_s^0 \rightarrow \mu^+ + \mu^-$). La relación entre la probabilidad de dicho suceso y la de la desintegración más frecuente en piones cargados ($K_s^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^-$) era menor que 10^{-8} .

En su busca, y a finales de 1974, se llevaron a cabo experimentos de colisión de protones contra núcleos atómicos (S. Ting; Brookhaven, Estados Unidos), y de electrones contra positrones (B. Richter; S.L.A.C., Estados Unidos). En este último —más sencillo de analizar— los haces de e^- y e^+ chocaban frontalmente con una energía de 4 GeV; luego la aniquilación de pares en la colisión producía una energía de 8 GeV, enteramente disponible para la producción de nuevas partículas. Ambos leptones, al aniquilarse, dan un fotón, que luego se transforma en hadrones. La sección eficaz de este proceso presentaba un pico (máximo agudo) a una energía en el centro de masas de 3097 MeV. La anchura del máximo es $0.087 (\pm 0.005)$ MeV. Esto nos indica la formación de una partícula inesta-

¹ Las interacciones fuertes conservan el isospín I y la hipercarga $Y (= B + S)$. Matemáticamente se expresa diciendo que las interacciones fuertes son invariantes bajo el grupo $SU(3)$; los estados u, d y s corresponden a una representación fundamental de $SU(3)$; los hadrones se clasificarán en multipletes de dicho grupo (véase bibliografía).

ble —de masa 3097 MeV y vida media $\tau \sim 10^{-20}$ s—, que llamaremos J/ψ (Brookhaven la denominó J y S.L.A.C. ψ). El hadrón J/ψ tiene, por tanto, una vida media 1000 veces mayor que las correspondientes a las resonancias ($\tau \sim 10^{-23}$ s; apartado 40.3.1); esto es debido a que se desintegra no sólo vía fuerte (el 88% de los procesos), sino también vía electromagnética (12%; $J/\psi \rightarrow e^+ + e^-$, $J/\psi \rightarrow \mu^+ + \mu^-$). J/ψ es un mesón; su espín es igual a 1. Si ahora consideramos que el hipotético quark c es un constituyente de este hadrón pesado, asignaremos a dicho quark un nuevo número cuántico, llamado «encanto» (C), que será conservado —al igual que B y S— por las vías de desintegración mencionadas. Al quark c se le asignará, por ejemplo, $C = 1$, y a su antiquark \bar{c} , $C = -1$; luego J/ψ (un mesón) será un estado ligado de c y \bar{c} ($C = 0$, por tanto). Al ser el primero encontrado, es, de hecho, el estado fundamental: 3S_1 (${}^{2s+1}L_J$). Los números cuánticos correspondientes al quark c vienen dados en la tabla 42.4:

TABLA 42.4

El quark c

Quark	q	Espín	B	I	I_3	S	C
c	2/3	1/2	1/3	0	0	0	1

El «encanto» (C) de los quarks u, d y s (y sus antiquarks) es igual a cero.

Análogamente a como ocurría con el positronio, habrá estados ligados excitados de c y \bar{c} . En efecto, aumentando la energía de los haces de electrones y positrones se obtienen otros «picos» —en la sección eficaz— de anchura mayor, sin embargo, que la correspondiente a J/ψ . Se trata, por tanto, de partículas menos estables que la J/ψ . A todos los posibles estados ligados de c y \bar{c} se les denomina «charmonium» (η_c , es su estado fundamental).

Experimentos posteriores han conducido al hallazgo de partículas con «encanto» distinto de cero. A partir de procesos de colisión de neutrinos contra protones se encontraron los mesones D^0 (c \bar{u}), D^+ (c \bar{d}), \bar{D}^0 (\bar{c} u), D^- (\bar{c} d) y D_s^+ (c \bar{s}), D_s^- (\bar{c} s), cuya composición en quarks es la indicada entre paréntesis. Asimismo, se han detectado bariones encantados como Δ_c^+ (u d c), Ξ_c^+ (u s c). Todas estas partículas tienen masas que oscilan alrededor de los 2000 MeV y no aparecen en la Naturaleza, sino en aceleradores a altas energías. Se desintegran dando partículas sin encanto, y como C es conservado por las interacciones fuertes y electromagnéticas, dichas desintegraciones son vía interacción débil (en efecto, las vidas correspondientes son del orden de 10^{-13} s).

42.5. EL QUINTO QUARK: B («BEAUTY»: BELLEZA)

En 1978, en D.E.S.Y. (Alemania), se observó otro «pico» en la colisión (y aniquilación) de haces de e^- y e^+ a una energía superior a tres veces la correspondiente al J/ψ . El «pico» se sitúa a una energía de 9460 MeV y su anchura es de 0.052 (± 0.002) MeV. Al

igual que en el caso de la J/ψ , de aquí se deduce la existencia de una partícula muy pesada —de masa la indicada— y vida media relativamente larga ($\sim 10^{-20}$ s). La nueva partícula recibe el nombre de «upsilon» (Υ); tiene espín igual a 1 y es, por tanto, un mesón. Argumentos similares a los utilizados en el apartado 42.4 conducen a la interpretación de Υ como el estado ligado fundamental de un nuevo quark y de su correspondiente antiquark. A este quark, al que denominaremos «b», se le asigna un nuevo número cuántico (aditivo) llamado «belleza» (B); ésta y el resto de sus propiedades se dan en la tabla 42.5.

TABLA 42.5
El quark b

Quark	q	Espín	B	I	I_3	S	C	B
b	$-1/3$	$1/2$	$1/3$	0	0	0	0	1

Como siempre, el antiquark \bar{b} tendrá valores opuestos para q , B , S , C y B . La partícula Υ tendrá $B = 0$, y, dado que es más pesada que la J/ψ , la masa del quark b será mayor que la del c .

El valor de B para los quarks (antiquarks) u , d , s y c (\bar{u} , \bar{d} , \bar{s} , \bar{c}) es igual a *cero*.

Se han detectado también estados (ligados) excitados de b y \bar{b} de mayor masa que Υ , pero más inestables (Υ era el fundamental). Al conjunto de los estados ligados $b\bar{b}$ se le conoce con el nombre de «bottomonium». Asimismo, se han encontrado los siguientes mesones con «belleza» ($B \neq 0$) de espín igual a 0: B^+ ($u\bar{b}$), B^- ($\bar{u}b$), B^0 ($d\bar{b}$), \bar{B}^0 ($\bar{d}b$); sus masas oscilan alrededor de 5280 MeV; la vida media es del orden de 10^{-12} s, y los productos de desintegración no contienen ni a b ni a \bar{b} . Luego las interacciones fuertes y electromagnéticas conservan B , pero no así las débiles.

42.6. EL SEXTO QUARK: t («TRUTH»: VERDAD)

Si ordenamos nuevamente las familias leptónicas y hadrónicas surgidas hasta ahora (de las más ligeras a las más pesadas), la situación es como sigue:

$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ e^- \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \quad [42.6.1]$$

$$\begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu^- \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix} \quad [42.6.2]$$

$$\begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau^- \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} ? \\ b \end{pmatrix} \quad [42.6.3]$$

(y sus antipartículas). Vemos pues que la misma disimetría —entre el mundo leptónico y hadrónico— que se planteaba a partir de la segunda familia [42.4.2], y que conducía a la búsqueda del cuarto quark, se vuelve a replantear a nivel de la tercera familia [42.6.3].

A este hipotético sexto quark, que sería más pesado que los anteriores, se le asignaría un nuevo número cuántico (aditivo) llamado «verdad» («truth», T). Se denominaría «t» por «top» («cima», en castellano), con lo que b pasaría a conocerse como «bottom» («fondo», en castellano), de aquí el nombre de «bottomonium» para los estados ligados $b\bar{b}$. Los números cuánticos de t vendrían dados por la tabla 42.6.

TABLA 42.6
El quark t

Quark	q	Espín	B	I	I_3	S	C	B	T
t	2/3	1/2	1/3	0	0	0	0	0	1

El antiquark \bar{t} tendría valores opuestos para q , B y T . El valor de T para los quarks (antiquarks) u, d, c, s, b (\bar{u} , \bar{d} , \bar{c} , \bar{s} , \bar{b}) es igual a 0.

En 1994, en el Tevatron del laboratorio Enrico Fermi (Estados Unidos), los experimentos de colisión de protones contra antiprotones (a una energía total en el centro de masas de 1.8 TeV; 1 TeV = 10^3 GeV) mostraron la existencia del quark «top».

Las tres familias hadrónicas quedaban así completadas. El quark «t» había sido ya incluido en las teorías de interacciones fundamentales desarrolladas en las dos últimas décadas.

Decimos así que los quarks se presentan en 6 *sabores* distintos.

Pero los quarks tienen otra propiedad intrínseca, que aún no hemos introducido, y es el *color*.

42.7. EL COLOR

La resonancia Δ^{++} ($m_{\Delta^{++}} = 1232$ MeV; espín = 3/2; $q = 2$; $I = 3/2$; $I_3 = 3/2$; B = 1; S = 0) se produce en la colisión de piones cargados positivamente (π^+) contra protones (p). De acuerdo con los datos anteriores, su composición en quarks es (u u u). Pero de aquí surge el siguiente problema: como Δ^{++} es la partícula más ligera con 2 cargas positivas, los tres quarks u se encontrarán mutuamente en reposo (simetría orbital). Pero, entonces, los espines de los quarks constituyentes son los únicos responsables del espín = 3/2 de Δ^{++} , y los tres u tendrán sus espines orientados hacia arriba (simetría espinorial). Luego la función de ondas total que describiría al estado ligado de los tres quarks u sería totalmente *simétrica*, en contradicción con el principio de exclusión de Pauli (¡los quarks son fermiones!). Se *necesita*, por tanto, otra propiedad que distinga a un quark u de otro (y les permita estar en distintos estados cuánticos). Esta nueva cualidad sería el *color* (que, obviamente, no tiene nada que ver con lo que entendemos como tal). Así, el principio de Pauli queda-

rá satisfecho si asignamos a cada quark un «color» diferente; por ejemplo: rojo (R), verde (V) y azul (A).

Entonces, para que la configuración de los tres quarks u sea totalmente antisimétrica —ante el intercambio de cualquier par de ellos— exigiremos que sea antisimétrica en el intercambio de color. Explícitamente, si $u_R(i)$, $u_V(i)$ y $u_A(i)$ son los tres posibles estados normalizados de color del quark i ($i = 1, 2, 3$), tendremos:

$$\psi_{\text{color}}^{\Delta^{++}} = \frac{1}{\sqrt{3!}} \det \begin{pmatrix} u_R(1) & u_R(2) & u_R(3) \\ u_V(1) & u_V(2) & u_V(3) \\ u_A(1) & u_A(2) & u_A(3) \end{pmatrix} \quad [42.7.1]$$

(recuérdese el determinante de Slater en Física Atómica). Obsérvese que cada uno de los términos de [42.7.1] es de la forma $u_R u_V u_A$, es decir, los tres quarks u presentan colores distintos.

Análogamente sucede para *todos* los demás quarks (d, s, c, b, t). Cada uno podrá ser rojo, verde o azul. Decimos entonces que cada «sabor» (hay 6) se presenta en tres «colores» (3). Igualmente ocurrirá para los antiquarks.

Un hecho fundamental es que experimentalmente no se distingue la propiedad del «color» en los hadrones. En otras palabras: los hadrones son *incolores*. Para que un barión sea «incoloro» sus tres quarks constituyentes han de tener colores *diferentes* entre sí; para que un mesón sea incoloro, el quark (q) y el antiquark (\bar{q}') constituyentes han de tener la misma probabilidad de ser rojos, verdes o azules:

$$\psi_{\text{color}}^{\text{mesón}} = \frac{1}{\sqrt{3}} (q_R \bar{q}'_R + q_V \bar{q}'_V + q_A \bar{q}'_A) \quad [42.7.2]$$

(es decir, en cualquier tiempo medible, la pareja pasa intervalos iguales en cada uno de los tres colores). Vemos, pues, que los hadrones son «incolores», porque los tres colores están igualmente representados.

De la existencia del color se tienen varias indicaciones experimentales indirectas. Por ejemplo, en la desintegración electromagnética del π^0 —dando dos fotones—, su vida media (calculada teóricamente) es proporcional, entre otros factores, al cuadrado del número de colores. Comparando el valor experimental con el predicho, se necesita un factor 9, del que se deduce que el número de colores debe ser igual a 3. También el cociente entre las secciones de $e^+ + e^- \rightarrow$ hadrones, y $e^+ + e^- \rightarrow \mu^+ + \mu^-$ está de acuerdo con la existencia de 3 colores.

42.8. EL CONFINAMIENTO: LOS GLUONES

La mayor parte de este capítulo ha sido dedicada a los quarks, pero existe un hecho experimental fundamental que conviene señalar: hasta ahora *no* se han detectado quarks

libres. En otras palabras: los quarks (antiquarks) están *confinados* en el interior de los hadrones. Más aún, analizando el espectro de masas de los mesones se puede concluir, en buena aproximación, que la fuerza entre quark y antiquark, a distancias relativamente grandes (mayores que 1 fermi) es *constante*; es decir, el potencial (V) quark-antiquark es proporcional a la distancia (r) que los separa ($V \propto r$). Se dice, entonces, que los quarks están sometidos a «esclavitud infrarroja» (grandes distancias).

Por otra parte, en los experimentos de colisión electrón-protón llevados a cabo en Stanford (Estados Unidos) no sólo se mostró que la carga eléctrica del protón se hallaba concentrada en tres objetos puntuales (quarks), sino que los quarks a pequeñas distancias (comparadas con 1 fermi) *casí* no interactuaban entre sí. Es lo que se conoce con el nombre de «libertad asintótica» o «libertad ultravioleta» (pequeñas distancias, que corresponden a grandes energías).

Asimismo, en dichos experimentos se comprobó que la suma de los momentos de los 3 quarks, contenidos en el protón, constituía sólo el 50% del momento total de este último. Luego deben existir otros objetos elementales, *dentro* del protón y *distintos* de los quarks, portadores de ese otro 50% del momento total, y que, *además*, sean responsables de la fuerza atractiva entre los quarks. Van a ser los *gluones*, palabra deducida del inglés «to glue» que significa «pegar»; así, los gluones serán el «pegamento» cuántico que ligue los quarks. El análisis de los experimentos indica que el electrón interactúa electromagnéticamente sólo con los quarks, luego la carga eléctrica de los gluones es nula.

Los gluones —de evidencia experimental indirecta— se consideran, por tanto, como mediadores de las interacciones fuertes (el número de gluones distintos es igual a 8, y llevan también «carga de color») (véase bibliografía).

Volvamos a la fuerza que une los quarks; para ello, consideremos el ejemplo sencillo de un mesón. Argumentos teóricos indican que, en él, el quark y el antiquark están ligados por una *cinta gluónica* que contendría un número muy grande (prácticamente infinito) de gluones; la «cinta» se extendería desde el quark al antiquark (figura 42.2).

Si intentamos separarlos, la energía potencial del sistema quark-antiquark aumentaría indefinidamente (la fuerza es constante), y se llegaría, por tanto, a una situación inestable. Que no ocurra esto se debe a que tiene lugar otro proceso: la creación de nuevos pares quark-antiquark, pues el incremento de energía es suficiente para producirlos (figura 42.3).

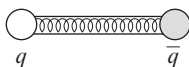


Figura 42.2. Mesón constituido por un quark (q) y un antiquark (\bar{q}) unidos por una cinta gluónica.

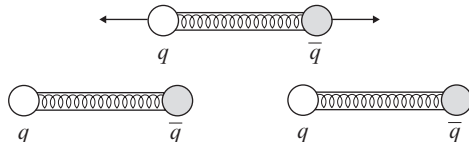


Figura 42.3. Al separar quark y antiquark se crea un nuevo par quark-antiquark.

Luego el intento de separación conlleva no sólo la permanencia del mesón primitivo, sino la formación de uno nuevo. El mismo tipo de comportamiento se da para los bariones.

La intensidad de la fuerza entre los quarks es mayor que la de la fuerza nuclear (responsable de la cohesión de los núcleos atómicos); pero esta última es consecuencia de la primera (relación similar a la que existe entre las fuerzas de Van der Waals —entre átomos— y las fuerzas eléctricas en el átomo).

Las interacciones que actúan entre quarks se llaman *cromodinámicas* (de «crom», color en griego), porque son debidas al «color» (que adquiere así una naturaleza dinámica)².

42.9. MODELO ESTÁNDAR

Los modelos teóricos (o teorías, si se consideran válidas para grandes energías) describen las interacciones fundamentales entre objetos elementales de la materia (quarks y leptones), incorporando los principios de la relatividad especial (velocidad de la luz en el vacío, c , finita) y de la mecánica cuántica (constante \hbar distinta de cero). Dichas interacciones (fuerte, electromagnética y débil) tienen lugar por el intercambio de *cuantos mediadores*. Los modelos, o teorías, permiten calcular las secciones eficaces en los procesos entre partículas elementales, y comparar con los datos experimentales.

Las interacciones electromagnéticas, por ejemplo, entre electrones y positrones, son estudiadas por la *Electrodinámica Cuántica*. El cuanto mediador es el fotón.

El *modelo de Weinberg-Salam* estudia las interacciones débiles conjuntamente con las electromagnéticas. Cada una de estas interacciones interviene con su propia intensidad; por tanto, el modelo no las unifica. Los cuantos mediadores de las interacciones débiles son los llamados bosones vectoriales: W^+ , W^- y Z^0 (los superíndices indican la carga eléctrica, en unidades del valor absoluto de la carga del electrón).

La *Cromodinámica Cuántica* estudia las interacciones fuertes, que son mediadas por los gluones.

Obsérvese que los cuantos mediadores de las tres interacciones son bosones con espín igual a 1 (en unidades de \hbar), mientras que quarks y leptones (constituyentes, o «ladrillos», de la materia) son fermiones con espín 1/2.

Dado que las interacciones débiles son de corto alcance ($< 10^{-15}$ cm), los bosones mediadores W^+ , W^- y Z^0 habrían de tener masas del orden de 10^2 GeV. En teoría, estas masas serían adquiridas gracias a la introducción de una nueva partícula llamada *bosón de Higgs* (mediante el llamado *mecanismo de Higgs*). Tras casi cinco décadas de la propuesta teórica de Higgs, el primer anuncio oficial de un nuevo bosón, en las colisiones protón-protón en el LHC (CERN), tuvo lugar el 4 de julio de 2012. El bosón de Higgs daría también masa a las partículas de la materia.

Los análisis de los datos parecen compatibles con que el espín, de este nuevo bosón, sea igual a 0, y su paridad intrínseca +1; su masa sería del orden de 125.5 GeV, y la esti-

² Se especula con la posibilidad de que *sólo* los gluones formen estados ligados (*glueball*). Hasta ahora no hay evidencia experimental. Experimentos colisiones con iones pesados están investigando la posible existencia del plasma de quark y gluones (RHIC, Brookhaven, Estados Unidos; CERN, Suiza).

mación de su vida media del orden de 10^{-21} s. Durante el tiempo de inactividad del LHC (2013-2015), parte de la actividad científica se centrará en nuevos análisis de los experimentos realizados.

La cromodinámica cuántica y el modelo de Weinberg-Salam constituyen el llamado modelo estándar³, cuya validez ha sido corroborada hasta ahora por las energías alcanzadas en el LHC.

42.10. SUPERSIMETRÍA: NEXO ENTRE BOSONES Y FERMIONES

A lo largo de los capítulos de este libro se ha visto que los bosones y los fermiones obedecen a estadísticas cuánticas distintas; parecería así que ambos mundos —el bosónico y el fermiónico— no están relacionados.

Sin embargo, existiría un nexo entre ellos si hubiese una transformación que pasase de un *fermión* a un *bosón* (y viceversa), concretamente de una partícula a otra tal que sus espines difiriesen en $1/2$, por ejemplo, de un electrón (espín = $1/2$) a una partícula de espín igual a 0 (el «es-electrón»). La simetría a la que daría lugar la anterior transformación se conoce con el nombre de *Supersimetría* (Y. Golfand, E. Linkhtman, 1971; P. Volkov, V. Akulov, 1973; J. Wess, B. Zumino, 1973). De esta forma, a cada partícula le correspondería una «compañera supersimétrica», según la nomenclatura expresada en la tabla 42.7.

TABLA 42.7

Supersimetría: correspondencia entre bosones y fermiones

Partícula	Espín	Compañera supersimétrica	Espín
Fotón	1	Fotino	$1/2$
W^\pm	1	Wino	$1/2$
Z^0	1	Zino	$1/2$
Gluones	1	Gluinos	$1/2$
Quarks	$1/2$	Es-quarks	0
Leptones	$1/2$	Es-leptones	0

Si la supersimetría fuese una simetría presente a las energías actuales, por ejemplo, la masa del «es-electrón» sería la misma que la del electrón; es decir, $m = 0.51$ MeV. Pero *no*

³ Las teorías relativistas mencionadas, que describen y estudian las interacciones fundamentales (en un espacio cuatridimensional: tres dimensiones espaciales y una temporal), son invariantes bajo transformaciones *gauge* (transformaciones dependientes del punto del espacio-tiempo). El modelo estándar sería invariante bajo el producto directo de los grupos de simetrías $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$ ($SU(3)$ en la cromodinámica cuántica; $SU(2) \times U(1)$ en el modelo de Weinberg-Salam). Tras la rotura espontánea de la simetría (mecanismo de Higgs), a energías del orden de 10^2 GeV, la simetría pasaría a ser $SU(3)_{\text{color}} \times U(1)_{\text{em}}$, los grupos gauge correspondientes a la carga de color y a la carga eléctrica, ambas conservadas.

ha sido detectada ninguna partícula de esta masa y con espín igual a cero (luego la supersimetría está «rota», aunque pudo existir esta simetría en los primeros instantes del Universo). Al bosón de Higgs le correspondería el *higgsino*, que, junto al fotino y al zino, darían lugar a los estados de masa llamados neutralinos (el más ligero considerado como posible candidato de la materia oscura fría, véase apéndice Q). No hay hasta ahora evidencia experimental del resto de las partículas supersimétricas. A pesar de ello, se siguen buscando en los laboratorios de altas energías por la relevancia que tiene la supersimetría en las teorías actuales de partículas elementales.

EJERCICIOS

42.1. Sabiendo que la masa del electrón en unidades naturales es 0.51 MeV, hallar las equivalencias, para las unidades de longitud y tiempo, entre el sistema internacional y el de unidades naturales.

42.2. El mesón ρ^- se desintegra ($\cong 100\%$) como:

$$\rho^- \rightarrow \pi^- + \pi^0$$

siendo la anchura de dicho proceso $\Gamma \sim 149$ MeV. ¿Mediante qué tipo de interacción tiene lugar dicha desintegración?

42.3. Si la vida media de una partícula, en el sistema de referencia en que ésta se encuentra en reposo, es 3×10^{-8} s, ¿cuál será su vida media en el sistema de referencia en que dicha partícula lleva una energía cinética 9 veces superior a su energía en reposo?

42.4. Dada una partícula (A) que se desintegra en otras varias: $A \rightarrow a_1 + a_2 + \dots + a_n$, demuéstrese, en general, que su masa en reposo es mayor que la suma de las masas en reposo de las partículas resultantes.

42.5. Considerando que la desintegración dominante ($\sim 100\%$) del π^+ es:

$$\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu$$

hállese la energía cinética total de las partículas resultantes cuando el π^+ está en reposo. (datos: $m_{\pi^+} = 139.57$ MeV; $m_{\mu^+} = 105.66$ MeV; $m_{\nu_\mu} = 0$).

42.6. Aceptando, hipotéticamente, que la desintegración del neutrón (n) es según el proceso:

$$n \rightarrow p + e^-$$

demuéstrese entonces que son incompatibles las leyes de conservación de la energía y del momento con el hecho experimental de que el momento del electrón (e^-) emitido tome valores distintos, variando de forma continua.

42.7. Un π^0 se desintegra, vía interacción electromagnética, en dos fotones:

$$\pi^0 \rightarrow \gamma + \gamma$$

que se mueven simétricamente con respecto a la dirección de movimiento del π^0 . Determínese el ángulo entre las direcciones de movimiento de los dos fotones, si el momento del π^0 es igual a 220 MeV ($m_{\pi^0} \sim 140$ MeV).

42.8. Un pión (π^-) incide sobre un protón (p) en reposo. ¿Qué energía cinética ha de llevar el pión incidente para que el proceso siguiente:

$$\pi^- + p \rightarrow K^0 + \Lambda^0$$

tenga lugar? Supóngase que la velocidad relativa entre K^0 y Λ^0 es nula. (Datos: $m_{\pi^-} = 139.6$ MeV, $m_p = 938.3$ MeV, $m_{K^0} = 497.7$ MeV, $m_{\Lambda^0} = 1115.6$ MeV.)

42.9. Estudiar si son posibles las reacciones:

a) $p \rightarrow \pi^+ + \pi^0$; b) $\pi^- + p \rightarrow \pi^0 + n + \nu_e$; c) $\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$
 d) $K^+ \rightarrow \pi^0 + e^+ + \nu_e$; e) $p + K^- \rightarrow \Xi^- + K^+$; f) $\pi^0 \rightarrow \pi^0 + \gamma$.

42.10. La resonancia Δ^{++} (1232) tiene números cuánticos $S = 0$ (extrañeza); $B = 1$ (número bariónico); $Q = 2$ (carga eléctrica); $I = 3/2$, $I_3 = 3/2$ (estado de isospín). Hállese un posible estado final de la desintegración vía interacción fuerte.

42.11. Demuéstrese que las partículas K^+ y π^0 no pueden desintegrarse vía interacciones fuertes.

42.12. ¿Cuál es la paridad asociada a los sistemas: a) $p \bar{p}$; b) $\pi^+ \pi^-$?

42.13. Probar que si se conserva la paridad, el siguiente proceso no está permitido:

$$\eta \rightarrow \pi^0 + \pi^0$$

(Datos: espín (η) = 0; paridad intrínseca (η) = -1.)

42.14. Los quarks u y d forman un doblete de isospín:

$$|u\rangle = |1/2 \ 1/2\rangle \quad , \quad |d\rangle = |1/2 \ -1/2\rangle$$

($|I \ I_3\rangle$ estado de isospín). Muéstrase que el protón (p) y el neutrón (n) también pueden constituir un doblete a partir de su composición en quarks.

42.15. Una partícula A en reposo se desintegra de la forma:

$$A \rightarrow B + \gamma$$

dando otra partícula B y un fotón. Pruébese que el proceso es imposible si A y B tienen espín igual a cero.

(Ayuda: la helicidad del fotón tiene valores igual a ± 1 .)

42.16. Dada la desintegración $K^+ \rightarrow \pi^0 + \mu^+ + \nu_\mu$

- i) ¿Se conserva la extrañeza (S)? ¿Y el número leptónico muónico (L_μ)? ¿Qué interacción es la que media esta reacción?
- ii) Si $q^2 = (p_{K^+} - p_{\pi^0})^2$, donde p_{K^+} y p_{π^0} son los cuadrimomentos asociados a K^+ y π^0 , respectivamente, ¿cuál es su máximo valor?

(Ayuda: para la noción de cuadrimomento véase apéndice D.)

42.17. Dado el proceso $K^+ \rightarrow \pi^+ + \pi^0$, ¿cuál es la energía del π^0 medida en el sistema de referencia del π^+ ?

Datos: $m_{K^+} = 493.6 \text{ MeV}$, $m_{\pi^+} = 139.6 \text{ MeV}$, $m_{\pi^0} = 135 \text{ MeV}$.

(Ayuda: introducir cuadrimomentos y considerar $p_{\pi^+} \cdot p_{\pi^0}$; apéndice D.)

42.18. En un proceso de colisión de dos partículas en el que se producen otras dos, demuéstrese que el número de variables cinemáticas independientes es igual a 2.

(Ayuda: introducir cuadrimomentos; apéndice D.)

42.19. Considérese el proceso fuerte:

$$\pi^- + d \rightarrow n + n$$

Suponiendo que la captura del pión (π^-) tiene lugar en onda s, y teniendo en cuenta:

- a) el espín del deuterón (d) es igual a 1 ($s_d = 1$);
- b) las paridades intrínsecas del protón (p) y del neutrón (n) son iguales ($\eta_p = \eta_n$), y
- c) el p y el n que forman d están prácticamente siempre en onda s relativa,

determinése la paridad intrínseca del π^- . (*Ayuda:* dado que el n es un fermión, el estado final ($n n$) ha de satisfacer el principio de exclusión de Pauli.)

42.20. Sabiendo que el deuterón (d) es un singlete de isospín, demostrar que la razón entre las secciones eficaces de los siguientes procesos fuertes (para idénticas configuraciones cinemáticas):

- a) $p + p \rightarrow d + \pi^+$, y
- b) $n + p \rightarrow d + \pi^0$,

es igual a 2. (*Ayuda:* en primer orden, y salvo factores cinemáticos, la amplitud de probabilidad de los procesos anteriores vendrá dada por $\langle i | H | f \rangle$ (capítulo 14), donde H es el hamiltoniano de las interacciones fuertes que conserva isospín, y $|f\rangle$ e $|i\rangle$ los estados de isospín final e inicial, respectivamente).

Soluciones a los ejercicios (capítulos 39 a 42)

42.1. A partir de la longitud reducida de Compton del electrón, se tiene:

a) Sistema Internacional

$$\lambda = \frac{\hbar}{m_e c} = 3.86 \times 10^{-13} \text{ m}$$

b) Sistema de Unidades Naturales ($\hbar = c = 1$)

$$\lambda = \frac{1}{m_e} = 1.96 \text{ (MeV)}^{-1}$$

$$\text{luego } 1 \text{ m} = 0.51 \times 10^{13} \text{ (MeV)}^{-1} = 0.51 \times 10^{16} \text{ (GeV)}^{-1}.$$

Análogamente, para el período T asociado a la longitud de onda de Compton del electrón:

a) Sistema Internacional

$$T = \frac{\hbar}{m_e c^2} = 1.29 \times 10^{-21} \text{ s}$$

b) Sistema de Unidades Naturales ($\hbar = c = 1$)

$$T = \frac{1}{m_e} = 1.96 \text{ (MeV)}^{-1}$$

$$\text{luego } 1 \text{ s} = 1.52 \times 10^{21} \text{ (MeV)}^{-1} = 1.52 \times 10^{24} \text{ (GeV)}^{-1}.$$

42.2. Por el principio de indeterminación de Heisenberg, la vida media (τ) vendrá dada por el inverso de la anchura (Γ):

$$\tau \sim 0.44 \times 10^{-23} \text{ s}$$

donde $1 \text{ (eV)}^{-1} = 6.582 \times 10^{-16} \text{ s}$; $1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV}$. Luego la desintegración es vía interacción fuerte; ρ^- es una *resonancia* mesónica.

- 42.3.** En la teoría de la Relatividad especial, la relación entre el tiempo propio τ_0 —medido por un reloj que se mueve *con* la partícula— y el tiempo τ , medido por un reloj en un referencial externo en el que la velocidad de la partícula es \mathbf{v} , viene dada por:

$$\tau_0 = \tau \sqrt{1 - \frac{|\mathbf{v}|^2}{c^2}} \quad [1]$$

donde c es la velocidad de la luz (τ_0 corresponde a un sistema de referencia que se mueve con la partícula, luego en él la partícula estará en reposo; por el contrario, τ corresponde a un sistema de referencia externo, donde la partícula llevará una cierta energía cinética. Ambos sistemas son inerciales, y se pasa de uno a otro mediante una transformación de Lorentz). (Referencia: *Teoría Clásica de Campos*, L. D. Landau y E. M. Lifshitz, Barcelona: Reverté.)

El cociente entre velocidades viene dado por (apéndices D1 y N2):

$$\frac{|\mathbf{v}|}{c} = \frac{c|\mathbf{p}|}{E} \quad [2]$$

luego $\sqrt{1 - \frac{|\mathbf{v}|^2}{c^2}} = \frac{mc^2}{E}$. Y teniendo en cuenta: $E = mc^2 + K$, donde K es la energía cinética, finalmente llegamos a

$$\tau = \tau_0 \left(1 + \frac{K}{mc^2} \right) = 3 \times 10^{-7} \text{ s}$$

- 42.4.** Por conservación de la energía:

$$E_A = \sum_{i=1}^n E_i$$

y en el sistema de referencia, en que la partícula A está en reposo, se tiene:

$$m_A c^2 = \sum_{i=1}^n (m_i^2 c^4 + \mathbf{p}_i^2 c^2)^{1/2}$$

donde m_A, m_i ($i = 1, \dots, n$) son las masas en reposo. Luego:

$$m_A > \sum_{i=1}^n m_i$$

- 42.5. La energía total libre de una partícula (E) es la suma de su energía en reposo (mc^2 ; m : masa en reposo) y su energía cinética (K):

$$E = mc^2 + K$$

En el sistema de unidades naturales ($c = 1$), y tomando la masa en reposo del neutrino muónico como nula, por conservación de la energía se tiene:

$$m_{\pi^+} = m_{\mu^+} + K$$

donde K es la energía cinética total. Luego: $K = 33.91$ MeV.

- 42.6. En el sistema de referencia en que el neutrón está en reposo ($\mathbf{p}_n = 0$: $E_n = m_n c^2$), la ley de conservación del momento

$$0 = \mathbf{p}_p + \mathbf{p}_{e^-}$$

y de la energía

$$E_n = E_p + E_{e^-}$$

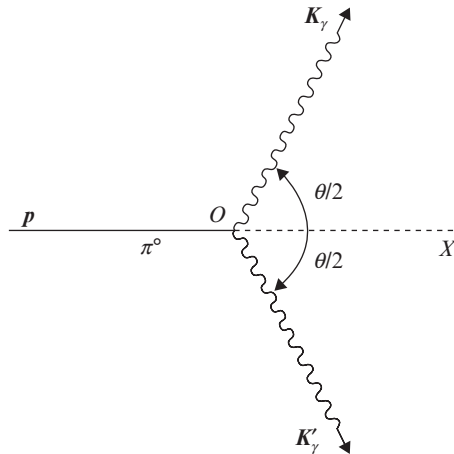
implican ($E = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$):

$$c^2 m_n = (m_p^2 c^4 + \mathbf{p}_e^2 c^2)^{1/2} + (m_e^2 c^4 + \mathbf{p}_e^2 c^2)^{1/2}$$

luego $|\mathbf{p}_{e^-}|$ estaría totalmente *fijado* por las masas m_n , m_p y m_e .

La existencia de una tercera partícula en el estado final (el neutrino) hará compatibles las leyes de conservación de la energía y el momento con los resultados experimentales.

- 42.7.



Considerando como eje OX la dirección del movimiento del π^0 , la cinemática tiene lugar en el plano XY . Por conservación de energía y momento se sigue ($c = 1$):

$$E_\gamma = 2|K_\gamma|$$

$$p = 2|K_\gamma| \cos \theta/2$$

donde se ha tenido en cuenta que $|K_\gamma| = |K'_\gamma|$ por conservación de la componente (y) del momento total (\mathbf{p} , \mathbf{K}_γ , \mathbf{K}'_γ momentos del π^0 y de los dos fotones, respectivamente; véase la figura). De $E = \sqrt{m_\pi^2 + p^2}$, y de las anteriores ecuaciones, se deduce: $\tan \theta/2 = (m/p)$. Luego $\theta \cong 65^\circ$.

42.8. Por conservación de la energía:

$$m_{\pi^-} + K + m_p = \sqrt{(m_{K^0} + m_{\Lambda^0})^2 + p^2} \quad [c = 1]$$

donde K es la energía cinética del π^- , \mathbf{p} el momento total del sistema $K^0 + \Lambda^0$, y m_{π^-} , m_p , m_{K^0} , m_{Λ^0} las masas en reposo.

Por conservación del momento:

$$\mathbf{p}_{\pi^-} = \mathbf{p}$$

y, por otra parte:

$$m_{\pi^-} + K = \sqrt{m_{\pi^-}^2 + p_{\pi^-}^2}$$

Finalmente, eliminando $p_{\pi^-}^2 (= p^2)$ de las ecuaciones anteriores:

$$K = \frac{(m_{K^0} + m_{\Lambda^0})^2 - (m_{\pi^-} + m_p)^2}{2m_p} = 767.8 \text{ MeV}$$

Nota: K es la energía cinética umbral para que la reacción se produzca.

- 42.9.**
- No. Violación del número bariónico [$B(p) = 1$; $B(\pi^0 + \pi^+) = 0$].
 - No. Violación del número leptónico [$L_e(\pi^- + p) = 0$; $L_e(\pi^0 + n + \nu_e) = L_e(\nu_e) = 1$].
 - Sí. Vía interacción débil.
 - Sí. Vía interacción débil. [Violación de la extrañeza; $S(K^+) = 1$, $S(\pi^0 + e^+ + \nu_e) = 0$.]
 - Sí. Vía interacción fuerte [Q , B , S son conservadas; $B(p + K^-) = B(p) = 1$; $B(\Xi^- + K^+) = B(\Xi^-) = 1$; $S(p + K^-) = S(K^-) = -1$; $S(\Xi^- + K^+) = -2 + 1 = -1$].
 - No. Por razones cinemáticas. [Por conservación de la energía, para un π^0 inicial en reposo ($c = 1$) se tendría: $m_{\pi^0} = m_{\pi^0} + K_{\pi^0} + E_\gamma$, donde m_{π^0} es la

energía en reposo del π^0 , K_{π^0} la energía cinética del π^0 saliente y E_γ la energía del fotón; luego se tendría $K_{\pi^0} = 0$ (físicamente aceptable) y $E_\gamma = 0$ (físicamente inaceptable).]

- 42.10.** Dada la $m_{\Delta^{++}} = 1232$ MeV, y por conservación de B, un posible estado final será:

$$\Delta^{++} \rightarrow p + \text{mesón}$$

y al mesón se tendrán que asignar los números cuánticos: $S = 0$, $Q = 1$, $I_3 = 1$ (pues $I_3(p) = 1/2$). Luego

$$\Delta^{++} \rightarrow p + \pi^+$$

Nótese que la masa (en reposo) final $m_p + m_{\pi^+} \cong 1078$ MeV es compatible con la masa inicial.

- 42.11.** Por conservación del número bariónico, ($B(K^+) = 0$), el estado final contendría: a) barión y antibarión —y quizá mesones— o b) sólo mesones. El primer caso no es posible por violación de la conservación de masa (véase tabla 2); en el segundo caso los mesones que tienen $S = 1$ son K^+ y K^0 , es decir, $K^+ \rightarrow K^+$, o, $K^+ \rightarrow K^0$, pero la primera es trivial y la segunda imposible.

El π^0 tiene $B = S = 0$ y es el hadrón más ligero (véanse tablas 2 y 3), luego no se puede desintegrar vía interacción fuerte.

- 42.12.** a) $(-1)^\ell \eta_p \eta_{\bar{p}} = (-1)^{\ell+1}$, donde ℓ es el momento angular orbital relativo. La paridad intrínseca de una partícula (η) es +1 o -1; fermión y antifermión tienen paridades intrínsecas opuestas.
b) $(-1)^\ell \eta_{\pi^+} \eta_{\pi^-} = (-1)^\ell$; bosón y antibosón tienen paridades intrínsecas de igual signo.

- 42.13.** En el sistema en reposo del mesón η , el momento angular total: $J_{\text{inicial}} = s(\eta) = 0$. Luego, por conservación del momento angular total: $J_{\text{final}} = 0 = \ell$, donde ℓ es el momento angular orbital relativo entre los dos π^0 (el espín del π^0 es igual a cero). La paridad del estado final: $P_{\text{final}} = \eta_{\pi^0}^2 (-1)^\ell = (-1)^\ell$, donde η_{π^0} paridad intrínseca del π^0 ; por conservación de la paridad: $P_{\text{inicial}} = -1 = (-1)^\ell$, y de aquí $\ell = 1, 3, 5, \dots$, que contradice la ley de conservación (absoluta) del momento angular total.

- 42.14.** Las composiciones en quarks de p y n son:

$$p = (u u d) \quad ; \quad n = (u d d)$$

Para el protón: $I_3(p) = 2I_3(u) + I_3(d) = 1/2$.

Para el neutrón: $I_3(n) = I_3(u) + 2I_3(d) = -1/2$.

Luego:

$$|p\rangle = |1/2 \ 1/2\rangle \quad , \quad |n\rangle = |1/2 \ -1/2\rangle$$

42.15. Considérese el sistema de referencia en que A está en reposo, y sea el eje OZ el de dirección de salida de B ; por conservación de momento, el γ saldrá en la misma dirección que B y en sentido opuesto. Por otra parte, todo proceso físico ha de conservar las tres componentes del momento angular *total* J . En el estado inicial, $J_z^{\text{inicial}} = 0$; en el estado final, $L_z^{\text{final}} = 0$ (el momento angular orbital tiene componente nula en la dirección del movimiento) y $S_z^{\text{final}} = \pm 1$ (la helicidad del fotón es ± 1), luego $J_z^{\text{final}} = \pm 1$. Por tanto, el proceso no es posible pues se violaría la conservación del momento angular total.

42.16. i) $S_{\text{inicial}} = S(K^+) = 1$; $S_{\text{final}} = 0$. Luego no se conserva la extrañeza. $L_\mu(\text{inicial}) = 0$; $L_\mu(\text{final}) = L_\mu(\mu^+) + L_\mu(\nu_\mu) = -1 + 1 = 0$. El número leptónico muónico se conserva.

El proceso será débil por no conservarse la extrañeza.

ii) $q^2 = (p_{K^+} - p_{\pi^0})^2 = p_{K^+}^2 + p_{\pi^0}^2 - 2p_{K^+} \cdot p_{\pi^0}$, donde $p_{K^+}^2 = m_{K^+}^2$, $p_{\pi^0}^2 = m_{\pi^0}^2$ ($c = 1$); q^2 es un invariante Lorentz; luego su valor podrá calcularse en cualquier sistema de referencia, en particular en aquel en que K^+ está en reposo ($\mathbf{p}_{K^+} = 0$; $E_{K^+} = m_{K^+}$):

$$q^2 = m_{K^+}^2 + m_{\pi^0}^2 - 2m_{K^+}E_{\pi^0}$$

donde q^2 será máximo cuando E_{π^0} sea mínimo ($E_{\pi^0} = m_{\pi^0}$). Luego:

$$q_{\text{máx}}^2 = (m_{K^+} - m_{\pi^0})^2$$

42.17. En el sistema de referencia del π^+ , éste permanece en reposo:

$$p_{\pi^+} = 0 \quad ; \quad E_{\pi^+} = m_{\pi^+} \quad (c = 1, \text{ unidades naturales}) \quad [1]$$

considerando el invariante Lorentz $p_{\pi^+} \cdot p_{\pi^0}$ en dicho sistema:

$$p_{\pi^+} \cdot p_{\pi^0} = E_{\pi^+}E_{\pi^0} - \mathbf{p}_{\pi^+} \cdot \mathbf{p}_{\pi^0} = m_{\pi^+}E_{\pi^0} \quad [2]$$

[métrica: (1, -1, -1, -1)], se tiene:

$$E_{\pi^0} = \frac{p_{\pi^+} \cdot p_{\pi^0}}{m_{\pi^+}} \quad [3]$$

Y de la conservación del cuadrimomento total:

$$p_{K^+} = p_{\pi^+} + p_{\pi^0} \quad [4]$$

se sigue:

$$p_{\kappa^+}^2 = (p_{\pi^+} + p_{\pi^0})^2 \quad [5]$$

y teniendo en cuenta:

$$p_{\kappa^+}^2 = m_{\kappa^+}^2 \quad ; \quad p_{\pi^+}^2 = m_{\pi^+}^2 \quad ; \quad p_{\pi^0}^2 = m_{\pi^0}^2 \quad [6]$$

se obtiene de [5] y [6]

$$p_{\pi^+} \cdot p_{\pi^0} = \frac{1}{2} [m_{\kappa^+}^2 - m_{\pi^+}^2 - m_{\pi^0}^2] \quad [7]$$

Finalmente, de [3] y [7]:

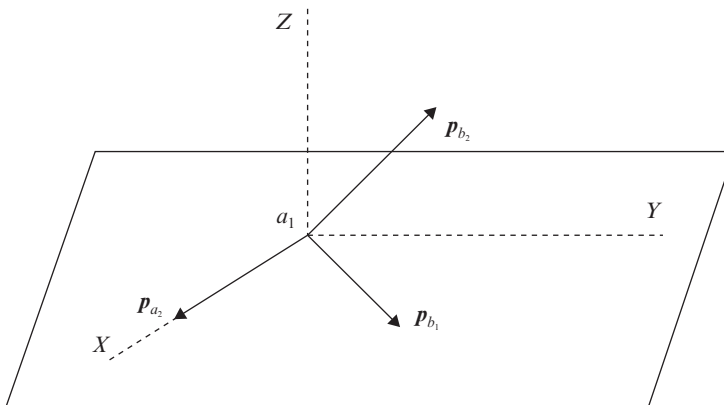
$$E_{\pi^0} = \frac{1}{2m_{\pi^+}} [m_{\kappa^+}^2 - m_{\pi^+}^2 - m_{\pi^0}^2] = 737.6 \text{ MeV}$$

- 42.18.** Sea el proceso $a_1 + a_2 \rightarrow b_1 + b_2$; los cuadrimentos asociados a estas partículas serán p_{a_1} , p_{a_2} , p_{b_1} y p_{b_2} , respectivamente. En principio, cada cuadrimento aportaría 4 variables: $p = (E, \mathbf{p})$, donde E es la energía y \mathbf{p} el momento; luego tendríamos 16. Por otra parte, siempre se puede elegir el sistema de referencia en que una de las partículas —por ejemplo, a_1 — esté en reposo:

$$p_{a_1} = (E_{a_1}, 0) \quad (c = 1) \quad [1]$$

El momento de la partícula a_2 marcaría una dirección que podemos asociar al eje X (véase figura):

$$p_{a_2} = (E_{a_2}, p_{a_2x}, 0, 0) \quad [2]$$



Los momentos de las partículas a_2 y b_1 formarían un plano que identificaremos con el XY

$$p_{b_1} = (E_{b_1}, p_{b_1x}, p_{b_1y}, 0) \quad [3]$$

y, finalmente, el momento de la partícula b_2 señalaría una dirección cualquiera:

$$p_{b_2}(E_{b_2}, \mathbf{p}_{b_2}) \quad [4]$$

Luego, en este sistema de referencia, el número de variables nulas —por consideraciones geométricas— es igual a 6.

Por otra parte, las variables cinemáticas están ligadas por la conservación del cuadrimomento total (conservación de la energía y momentos totales)

$$p_{a_1} + p_{a_2} = p_{b_1} + p_{b_2} \quad [5]$$

(que da lugar a 4 ecuaciones: $E_{a_1} + E_{a_2} = E_{b_1} + E_{b_2}$; $\mathbf{p}_{a_1} + \mathbf{p}_{a_2} = \mathbf{p}_{b_1} + \mathbf{p}_{b_2}$), y por los invariantes Lorentz siguientes:

$$p_{a_1}^2 = m_{a_1}^2 \quad ; \quad p_{a_2}^2 = m_{a_2}^2 \quad ; \quad p_{b_1}^2 = m_{b_1}^2 \quad ; \quad p_{b_2}^2 = m_{b_2}^2 \quad [6]$$

(que constituyen otras 4 ecuaciones).

Finalmente, se tendrá:

$$\text{número de variables} = 16 - 6 - 4 - 4 = 2$$

- 42.19.** La paridad de un sistema de *dos* partículas (A, B) viene dado por: $P = \eta_A \eta_B (-1)^\ell$, donde η_A, η_B son las paridades intrínsecas y ℓ el momento angular orbital relativo. La paridad intrínseca es igual a +1 o -1. Luego:

$$P(\text{inicial}) = P(\pi^- + d) = \eta_{\pi^-} \eta_d (-1)^\circ = \eta_{\pi^-}$$

dado que la captura del π^- por d es en onda $s(\ell = 0)$ y $\eta_d = 1$ ($\eta_d = \eta_p \eta_n \times (-1)^\circ = 1$ en virtud de (b) y (c))

$$P(\text{final}) = P(nn) = \eta_n^2 (-1)^{\ell_{\text{final}}} = (-1)^{\ell_{\text{final}}}$$

Como el proceso es fuerte, se conservará la paridad:

$$\eta_{\pi^-} = (-1)^{\ell_{\text{final}}}$$

Por tanto, para obtener la paridad intrínseca del π^- , basta hallar el momento angular orbital relativo entre los dos neutrones. Para ello, recordemos que el momento angular *total* (J) ha de conservarse: $J_{\text{inicial}} = 1$ ($\ell_{\text{inicial}} = 0$; $s_{\text{inicial}} = 1$, pues

$s_{\pi^-} = 0, s_d = 1$; luego J_{final} habrá de ser igual a 1. Dado que $s_{\text{final}} = 1, 0$ ($s_n = 1/2$), los posibles valores de ℓ_{final} serán:

$$\text{Para } s_{\text{final}} = 1 \rightarrow \ell_{\text{final}} = 2, 1, 0 \quad ; \quad s_{\text{final}} = 0 \rightarrow \ell_{\text{final}} = 1$$

Pero ahora, bajo el intercambio de un neutrón por otro, tenemos que las funciones de onda orbitales y los estados de espín del sistema de las dos partículas se comportan como:

$$\begin{array}{ll} \ell = 2 \text{ simétrica} & s = 1 \text{ simétrico} \\ \ell = 1 \text{ antisimétrica} & s = 0 \text{ antisimétrico} \\ \ell = 0 \text{ simétrica} & \end{array}$$

y, al ser el neutrón un fermión por el principio de exclusión de Pauli, sólo es posible:

$$\ell_{\text{final}} = 1 \quad , \quad s_{\text{final}} = 1$$

para que el estado de los dos neutrones sea totalmente antisimétrico. Finalmente:

$$\eta_{\pi^-} = (-1)^1 = -1$$

42.20. Los estados de isospín $|I I_3\rangle$ asociados a las partículas son:

$$|d\rangle = |0 \ 0\rangle \quad |p\rangle = |1/2 \ 1/2\rangle \quad |\pi^+\rangle = |1 \ 1\rangle^* \quad |\pi^0\rangle = |1 \ 0\rangle$$

$$a) \quad |i\rangle = |p + p\rangle = |1/2 \ 1/2\rangle \otimes |1/2 \ 1/2\rangle = |1 \ 1\rangle$$

$$|f\rangle = |d + \pi^+\rangle = |0 \ 0\rangle \otimes |1 \ 1\rangle = |1 \ 1\rangle$$

Luego la amplitud de probabilidad:

$$A_{(a)} = \langle 1 \ 1 | H | 1 \ 1 \rangle \equiv A^1$$

es vía isospín igual a 1.

$$b) \quad |i\rangle = |n + p\rangle = |1/2 \ -1/2\rangle \otimes |1/2 \ 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1 \ 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |0 \ 0\rangle$$

$$|f\rangle = |d + \pi^0\rangle = |0 \ 0\rangle \otimes |1 \ 0\rangle = |1 \ 0\rangle$$

* En realidad, según el criterio de Condon-Shortley, se tiene (véase bibliografía) la siguiente asignación de estados:

$$|\pi^+\rangle = -|1 \ 1\rangle \quad , \quad |\pi^0\rangle = |1 \ 0\rangle \quad , \quad |\pi^-\rangle = |1 \ -1\rangle$$

pero el signo - del estado $|\pi^+\rangle$ no afecta al resultado final entre secciones eficaces.

donde se ha hecho uso de las tablas de coeficientes de Clebsch-Gordan. La amplitud de probabilidad vendrá dada por:

$$A_{(b)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 1\ 0 | H | 1\ 0 \rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} A^1$$

pues $\langle 0\ 0 | H | 1\ 0 \rangle = 0$ (H no puede conectar $I = 0$ con $I = 1$, dado que las interacciones fuertes conservan isospín).

Finalmente, puesto que la sección eficaz es proporcional al módulo al cuadrado de la amplitud correspondiente:

$$\frac{\sigma(p + p \rightarrow d + \pi^+)}{\sigma(n + p \rightarrow d + \pi^0)} = \frac{|A_{(a)}|^2}{|A_{(b)}|^2} = 2$$

Nota: este ejercicio es una aplicación elemental del Teorema de Wigner-Eckart, donde el operador que conecta el estado inicial y el final es el Hamiltoniano fuerte (de isospín cero, es decir, que conserva isospín).

Tablas de partículas

1

Leptones (leptos: ligero). Una tabla análoga puede construirse para las antipartículas correspondientes. Los valores de la masa espín y vida media son iguales para partículas y antipartículas, pero la carga eléctrica y el número leptónico tendrán valores opuestos. El número bariónico de estas partículas es nulo.

Fecha (descubrimiento)	Partícula	Carga eléctrica	Masa (MeV/c ²)	Espín	Vida media (segundos)	Número (leptónico)
1897	e ⁻	-1	0.51	1/2	Estable	L _e = 1
1953	ν _e	0	*	1/2	**	L _e = 1
1936	μ ⁻	-1	105.66	1/2	2.2 × 10 ⁻⁶	L _μ = 1
1961	ν _μ	0	*	1/2	**	L _μ = 1
1975	τ	-1	1777	1/2	3 × 10 ⁻¹³	L _τ = 1
2000	ν _τ	0	*	1/2	**	L _τ = 1

En Física de Altas Energías se expresan las masas en unidades de energía de acuerdo con la equivalencia siguiente entre masa y energía: $E = mc^2$. En todas las tablas, la carga eléctrica viene dada en unidades del valor absoluto de la carga del electrón. * Experimentalmente, se estima la cota superior de las masas de los neutrinos en 2 eV (a partir de datos cosmológicos sería de 0.29 eV). ** La oscilación de neutrinos permite la transición de un tipo de neutrino a otro.

2

Bariones estables (hadrones) (hadros: fuerte; baryos: pesado). Las partículas de la tabla tienen número bariónico igual a la unidad. Una tabla análoga se puede construir para las antipartículas correspondientes; los valores de la masa, espín y la vida media son iguales a los de las correspondientes partículas; las cargas eléctricas tienen valores opuestos y el número bariónico sería igual a -1. En cuanto a los constituyentes, basta sustituir quarks por antiquarks (u → ū, etc.). La paridad intrínseca de las partículas de la tabla es igual a 1, y la de las antipartículas correspondientes igual a (-1).

Partícula	Masa (MeV/c ²)	Espín	Vida media (segundos)	Composición en quarks	Carga eléctrica
p	938.27	1/2	~10 ³² años	u u d	1
n	939.57	1/2	880.1 ± 1.1 s	u d d	0
Λ ⁰	1115.7	1/2	2.6 × 10 ⁻¹⁰	u d s	0
Σ ⁺	1189.4	1/2	0.8 × 10 ⁻¹⁰	u u s	1
Σ ⁰	1192.5	1/2	7.4 × 10 ⁻²⁰	u d s	0
Σ ⁻	1197.4	1/2	1.5 × 10 ⁻¹⁰	d d s	-1
Ξ ⁰	1314.9	1/2	2.9 × 10 ⁻¹⁰	u s s	0
Ξ ⁻	1321.3	1/2	1.6 × 10 ⁻¹⁰	d s s	-1
Ω ⁻	1672.4	3/2	0.8 × 10 ⁻¹⁰	s s s	-1
Λ _c ⁺	2284.9	1/2	0.2 × 10 ⁻¹²	u d c	1

3

Mesones estables (hadrones). Los mesones tienen número bariónico igual a cero. La paridad intrínseca de las partículas de la tabla es igual a (-1).

Partícula (antipartícula)	Masa (MeV/c ²)	Espín	Composición en quarks	Vida media (segundos)	Carga eléctrica
π ⁺ (π ⁻)	139.57	0	$\bar{d}u$ ($\bar{u}d$)	2.6 × 10 ⁻⁸	1 (-1)
π ⁰	134.97	0	$\bar{u}u/\bar{d}d$	0.8 × 10 ⁻¹⁶	0
K ⁻ (K ⁺)	493.6	0	$\bar{u}s$ ($u\bar{s}$)	1.2 × 10 ⁻⁸	-1 (1)
\bar{K}^0 (K ⁰)	497.6	0	$\bar{d}s$ ($d\bar{s}$)	0.9 × 10 ⁻¹⁰ (K _S)	0
η	547.4	0	$\bar{u}u/\bar{d}d/\bar{s}s$	5.2 × 10 ⁻⁸ (K _L) 0.5 × 10 ⁻¹⁸	0

Las partículas π⁰ y η coinciden con sus antipartículas. La notación $\bar{u}u/\bar{d}d$ para π⁰, por ejemplo, quiere decir que π⁰ tiene una probabilidad de estar formado bien por \bar{u} y u o bien por \bar{d} y d. La interpretación de esa notación para otros casos es similar.

4

Resonancias mesónicas. Para una tabla exhaustiva, véase bibliografía. Su número bariónico es nulo. Su paridad intrínseca es igual a (-1).

Partícula	Carga eléctrica	Masa (MeV/c ²)	Espín	Vida media (segundos)	Composición en quarks
ρ^-	-1	770	1	0.4×10^{-23}	$d\bar{u}$
ρ^0	0				$u\bar{u}/d\bar{d}$
ρ^+	1				$\bar{d}u$
ω	0	782	1	0.8×10^{-22}	$u\bar{u}/d\bar{d}/s\bar{s}$
η'	0	958	0	0.3×10^{-20}	$u\bar{u}/d\bar{d}/s\bar{s}$
Φ	0	1020	1	1.5×10^{-22}	$u\bar{u}/d\bar{d}/s\bar{s}$

5

Resonancias bariónicas. Para una tabla exhaustiva, véase bibliografía. Su número bariónico es igual a la unidad. Su paridad intrínseca es igual a 1.

Partícula	Carga eléctrica	Masa (MeV/c ²)	Espín	Vida media (segundos)	Composición en quarks
Δ^{++}	2	1232	3/2	0.5×10^{-23}	$u u u$
Δ^+	1				$d u u$
Δ^0	0				$d d u$
Δ^-	-1				$d d d$
Σ^{*+}	+1	1385	3/2	0.2×10^{-22}	$u u s$
Σ^{*0}	0				$d u s$
Σ^{*-}	-1				$d d s$
Ξ^{*0}	0				$u s s$
Ξ^{*-}	-1	1530	3/2	0.7×10^{-22}	$d s s$

6

Mesones en cuya composición en quarks intervienen el quark y el antiquark «encantados». Su número bariónico es nulo. Su paridad intrínseca es igual a (-1).

Partículas (antipartículas)	Masa (MeV/c ²)	Espín	Vida media	Composición en quarks	Carga eléctrica
D^0 (\bar{D}^0)	1864.5	0	4.2×10^{-13}	$c \bar{u}$ ($\bar{c} u$)	0
D^- (D^+)	1869.3	0	10.6×10^{-13}	$\bar{c} d$ ($c \bar{d}$)	-1 (1)
D_s^- (D_s^+)	1968.5	0	4.6×10^{-13}	$\bar{c} s$ ($c \bar{s}$)	-1 (1)
J/Ψ	3096.9	1	0.7×10^{-20}	$c \bar{c}$	0

7

Mesones en cuya composición en quarks intervienen el quark y el antiquark con «belleza». Su número bariónico es nulo. Su paridad intrínseca es igual a (-1) .

Partículas (antipartículas)	Masa (MeV/c ²)	Espín	Vida media	Composición en quarks	Carga eléctrica
B ⁰ (\bar{B}^0)	5279.2	0	1.5×10^{-12}	d \bar{b} (\bar{d} b)	0
B ⁻ (B ⁺)	5278.9	0	1.6×10^{-12}	b \bar{u} (\bar{b} u)	-1 (1)
Υ	9460.4	1	0.12×10^{-19}	b \bar{b}	0

8

Quarks	Masa (Gev/c ²)	Espín	I	I ₃	Q	B	S	C	B	T
u	$1.8 - 3 \times 10^{-3}$	1/2	1/2	1/2	2/3	1/3	0	0	0	0
d	$4.5 - 5.5 \times 10^{-3}$	1/2	1/2	-1/2	-1/3	1/3	0	0	0	0
s	$90 - 100 \times 10^{-3}$	1/2	0	0	-1/3	1/3	-1	0	0	0
c	$1.25 - 1.3$	1/2	0	0	2/3	1/3	0	1	0	0
b	$4.2 - 4.7$	1/2	0	0	-1/3	1/3	0	0	-1	0
t	$136.7 - 138.3$	1/2	0	0	2/3	1/3	0	0	0	1

Quarks: u (*up*), d (*down*), s (*strange*), c (*charm*), b (*bottom*) y t (*top*). La tabla para los antiquarks (\bar{u} , \bar{d} , etc.) es análoga, salvo que los valores de I₃ (tercera componente de isospín), Q (carga eléctrica), B (número bariónico), S (extrañeza), C («encanto»), B («belleza») y T («verdad») sean opuestos; los valores de la masa, espín e isospín son iguales a los de los quarks correspondientes.

APÉNDICE

- Unidades y cálculos en física cuántica.
- Formalismo matemático en mecánica cuántica.
- Funciones especiales y tablas.
- Cinemática relativista.
- Interferencia de un fotón consigo mismo.
- Interferencia y difracción de neutrones.
- Teorías de variables ocultas. Resultados experimentales.
- Bandas en una dimensión: modelo de Krönig-Penney.
- Superconductores de alta temperatura crítica.
- Efecto Hall cuántico.
- El láser.
- La energía nuclear de fisión.
- La energía nuclear de fusión.
- Fuentes. Aceleradores. Detectores.
- Unidades radiológicas y efectos biológicos de las radiaciones ionizantes.
- Solución numérica de la ecuación de Schrödinger.
- La oscilación de los neutrinos.
- Información cuántica: una introducción elemental.
- Nanoestructuras y física cuántica.
- Atrapamiento y manipulación de iones, átomos y fotones individuales.

A

Unidades y cálculos en física cuántica

Carlos Sánchez del Río

A.1. UNIDADES ESPECIALES

En física cuántica es costumbre utilizar algunas unidades que no pertenecen al sistema internacional (SI). Son unidades cómodas y muy arraigadas, por lo cual su conocimiento es imprescindible.

Como unidades de longitud se usan el angstrom (\AA), que vale 0.1 nm, el fermi (F), que equivale a 1 fm, y la unidad x (ux), que se emplea como estándar en el estudio de los rayos X; su valor depende del cristal de referencia, pero se acerca mucho a 0.1 pm.

A menudo se usa el barn como unidad de sección eficaz. Es una unidad de superficie cuyo valor es 10^{-28} m^2 .

Para medir masas se emplea frecuentemente la unidad de masa atómica (u), que es la dozava parte de la masa de un átomo de ^{12}C . Vale, aproximadamente, $1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}$.

Las energías se miden siempre en electronvoltios (eV). Un electronvoltio es la energía cinética que gana o pierde un electrón que se mueve en el vacío entre dos puntos cuya diferencia de potencial eléctrico es un voltio. Su valor aproximado es $1.60 \times 10^{-19} \text{ J}$. Se usan mucho sus múltiplos: keV (10^3 eV), MeV (10^6 eV), GeV (10^9 eV), etc.

La energía en reposo de una partícula de masa m es mc^2 , según la celebrada fórmula de Einstein (c es la velocidad de la luz en el vacío). Si dicha energía se mide en MeV, resulta conveniente decir que el mismo número expresa la masa de la partícula en MeV/c^2 . Del mismo modo, si el momento de una partícula es p , puede medirse cp en MeV y decirse que el mismo número expresa el momento en MeV/c . En el apartado 34.4 pueden verse las ventajas de estas unidades.

Como las partículas que se estudian en física cuántica se mueven en el vacío, las fórmulas quedan más sencillas si se utilizan las unidades eléctricas del sistema simétrico o de Gauss. Por eso es muy común medir las cargas eléctricas en unidades electrostáticas (u.e.s.) y los campos magnéticos en gauss (G). Una u.e.s. de carga vale, aproximadamente, $(1/3) \times 10^{-29} \text{ C}$, y un gauss es igual a 10^{-4} T . Para medir los momentos dipolares eléctricos de las moléculas se usa el debye (D), que equivale a $10^{-18} \text{ (u.e.s. de carga) \cdot cm}$, o sea, aproximadamente, $(1/3) \times 10^{-29} \text{ C} \cdot \text{m}$.

Unidades especiales

Magnitud	Unidad	Símbolo	Equivalencia
Longitud	angstrom	Å	0.1 nm = 10 ⁻⁸ cm
	fermi	F	1 fm = 10 ⁻¹³ cm
	unidad x	ux	≈ 0.1 pm = 10 ⁻¹¹ cm
Superficie	barn	b	100 fm ² = 10 ⁻²⁴ cm ²
Masa	unidad atómica de masa	u	1.66054 × 10 ⁻²⁷ kg
Energía	electronvoltio	eV	1.60218 × 10 ⁻¹⁹ J
Carga eléctrica	unidad electrostática	u.e.s.	10/29979245800 C
Campo magnético	gauss	G	10 ⁻⁴ T

A.2. CONSTANTES FUNDAMENTALES

En las fórmulas que resultan de la aplicación de la teoría cuántica aparece una serie de constantes que no son producto de la teoría. Tales constantes (velocidad de la luz en el vacío, carga eléctrica elemental, constante de Planck, masas de las partículas, etc.) son necesarias para la evaluación numérica de los resultados y sus valores se presentan en la tabla adjunta. Estos valores se han obtenido a partir de los datos más recientes (de 1986), pero se presentan sólo las cifras más seguras; la imprecisión debe ser menor que una unidad del último dígito que se muestra. Los valores fijados por convenio (c , ϵ_0 , μ_0) son, evidentemente, exactos.

Constantes fundamentales

Magnitud	Símbolo	Valor
Velocidad de la luz en el vacío	c	2.99792458 × 10 ⁸ m/s
Permeabilidad del vacío	μ_0	4π × 10 ⁻⁷ H/m
Permitividad del vacío	ϵ_0	1/c ² μ ₀ F/m
Carga eléctrica elemental	e	1.60218 × 10 ⁻¹⁹ C
Constante de Planck	h	4.80321 × 10 ⁻¹⁰ u.e.s.
	$\hbar = h/2\pi$	6.62608 × 10 ⁻³⁴ J × s
Masa del electrón	m_e	1.054573 × 10 ⁻³⁴ J × s
Masa del protón	m_p	9.10939 × 10 ⁻³¹ kg
		0.51100 MeV/c ²
Masa del neutrón	m_n	1.6726 × 10 ⁻²⁷ kg
		938.272 MeV/c ²
Unidad de masa atómica	u	1836,153 m _e
		1.66054 × 10 ⁻²⁷ kg
Número de Avogadro	N_A	939.494 MeV/c ²
		6.02214 × 10 ²³ mol ⁻¹
Constante de Boltzmann	k	931.494 MeV/c ²
		1.3806 × 10 ⁻²³ J × K ⁻¹

A.3. UNIDADES DE GAUSS

Recibe este nombre un sistema cegesimal de unidades electromagnéticas tan coherente como el sistema internacional (SI) y muy conveniente para estudiar la dinámica de las partículas que se mueven en el vacío. Las unidades fundamentales son tres: el centímetro (cm), el gramo (g) y el segundo (s). La unidad de velocidad es el cm/s, la de fuerza es la dina (1 dyn = 10^{-5} N) y la de energía es el ergio (1 erg = 10^{-7} J).

Para entender la diferencia entre las unidades SI y las de Gauss recordemos que dos cargas eléctricas idénticas q a distancia r en el vacío se repelen con una fuerza eléctrica

$$F = k \frac{q^2}{r^2} \quad [\text{A.1}]$$

siendo k una constante que depende de las unidades elegidas. Si las dos cargas se mueven con una velocidad v pequeña en dirección perpendicular a la recta que pasa por ambas, además de la fuerza citada aparece una fuerza atractiva magnética

$$F' = k \frac{v^2 q^2}{c^2 r^2} \quad [\text{A.2}]$$

siendo k la misma constante que antes y c la velocidad de la luz en el vacío. Se observa también la fuerza magnética si las cargas permanecen quietas y es el observador quien se mueve, porque se trata de un efecto relativista (por eso aparece v^2/c^2). Las fórmulas anteriores (válidas sólo para velocidades pequeñas) son expresión de leyes naturales cualesquiera que sean las unidades que se usen.

El sistema internacional se basa en cuatro unidades fundamentales: el metro (m), el kilogramo (kg), el segundo (s) y el amperio (A) o el coulombio. En este sistema, la unidad de velocidad es el m/s, la de fuerza es el newton (N), la de energía es el julio (J), etc. Pues bien, para que todo case hay que poner $k/c^2 = 10^{-7}$. Además, para que todo resulte más mágico, se escribe $k = (4\pi\epsilon_0)^{-1}$ y $k/c^2 = \mu_0/4\pi$. De este modo desaparece c de la fórmula anterior porque queda escondida en la relación $\epsilon_0\mu_0 = 1/c^2$.

El sistema simétrico o de Gauss se basa en tomar $k = 1$ y sin dimensiones. La fórmula [A.1] sirve para definir la unidad electrostática (u.e.s.). Carga unidad es aquella que en presencia de otra idéntica en el vacío y a un centímetro de distancia da lugar a una repulsión mutua de una dina. Esta unidad equivale a $10/c$ coulombios si se expresa c en cm/s (es decir, aproximadamente $1 \text{ u.e.s.} = (1/3) \times 10^{-9} \text{ C}$) y no tiene nombre especial. Algunos le han dado nombres como statcoulomb o franklin.

En este sistema, la velocidad de la luz en el vacío permanece en [A.2] como debe ser; de este modo resulta evidente que $F' \ll F$. Obsérvese que en las fórmulas [A.1] y [A.2] no hay factores 4π porque se recomienda escribir las ecuaciones de Maxwell en forma no racionalizada si se usa este sistema de unidades.

El sistema de Gauss tiene la ventaja de que en el vacío los dos vectores eléctricos (\mathbf{E} y \mathbf{D}) coinciden y los dos magnéticos (\mathbf{B} y \mathbf{H}) también. En algunas fórmulas aparece la constante natural c , pero se evitan las constantes artificiales ϵ_0 y μ_0 .

Para pasar de una fórmula en unidades SI a la fórmula correspondiente en unidades de Gauss hay una regla muy sencilla: sustitúyase ϵ_0 por $1/4\pi$ y B por B/c (recuérdese además que $\epsilon_0\mu_0 = 1/c^2$). No hay regla para la transformación inversa.

A.4. CÁLCULOS

En física cuántica, la evaluación numérica de las fórmulas es muy engorrosa y se presta a equivocaciones porque algunas constantes son muy pequeñas (e , \hbar , m_e , ...) y otra muy grande (c); además, los factores de conversión son raros ($1 \text{ eV} = 1.60 \times 10^{-12} \text{ erg}$, por ejemplo). En muchas ocasiones se simplifican los cálculos si se reduce todo a tres constantes:

1. Velocidad de la luz en el vacío:

$$c = 2.99792458 \times 10^{10} \text{ cm/s}$$

2. Constante de estructura fina (número adimensional)

$$\frac{e^2}{\hbar c} = 1/137.0360$$

3. Producto sin significación especial:

$$\hbar c = 1.973270 \times 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{cm}$$

Si bastan cálculos aproximados, todos los datos necesarios se resumen en la tabla:

$c = 3 \times 10^{10} \text{ cm/s}$	$m_e c^2 = 0.51 \text{ MeV}$
$\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$	$m_p c^2 = 938 \text{ MeV}$ $m_n c^2 = 939 \text{ MeV}$
$\hbar c = 1.97 \text{ eV} \times 10^{-5} \text{ cm} = 1.97 \text{ keV} \cdot \text{Å} = 197 \text{ MeV} \cdot \text{F}$	

Antes de poner algunos ejemplos conviene señalar que el uso de la tabla anterior equivale a la utilización de tres magnitudes básicas: una longitud, una velocidad y una energía. Además, la tabla está preparada para fórmulas escritas en unidades de Gauss. Si se desea evaluar una fórmula en unidades SI, transfórmese primero como se indica al final del apartado A.3 de este apéndice.

Supongamos que deseamos calcular la longitud de onda de un neutrón de 2.5 MeV de energía cinética T . Recurriendo a la tabla anterior, escribiremos

$$\lambda = \frac{h}{p} = 2\pi \frac{\hbar c}{pc} = 2\pi \frac{197}{pc} \text{ F} \quad [\text{A.3}]$$

y calcularemos $pc = \sqrt{2mc^2T} = 68,5 \text{ MeV}$, que pondremos en la fórmula anterior para obtener $\lambda = 1,8 \times 10^{-12} \text{ cm}$. Si nos interesase calcular la longitud de onda de un electrón de la misma energía cinética $T = 2,5 \text{ MeV}$, la fórmula [A.3] sigue siendo válida, pero pc debe calcularse con la expresión relativista

$$pc = \sqrt{T(T + 2mc^2)}$$

que nos da $pc = 2,97 \text{ MeV}$ y, por tanto, $\lambda = 4,17 \times 10^{-11} \text{ cm}$.

Calculemos ahora el radio clásico del electrón definido por $r_0 = e^2/mc^2$. Basta escribir

$$r_0 = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\hbar c}{mc^2}$$

y sustituir los valores de la tabla para obtener $r_0 = 2,82 \times 10^{-13} \text{ cm}$. Del mismo modo podemos calcular lo que queramos.

Hay, sin embargo, ocasiones en que este método de cálculo no interesa particularmente. Intentemos calcular el magnetón de Bohr

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc}$$

Fácilmente, podemos escribir

$$\mu = \sqrt{\frac{\hbar c}{137}} \frac{\hbar c}{2mc^2} = 7,4 \times 10^{-15} (\text{eV}) \cdot (\text{eV}^{1/2} \cdot \text{cm}^{-3/2})^{-1}$$

Este resultado es correcto, pero poco útil porque se refiere a la unidad de campo magnético $\text{eV}^{1/2} \cdot \text{cm}^{-3/2}$, que nadie usa (compruebe el lector que un gauss es unas 790 000 veces mayor que esta unidad).

A.5. OTROS SISTEMAS DE UNIDADES

A pesar de lo recomendable que resulta el método de evaluación numérica de una fórmula expuesto en el apartado anterior, la utilización de los números poco accesibles que expresan las constantes fundamentales sigue siendo impráctica cuando para llegar al resultado final se recurre al cálculo numérico porque los métodos analíticos son imposibles. Para tales cálculos resulta muy conveniente usar unidades adecuadas al problema de que se trate. Por unidades adecuadas entendemos aquellas sobre cuya base las magnitudes que intervienen tienen valores dados por números sin extravagantes potencias de diez.

Para el cálculo de átomos y moléculas se usan las unidades atómicas introducidas por Hartree. En este sistema las unidades básicas son la masa del electrón (m), la carga eléctrica elemental (e) y la constante de Planck reducida ($\hbar = h/2\pi$). A partir de ellas, el cálculo dimensional permite calcular las demás unidades que se muestran en la tabla.

Unidades atómicas ($m = 1, e = 1, \hbar = 1$)

Magnitud	Unidad	Equivalencia
Longitud	\hbar^2/me^2	5.292×10^{-9} cm
Masa	m	9.11×10^{-28} g
Tiempo	\hbar^3/me^4	2.419×10^{-17} s
Velocidad	e^2/\hbar	2.188×10^8 cm · s ⁻¹
Energía	me^4/\hbar^2	4.360×10^{-11} erg = 27.21 eV
Fuerza	m^2e^6/\hbar^4	8.239×10^{-3} dyn
Carga eléctrica	e	4.803×10^{-10} u.e.s. = 1602×10^{-19} C
Potencial eléctrico	me^3/\hbar^2	9.077×10^{-2} u.e.s. = 27.21 V
Campo eléctrico	m^2e^5/\hbar^4	1.715×10^7 u.e.s. = 5142×10^9 V · cm ⁻¹
Dipolo eléctrico	\hbar^2/me	2.542×10^{-18} u.e.s.
Inducción magnética	m^2e^5/\hbar^4	1.715×10^7 G
Momento magnético	\hbar^2/me	2.542×10^{-18} erg · G ⁻¹ = 1586×10^{-6} eV · G ⁻¹

El estudio de las partículas subnucleares se basa en la teoría cuántica relativista, por eso convienen sistemas de unidades llamados naturales en los cuales valgan uno la constante de Planck reducida (\hbar) y la velocidad de la luz en el vacío (c). Por desgracia, no puede tomarse la carga elemental como tercera unidad porque no es independiente de las dos anteriores ($e^2/\hbar c = 1/137$). Unas veces se toma una masa como tercera unidad, en cuyo caso las demás unidades son las siguientes (las equivalencias numéricas están calculadas tomando como unidad, la masa del electrón):

Unidades naturales ($\hbar = 1, e = 1, m = 1$)

Magnitud	Unidad	Equivalencia
Longitud	\hbar/mc	3.8616×10^{-11} cm
Masa	m	9.1095×10^{-28} g
Tiempo	\hbar/mc^2	1.2881×10^{-21} s
Velocidad	c	$2.99792458 \times 10^{10}$ cm · s ⁻¹
Energía	mc^2	8.1872×10^{-7} erg = 511 keV
Fuerza	m^2c^3/\hbar	21.202 dyn
Carga eléctrica	$(\hbar c)^{1/2}$	5.6228×10^{-9} u.e.s.
Potencial eléctrico	$(m^2c^3/\hbar)^{1/2}$	145.6 u.e.s. = 43.65 kV
Campo eléctrico	$(m^4c^5/\hbar^3)^{1/2}$	3.7707×10^{12} u.e.s.
Dipolo eléctrico	$(\hbar^3/m^2c)^{1/2}$	2.1713×10^{-19} u.e.s.
Inducción magnética	$(m^4c^5/\hbar^3)^{1/2}$	3.7707×10^{12} G
Momento magnético	$(\hbar^3/m^2c)^{1/2}$	2.1713×10^{-19} erg · G ⁻¹

Nota: la letra m representa la masa del electrón.

Otras veces se toma el electrónvoltio (eV) como tercera unidad básica. En este caso las demás unidades son las que se muestran a continuación.

Unidades naturales ($\hbar = 1, c = 1, eV = 1$)

Magnitud	Unidad	Equivalencia
Longitud	$\hbar c/eV$	1.9733×10^{-5} cm
Masa	eV/c^2	1.7827×10^{-33} g
Tiempo	\hbar/eV	6.5822×10^{-16} s
Velocidad	c	$2.99792458 \times 10^{10}$ cm · s ⁻¹
Energía	eV	1.6022×10^{-12} erg
Fuerza	$(eV)^2/\hbar c$	8.1194×10^{-8} dyn
Carga eléctrica	$(\hbar c)^{1/2}$	5.6228×10^{-9} u.e.s.
Potencial eléctrico	$eV/(\hbar c)^{1/2}$	2.8495×10^{-4} u.e.s. = 8.5423×10^{-2} V
Campo eléctrico	$[(eV)^4/\hbar^3 c^3]^{1/2}$	14.4401 u.e.s. = 4.3290 kV · cm ⁻¹
Dipolo eléctrico	$[\hbar^3 c^3/(eV)^2]^{1/2}$	1.1095×10^{-13} u.e.s.
Inducción magnética	$[(eV)^4/\hbar^3 c^3]^{1/2}$	14.4401 G
Momento magnético	$[\hbar^3 c^3/(eV)^2]^{1/2}$	1.1095×10^{-13} erg · G ⁻¹

Muchos autores omiten las letras \hbar y c de la segunda columna de las dos últimas tablas porque imponen que \hbar y c no tengan dimensiones. De este modo, el mismo símbolo puede representar distintas magnitudes. Con ello todo queda más oscuro, pero les gusta.

B

Formalismo matemático en mecánica cuántica

Antonio Muñoz Sudupe

No trata este apéndice de introducir en todo su rigor los conceptos matemáticos subyacentes en la interpretación más aceptada de la Mecánica Cuántica, simplemente trata de esbozar, sin demostraciones, las notaciones y el lenguaje que se utilizan en gran parte del libro.

Desde un punto de vista matemático, el sistema físico bajo estudio tiene asociado un espacio de Hilbert \mathcal{H} , es decir, un espacio vectorial complejo dotado de un producto escalar. Los estados del sistema, sobre los que la información sea máxima, son vectores en este espacio, que denotamos $|\Psi\rangle$ y se denominan *kets*. Los vectores en el dual de \mathcal{H} , es decir, los funcionales lineales de \mathcal{H} en \mathbb{C} se denotan $\langle\Psi|$ y se denominan *bras*. Existe una correspondencia biunívoca y antilineal entre bras y kets. El origen de las denominaciones bra y ket proviene de la palabra inglesa *bracket* (paréntesis) en clara analogía con las dos partes que forman el producto escalar.

El producto escalar definido en \mathcal{H} tiene las siguientes propiedades:

i) Lineal en el vector de la derecha

$$\langle\Psi_1|\lambda\Psi_2 + \mu\Psi_3\rangle = \lambda\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle + \mu\langle\Psi_1|\Psi_3\rangle$$

ii) $\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = \langle\Psi_2|\Psi_1\rangle^*$

donde * significa conjugación compleja.

Si, en un espacio de dimensión n , asociamos a cada ket en una base dada un vector columna con n filas (matriz $n \times 1$), los bras se representan, en la base correspondiente, como vectores fila con n columnas (matrices $1 \times n$). El bra correspondiente a un ket dado es la matriz traspuesta con elementos conjugados.

El producto escalar es, en esa representación, el producto matricial del vector fila por el vector columna, obteniéndose como resultado otra matriz con dimensiones: $(1 \times n) \cdot (n \times 1) = 1 \times 1$, que no es otra cosa que un número complejo.

A partir de las dos propiedades del producto escalar es fácil deducir la antilinealidad del producto escalar en el vector de la izquierda, es decir,

$$\langle\lambda\Psi_1 + \mu\Psi_2|\Psi_3\rangle = \lambda^*\langle\Psi_1|\Psi_3\rangle + \mu^*\langle\Psi_2|\Psi_3\rangle$$

Los observables del sistema físico vienen descritos por operadores autoadjuntos ($A = A^\dagger$) en \mathcal{H} y satisfacen, por tanto, la relación

$$\langle \Psi_1 | A^\dagger | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | A | \Psi_1 \rangle^*$$

En la representación matricial mencionada previamente los operadores autoadjuntos, que describen los observables, son matrices $n \times n$ que verifican

$$A^\dagger = (A^t)^* = A$$

donde t significa trasposición, esto es, cambio de filas por columnas en la matriz A .

El espectro discreto de un operador autoadjunto A , $\sigma_p(A)$ es el conjunto de los números a (reales) que satisfacen

$$A|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle \tag{B.1}$$

Para $|\Psi\rangle$ distinto del vector nulo, a se llama *valor propio* o *autovalor* y $|\Psi\rangle$ *vector propio* o *autovector*.

Los resultados de las medidas del observable A , en estados descritos por vectores $|\Psi\rangle$, sólo pueden ser alguno de sus autovalores.

Es fácil probar que el conjunto de autovectores asociados a un autovalor forma un subespacio vectorial de \mathcal{H} . Cuando la dimensión del subespacio es superior a 1 se dice que el autovalor es *degenerado*, y a la dimensión del mismo se le llama orden de la degeneración o multiplicidad del autovalor.

Puede probarse que autovectores correspondientes a autovalores distintos son ortogonales y que, además, siempre es posible elegir los autovectores degenerados de manera que sean ortonormales, utilizando, por ejemplo, para ello el procedimiento de Gram-Schmidt.

Tenemos así un conjunto, quizá infinito, de autovalores a_1, \dots, a_n, \dots y un conjunto de autovectores asociados ortonormalizados

$$|\Psi_1^1\rangle, \dots, |\Psi_1^{p_1}\rangle, \dots, |\Psi_n^1\rangle, \dots, |\Psi_n^{p_n}\rangle, \dots$$

siendo p_i la degeneración del autovalor a_i .

Para operadores compactos autoadjuntos puede demostrarse que cualquier vector $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ se puede desarrollar como

$$|\Psi\rangle = \sum_n \sum_i \lambda_{ni} |\Psi_n^{(i)}\rangle$$

donde la suma en n recorre todos los autovalores distintos y la suma en i el orden de degeneración del autovalor n -simo. Los coeficientes del desarrollo son

$$\lambda_{ni} = \langle \Psi_n^{(i)} | \Psi \rangle$$

La condición de normalización para $|\Psi\rangle$ se escribe ahora para los coeficientes complejos λ_{ni} como

$$\sum_n \sum_i |\lambda_{ni}|^2 = 1$$

Cada uno de los términos de la serie anterior puede considerarse como la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado $|\Psi_n^{(i)}\rangle$, o, si se prefiere, $\sum_i |\lambda_{ni}|^2$ es la probabilidad de que al medir el observable A en el estado $|\Psi\rangle$ se encuentre el autovalor a_n .

Puede definirse proyector P_n sobre el subespacio asociado al autovalor λ_n como:

$$P_n = \sum_{i=1}^{p_n} |\Psi_n^{(i)}\rangle \langle \Psi_n^{(i)}|$$

siendo p_n la degeneración del autovalor λ_n . Es fácil probar que P_n verifica las propiedades

$$\begin{aligned} P_n^\dagger &= P_n \\ P_n^2 &= P_n \\ P_i \cdot P_j &= 0 \quad (i \neq j) \\ \mathbf{1} &= \sum_n P_n \end{aligned} \tag{B.2}$$

La última ecuación recibe el nombre de *relación de cierre*, y en ella, $\mathbf{1}$ es el operador identidad.

Dados dos observables A, B , se define su conmutador como el operador

$$[A, B] = AB - BA$$

La condición necesaria y suficiente para que dos observables tengan una base común de autoestados es que su conmutador se anule. Por ejemplo, el operador L^2 y el operador L_z , introducidos en el capítulo 11, conmutan y la base de autoestados común a ambos es $\{|l m_l\rangle\}$. Por ello, si dos observables no conmutan, no va a ser posible determinar sus valores simultáneamente y con absoluta precisión. Por ejemplo, los operadores unidimensionales x y p no conmutan y satisfacen por ello una relación de incertidumbre $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$.

A la hora de especificar los estados posibles del sistema, sobre los que la información es máxima, es extraordinariamente importante, por lo que acabamos de decir, determinar todos los observables que conmutan entre sí. Los autoestados vienen entonces etiquetados por los autovalores correspondientes a cada uno de los observables que conmutan.

Para operadores autoadjuntos, no necesariamente compactos, el análisis no es tan sencillo como el anterior. La ecuación de autovalores [B.1] tiene soluciones $|\Psi\rangle$ que no están en el espacio de Hilbert \mathcal{H} , por no tener norma finita. Los autovalores correspon-

dientes se dice que pertenecen al espectro continuo del operador A , $\sigma_c(A)$. Por ejemplo, en $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ el operador momento P tiene como ecuación de autovalores

$$P\Psi(x) = -i\hbar \frac{d\Psi}{dx} = p\Psi(x)$$

cuyas soluciones son de la forma

$$\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad [\text{B.3}]$$

Nótese que $\Psi_p(x)$ es no normalizable y que el autovalor p puede ser cualquier número real.

La generalización del desarrollo anterior para el espectro continuo se hace formalmente sustituyendo series por integrales. Así, la función de onda del sistema Ψ puede desarrollarse como

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \lambda(p) \Psi_p(x)$$

Los coeficientes del desarrollo son las transformadas de Fourier de $\Psi(x)$,

$$\lambda(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_p^*(x) \Psi(x)$$

La interpretación probabilística de $|\lambda(p)|^2$ es la de una densidad de probabilidad, $|\lambda(p)|^2 dp$ es la probabilidad de que el sistema tenga momento comprendido entre p y $p + dp$.

Para un operador autoadjunto cualquiera A con espectro discreto y continuo, las expresiones anteriores se generalizan a

$$|\Psi\rangle = \sum_n \sum_i \lambda_{ni} |\Psi_n^{(i)}\rangle + \int_{\sigma_c(A)} da \sum_i \lambda(a) |\Psi_a^{(i)}\rangle$$

donde n recorre los autovalores del espectro puntual e i la degeneración de cada autovalor tanto del discreto como del continuo. $|\Psi_n^{(i)}\rangle$ forman un conjunto de vectores ortonormalizados y $|\Psi_a^{(i)}\rangle$ son los autovectores generalizados correspondientes al espectro continuo, es decir,

$$\begin{aligned} A|\Psi_n^{(i)}\rangle &= a_n |\Psi_n^{(i)}\rangle & a_n &\in \sigma_p(A) \\ A|\Psi_a^{(i)}\rangle &= a |\Psi_a^{(i)}\rangle & a &\in \sigma_c(A) \end{aligned}$$

Las relaciones de ortogonalidad de los autovectores del discreto y continuo son distintas; así, para el discreto

$$\langle \Psi_n^{(i)} | \Psi_m^{(j)} \rangle = \delta_{nm} \delta_{ij}$$

donde δ_{kl} es la delta de Kronecker, expresión que se anula si $k \neq l$ y vale 1 cuando $k = l$.

Para los autovectores generalizados se tiene,

$$\langle \Psi_a^{(i)} | \Psi_b^{(j)} \rangle = \delta(a-b) \delta_{ij}$$

donde $\delta(a-b)$ es la delta de Dirac (véase apéndice C). Así, en el ejemplo anterior de autofunciones del operador momento en una dimensión, tenemos, usando [B.3]

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} e^{ip'x/\hbar} = \delta(p-p')$$

Utilizando las relaciones anteriores, el valor esperado de A en el estado $|\Psi\rangle$ puede escribirse como

$$\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \sum_n \sum_i a_n |\langle \Psi_n^{(i)} | \Psi \rangle|^2 + \int da \sum_i a |\langle \Psi_a^{(i)} | \Psi \rangle|^2$$

En las fórmulas anteriores se ha supuesto un índice discreto para la degeneración del espectro continuo.

Una generalización de la relación de cierre [B.2] es

$$\mathbf{1} = \sum_n \sum_i |\Psi_n^{(i)}\rangle \langle \Psi_n^{(i)}| + \int da \sum_i |\Psi_a^{(i)}\rangle \langle \Psi_a^{(i)}|$$

siendo $\mathbf{1}$ el operador identidad.

En la ecuación [B.3], y en la mayor parte del libro, se ha utilizado de manera implícita la base de autoestados en que el operador de posición X es diagonal. Es la llamada *representación de posiciones*. La función de ondas $\Psi(x)$ que representa el estado del sistema descrito por el ket $|\Psi\rangle$ viene dada por

$$\Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle$$

donde el vector $|x\rangle$ satisface la ecuación de autovalores

$$X|x\rangle = x|x\rangle$$

y la condición de ortonormalización es

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

Nótese que $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ es la función de onda que describe el estado de la partícula localizada en $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$.

Por ejemplo, para una partícula libre, la función de onda $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})$, que representa el estado de la partícula con momento \mathbf{p} , viene dada por

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} / \hbar$$

Si hubiéramos elegido la base de autoestados que diagonalizan el operador momento \mathbf{P} , entonces tendríamos la *representación de momentos*. La función de onda del sistema en el estado $|\Psi\rangle$, en esta representación, viene dada por

$$\langle \mathbf{p} | \Psi \rangle = \tilde{\Psi}(\mathbf{p})$$

La relación entre ambas representaciones es fácil de obtener haciendo uso de la relación de cierre $\mathbf{1} = \int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|$, como sigue:

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \Psi \rangle = \int d\mathbf{x} \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \Psi \rangle = \int d\mathbf{x} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} / \hbar} \Psi(\mathbf{x})$$

Por tanto, una representación es la transformada de Fourier de la otra.



Funciones especiales y tablas

Luis García Gonzalo

C.1. FUNCIÓN GAMMA

La función $\Gamma(z)$ viene definida por la integral:

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt \quad , \quad \operatorname{Re}(z) > 0$$

donde $\operatorname{Re}(z)$ es la parte real de z . De aquí, es inmediato que

$$\int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-\alpha t} dt = \frac{\Gamma(z)}{\alpha^z}$$

Fórmula de recurrencia:

$$\Gamma(z + 1) = z\Gamma(z)$$

Valores especiales:

$$\Gamma(1) = 1$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

$$\Gamma(n + 1) \equiv n! \equiv 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdots n$$

$$\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2n - 1)!!}{2^n} \sqrt{\pi}$$

donde $(2n - 1)!! \equiv 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n - 1)$ y n es un entero no negativo.

C.2. FUNCIÓN ZETA DE RIEMANN

La función $\zeta(s)$ viene definida por la serie:

$$\zeta(s) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} k^{-s} \quad , \quad \text{Re}(s) > 1$$

Expresiones en forma de integrales:

$$\begin{aligned} \zeta(s) &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx \quad , \quad \text{Re}(s) > 1 = \\ &= \frac{1}{(1 - 2^{1-s})\Gamma(s)} \int_0^{\infty} \frac{x^{s-1}}{e^x + 1} dx \end{aligned}$$

Valores especiales:

$$\begin{aligned} \zeta(1) &= \infty \\ \zeta(3/2) &\cong 2.6124 \\ \zeta(2) &= \pi^2/6 \\ \zeta(5/2) &\cong 1.3415 \\ \zeta(4) &= \pi^4/90 \end{aligned}$$

C.3. POLINOMIOS DE HERMITE

Ecuación diferencial:

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0 \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Fórmula de Rodrigues:

$$H_n(x) = e^{x^2} (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

Relaciones de ortogonalidad:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} [H_n(x)]^2 dx = \sqrt{\pi} 2^n n!$$

Fórmulas de recurrencia:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$$

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$$

Expresión explícita:

$$H_n(x) = n! \sum_{m=0}^{n/2} \frac{(-1)^m}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m}$$

donde, para simplificar la notación, el límite superior del sumatorio ($n/2$) representa el valor $n/2$ si n es par y $(n-1)/2$ si n es impar.

Función generatriz:

$$e^{2xs-s^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} s^n$$

A partir de la función generatriz se pueden obtener todas las propiedades de los polinomios: ecuación diferencial, fórmula de Rodrigues, fórmulas de recurrencia e integrales. Como ilustración, vamos a calcular la siguiente integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n^2(x) e^{-x^2} x^2 dx$$

Para ello, calculamos

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{2xs-s^2} e^{2xt-t^2} e^{-x^2} x^2 dx &= e^{2st} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-s-t)^2} x^2 dx = \\ &= e^{2st} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} (u+s+t)^2 du = \sqrt{\pi} e^{2st} \left[\frac{1}{2} + (s+t)^2 \right] \end{aligned}$$

Sustituyendo las funciones generatrices y la exponencial e^{2st} por sus desarrollos, obtenemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} s^n \cdot \sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_m(x)}{m!} t^m e^{-x^2} x^2 dx = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!} \left[\frac{1}{2} + s^2 + 2st + t^2 \right]$$

de donde, para $n = m$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H_n^2(x)}{(n!)^2} e^{-x^2} x^2 dx = \sqrt{\pi} \left(\frac{2^n}{2n!} + 2 \frac{2^{n-1}}{(n-1)!} \right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} H_n^2(x) e^{-x^2} x^2 dx = 2^{n-1} n! \sqrt{\pi} (2n+1)$$

C.4. FUNCIONES ESFÉRICAS DE BESSEL

Ecuación diferencial:

$$\rho^2 w''(\rho) + 2\rho w'(\rho) + [\rho^2 - \ell(\ell+1)]w(\rho) = 0 \quad \ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Las soluciones de esta ecuación son las funciones esféricas de Bessel de 1.^a y 2.^a clase:

$$j_\ell(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{\ell+1/2}(\rho) \quad , \quad y_\ell(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} Y_{\ell+1/2}(\rho)$$

o, alternativamente, sus combinaciones lineales, las funciones esféricas de Bessel de 3.^a clase:

$$h_\ell^{(1)}(\rho) = j_\ell(\rho) + iy_\ell(\rho) \quad , \quad h_\ell^{(2)}(\rho) = j_\ell(\rho) - iy_\ell(\rho)$$

Forma explícita:

$$j_\ell(\rho) = R_\ell(\rho) \frac{\text{sen } \rho}{\rho} + S_\ell(\rho) \frac{\text{cos } \rho}{\rho}$$

$$y_\ell(\rho) = -R_\ell(\rho) \frac{\text{cos } \rho}{\rho} + S_\ell(\rho) \frac{\text{sen } \rho}{\rho}$$

donde R_ℓ es un polinomio en $1/\rho$ con coeficientes reales, de grado ℓ y paridad $(-1)^\ell$, y S_ℓ es un polinomio en $1/\rho$ con coeficientes reales, de grado $\ell - 1$ y paridad $(-1)^{\ell-1}$.

Formas asintóticas:

$$j_\ell(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \cos \left[\rho - \frac{1}{2}(\ell+1)\pi \right] \quad , \quad y_\ell(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \text{sen} \left[\rho - \frac{1}{2}(\ell+1)\pi \right] \quad , \quad |\arg \rho| < \pi$$

Comportamiento en el origen:

$$j_\ell(\rho) \sim \frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!}, \quad y_\ell(\rho) \sim -\frac{(2\ell-1)!!}{\rho^{\ell+1}}$$

Fórmulas de recurrencia (f_ℓ es j_ℓ , y_ℓ , $h_\ell^{(1)}$ o $h_\ell^{(2)}$):

$$\begin{aligned} f_{\ell-1}(\rho) + f_{\ell+1}(\rho) &= \frac{(2\ell+1)}{\rho} f_\ell(\rho) \\ \ell f_{\ell-1}(\rho) - (\ell+1)f_{\ell+1}(\rho) &= (2\ell+1)f'_\ell(\rho) \\ \frac{\ell+1}{\rho} f_\ell(\rho) + f'_\ell(\rho) &= f_{\ell-1}(\rho) \\ \frac{\ell}{\rho} f_\ell(\rho) - f'_\ell(\rho) &= f_{\ell+1}(\rho) \end{aligned}$$

de donde se obtiene que:

$$j_\ell(\rho) = \rho^\ell \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad y_\ell(\rho) = -\rho^\ell \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\cos \rho}{\rho} \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Funciones generatrices:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \cos \sqrt{\rho^2 - 2\rho s} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{s^\ell}{\ell!} j_{\ell-1}(\rho) \\ \frac{1}{\rho} \sin \sqrt{\rho^2 + 2\rho s} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-s)^\ell}{\ell!} y_{\ell-1}(\rho) \quad , \quad 2|s| < \rho \end{aligned}$$

donde $j_{-1}(\rho) = -y_0(\rho)$, $y_{-1}(\rho) = j_0(\rho)$.

C.5. POLINOMIOS GENERALIZADOS DE LAGUERRE

Ecuación diferencial:

$$\rho L_n^{\alpha'}(\rho) + (\alpha + 1 - \rho)L_n^{\alpha'}(\rho) + nL_n^{\alpha'}(\rho) = 0 \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Fórmula de Rodrigues:

$$L_n^\alpha(\rho) = \frac{e^\rho}{n! \rho^\alpha} \frac{d^n}{d\rho^n} (e^{-\rho} \rho^{n+\alpha})$$

Relaciones de ortogonalidad:

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^\alpha [L_n^\alpha(\rho)]^2 d\rho = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!} \quad \alpha > -1$$

Expresión explícita:

$$L_n^\alpha(\rho) = \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m}{m!(n-m)!} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{\Gamma(m+\alpha+1)} \rho^m \quad \alpha > -1$$

Fórmulas de recurrencia:

$$\begin{aligned} (n+1)L_{n+1}^\alpha(\rho) &= (2n+\alpha+1-\rho)L_n^\alpha(\rho) - (n+\alpha)L_{n-1}^\alpha(\rho) \\ \rho L_n^{\alpha'}(\rho) &= nL_n^\alpha(\rho) - (n+\alpha)L_{n-1}^\alpha(\rho) \\ \rho L_n^{\alpha+1}(\rho) &= (\rho-n)L_n^\alpha(\rho) + (n+\alpha)L_{n-1}^\alpha(\rho) \\ L_n^{\alpha-1}(\rho) &= L_n^\alpha(\rho) - L_{n-1}^\alpha(\rho) \\ \rho L_n^{\alpha+1}(\rho) &= (n+\alpha+1)L_n^\alpha(\rho) - (n+1)L_{n+1}^\alpha(\rho) \\ (n+\alpha)L_n^{\alpha-1}(\rho) &= (n+1)L_{n+1}^\alpha(\rho) - (n+1-\rho)L_n^\alpha(\rho) \end{aligned}$$

Función generatriz:

$$\frac{e^{-\rho s/(1-s)}}{(1-s)^{\alpha+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\alpha(\rho) s^n \quad , \quad |s| < 1$$

Valores especiales:

$$L_n^{1/2}(\rho) = \frac{(-1)^n}{2^{2n+1} n! \sqrt{\rho}} H_{2n+1}(\sqrt{\rho})$$

Integrales de distintas potencias de ρ :

$$\int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{\alpha+1} [L_n^\alpha(\rho)]^2 d\rho = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!} (\alpha + 2n + 1)$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{\alpha+2} [L_n^\alpha(\rho)]^2 d\rho = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!} [\alpha^2 + 3(2n + 1)\alpha + 2(3n^2 + 3n + 1)]$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{\alpha+3} [L_n^\alpha(\rho)]^2 d\rho = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!} [\alpha^3 + 6(2n + 1)\alpha^2 + (30n^2 + 30n + 11)\alpha + 2(10n^3 + 15n^2 + 11n + 3)]$$

C.6. POLINOMIOS DE LEGENDRE

Ecuación diferencial:

$$(1 - x^2)P_\ell''(x) - 2xP_\ell'(x) + \ell(\ell + 1)P_\ell(x) = 0 \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Fórmula de Rodrigues:

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

Relaciones de ortogonalidad:

$$\int_{-1}^{+1} [P_\ell(x)]^2 dx = \frac{2}{2\ell + 1}$$

Fórmulas de recurrencia:

$$(\ell + 1)P_{\ell+1}(x) = (2\ell + 1)xP_\ell(x) - \ell P_{\ell-1}(x)$$

$$(1 - x^2)P_\ell'(x) = -\ell x P_\ell(x) + \ell P_{\ell-1}(x)$$

Expresión explícita:

$$P_\ell(x) = \sum_{p=0}^{\ell/2} \frac{(-1)^p (2\ell - 2p - 1)!!}{2^p p! (\ell - 2p)!} x^{\ell - 2p}$$

Función generatriz:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xs+s^2}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_{\ell}(x)s^{\ell} \quad , \quad -1 < x < 1 \quad , \quad |s| < 1$$

C.7. FUNCIONES ASOCIADAS DE LEGENDRE

Ecuación diferencial:

$$(1-x^2)P_{\ell}^{m''}(x) - 2xP_{\ell}^{m'}(x) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_{\ell}^m(x) = 0$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell$$

Fórmula de Rodrigues:

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

Relaciones de ortogonalidad:

$$\int_{-1}^{+1} [P_{\ell}^m(x)]^2 dx = \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}$$

Fórmulas de recurrencia:

$$(\ell-m+1)P_{\ell+1}^m(x) = (2\ell+1)xP_{\ell}^m(x) - (\ell+m)P_{\ell-1}^m(x)$$

$$(1-x^2)P_{\ell}^{m'}(x) = -\ell x P_{\ell}^m(x) + (\ell+m)P_{\ell-1}^m(x)$$

Función generatriz ($m > 0$):

$$(-1)^m (2m-1)!! (1-x^2)^{m/2} \frac{s^m}{(1-2xs+s^2)^{m+1/2}} = \sum_{\ell=m}^{\infty} P_{\ell}^m(x)s^{\ell} \quad , \quad -1 < x < 1, \quad |s| < 1$$

Expresión explícita ($m > 0$):

$$P_\ell^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \sum_{p=0}^{(\ell-m)/2} \frac{(-1)^p (2\ell-2p-1)!!}{2^p p! (\ell-m-2p)!} x^{\ell-m-2p}$$

Relación entre P_ℓ^m y P_ℓ^{-m} :

$$P_\ell^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_\ell^m(x)$$

Valores especiales:

$$P_\ell^0(x) = P_\ell(x) \quad ; \quad P_\ell^\ell(x) = (-1)^\ell (2\ell-1)!! (1-x^2)^{\ell/2} \quad ; \quad P_\ell^{-\ell}(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{\ell/2}$$

C.8. ARMÓNICOS ESFÉRICOS

Relación de cierre (completitud de la base):

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) Y_\ell^m(\theta', \varphi') = \frac{\delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi')}{\text{sen } \theta} \equiv \delta(\Omega - \Omega')$$

Casos particulares:

$$Y_\ell^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos \theta)$$

$$Y_\ell^\ell(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} (\text{sen } \theta)^\ell e^{i\ell\varphi}$$

C.9. DESARROLLOS EN ARMÓNICOS ESFÉRICOS

Teorema de la suma:

$$\frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\cos \alpha) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^{m*}(\theta_1, \varphi_1) Y_\ell^m(\theta_2, \varphi_2)$$

siendo α el ángulo entre las direcciones (θ_1, φ_1) y (θ_2, φ_2) .

Funciones de Green de los operadores ∇^2 y $\nabla^2 + k$:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>}^{\ell+1}} P_{\ell}(\cos \alpha)$$

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = ik \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) j_{\ell}(kr_{<}) h_{\ell}^{(1)}(kr_{>}) P_{\ell}(\cos \alpha)$$

$$\frac{\cos(k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = -k \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) j_{\ell}(kr_{<}) y_{\ell}(kr_{>}) P_{\ell}(\cos \alpha)$$

donde α es el ángulo entre las direcciones \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 , $r_{<}$ es el menor de (r_1, r_2) y $r_{>}$ es el mayor de (r_1, r_2) . Los desarrollos son válidos para cualquier k , incluso complejo.

Desarrollo de una onda plana:

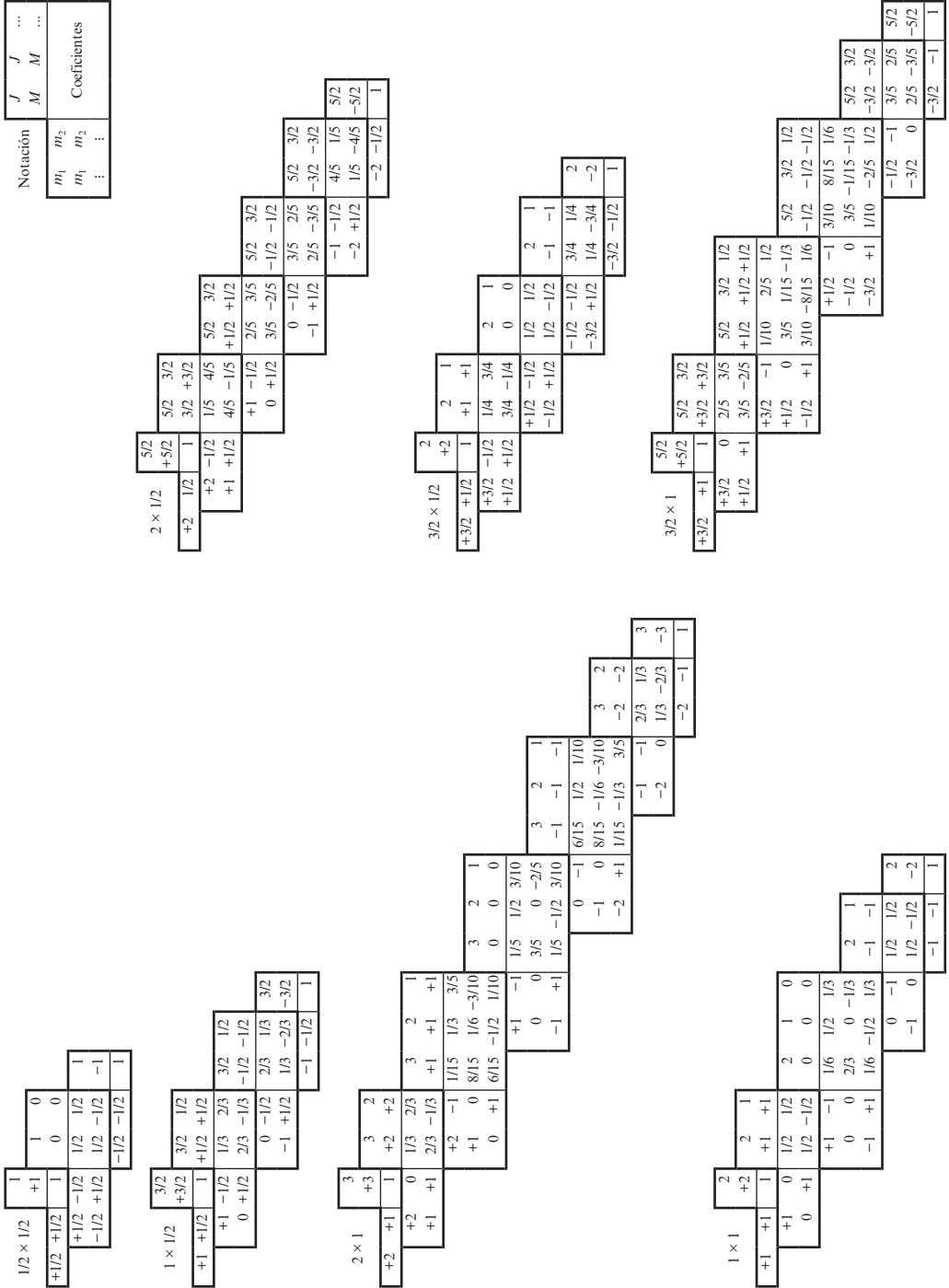
$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta)$$

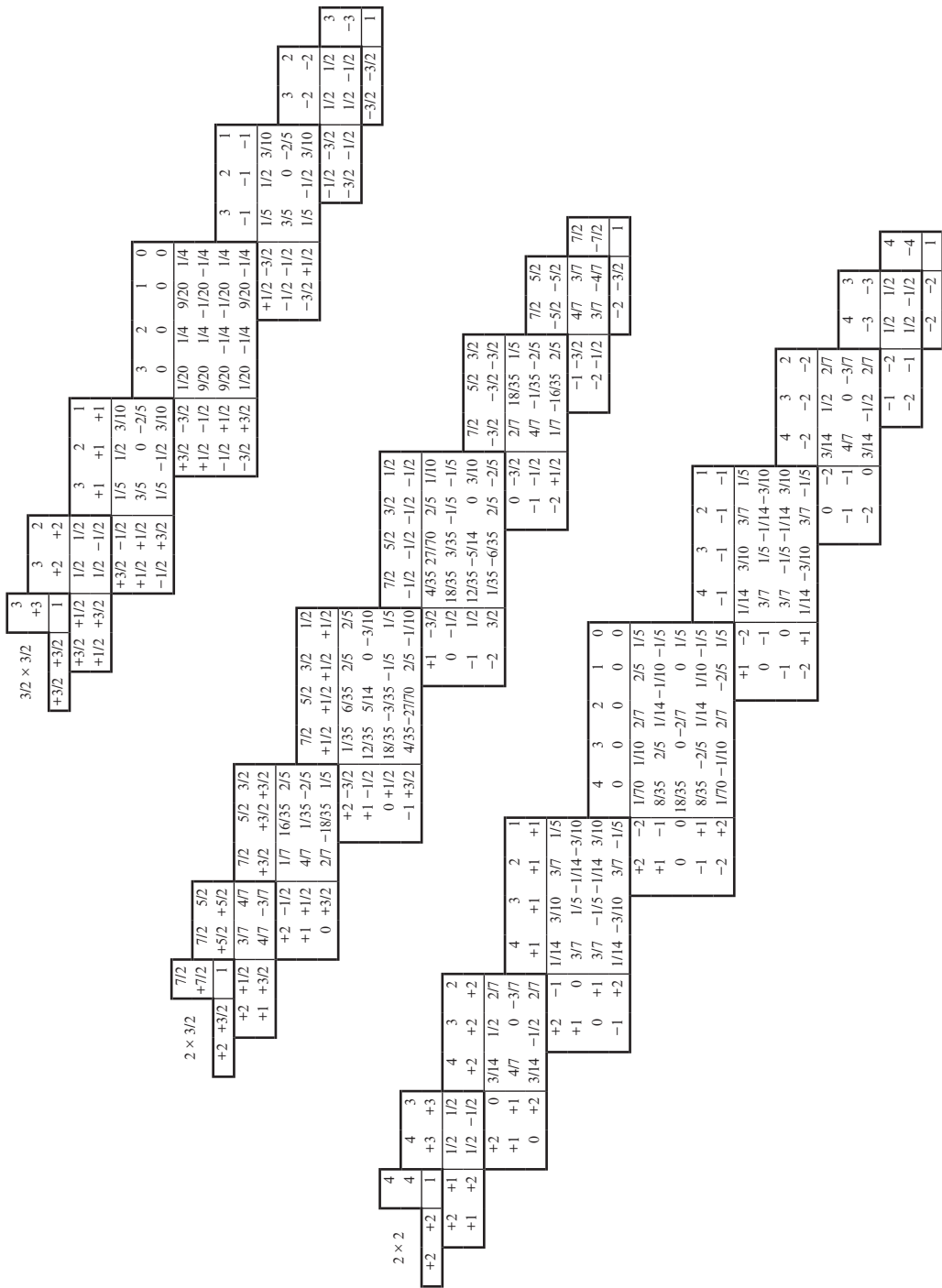
donde hemos tomado como eje polar z la dirección de propagación de la onda k .

C.10. COEFICIENTES DE CLEBSCH GORDAN

Nota: se sobreentiende que cada coeficiente lleva una raíz cuadrada. Por ejemplo, $-8/15$ debe leerse $-\sqrt{8/15}$.

Notación	J	J	\dots
	m_1	m_2	\dots
	m_1	m_2	Coefficientes
	\vdots	\vdots	





D

Cinemática relativista

Marina Ramón Medrano

D.1. INTRODUCCIÓN

Sea un proceso *arbitrario* en el que el número de partículas iniciales (a, b) y finales (c, d) es igual a 2:

$$a + b \rightarrow c + d \quad [\text{D.1}]$$

y supongamos que *antes* y *después* de la interacción existen *dos* regiones del espacio en las que a, b y c, d , respectivamente, se consideran *libres*. Un estudio cinemático del proceso [D.1] será el que analice el movimiento de dichas partículas en las regiones mencionadas relacionando sus energías y momentos. El estudio ha de ser relativista porque las velocidades de las partículas pueden ser comparables a la de la luz (c).

Para describir el proceso físico [D.1] se necesita un sistema de referencia (3 ejes de coordenadas y un reloj). Se considerarán sistemas de referencia (s.r.) *inerciales* (s.r. inercial: todo cuerpo que se mueve libremente en él tiene una velocidad constante), dado que la Física es la *misma* en todos ellos. Se pasa de un s.r. inercial a otro mediante las transformaciones de Lorentz, que son «rotaciones» del espacio cuatridimensional¹ (3 dimensiones espaciales y una temporal).

¹ A un *suceso* —o punto en el espacio cuatridimensional— se le asocia una coordenada temporal $x^0 = ct$, y 3 espaciales \mathbf{x} , donde c es la velocidad de la luz en el vacío; x^0 y \mathbf{x} son las cuatro coordenadas del *cuadrivector* $x^\mu \equiv (x^0, \mathbf{x})$; métrica $(1, -1, -1, -1)$. Dado que c es constante en cualquier sistema de referencia inercial, el intervalo o «distancia» entre dos sucesos habrá de ser el mismo en todos los sistemas de referencia inerciales. La distancia entre dos puntos x, y del espacio cuatridimensional

$$x^\mu \equiv (x^0, \mathbf{x}) = (ct, \mathbf{x}) \quad ; \quad y^\mu \equiv (y^0, \mathbf{y}) = (ct', \mathbf{y})$$

vendrá dada por:

$$(x - y)^2 = (x^0 - y^0)^2 - (\mathbf{x} - \mathbf{y})^2 = c^2(t - t')^2 - (\mathbf{x} - \mathbf{y})^2$$

La «distancia» es conservada, naturalmente, por las «rotaciones» en el espacio de cuatro dimensiones. En otras palabras, el módulo al cuadrado del cuadrivector $(x - y)^\mu = [(x^0 - y^0), (\mathbf{x} - \mathbf{y})]$ es invariante bajo transformaciones de Lorentz. En general, el producto escalar de dos cuadrivectores x, y cualesquiera es también invariante Lorentz:

$$x \cdot y = x_\mu y^\mu = x^0 y^0 - \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$$

es decir, tendrá el mismo valor en *todos* los sistemas inerciales.

A cada partícula se le asocia un cuadrivector $p^\mu \equiv (Ec^{-1}, \mathbf{p})$; $\mu = 0, 1, 2, 3$, donde la energía E es la componente temporal, y las tres componentes (p_x, p_y, p_z) de su momento \mathbf{p} son las respectivas componentes espaciales². El módulo al cuadrado del *cuadrimomento* p^μ es un invariante Lorentz:

$$p^2 \equiv (p^\mu p_\mu) = E^2 c^{-2} - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2 \quad [\text{D.2}]$$

donde m es la masa en *reposo* de la partícula. Para una partícula de masa en reposo nula (por ejemplo, el fotón), la energía $E = |\mathbf{p}|c$; si $m \neq 0$, de [D.2] se deduce que la energía total libre es:

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2} \quad [\text{D.3}]$$

La energía total libre (E) de una partícula es igual a su energía en reposo (mc^2) más su energía cinética (K ; asociada al movimiento):

$$E = mc^2 + K \quad [\text{D.4}]$$

En el lenguaje de cuadrivectores, la ley de conservación absoluta de energía y momento (apartado 41.2.1) no es más que la de *conservación del cuadrimomento total*:

$$\begin{aligned} E_{\text{inicial}} = E_{\text{final}} &\rightarrow p_{\text{inicial}}^\mu = p_{\text{final}}^\mu \\ \mathbf{p}_{\text{inicial}} = \mathbf{p}_{\text{final}} & \end{aligned} \quad [\text{D.5}]$$

donde E_{inicial} (E_{final}) es la suma de todas las energías [D.3] de las partículas en el estado inicial (final); análogamente para los momentos.

El hecho de que las variables cinemáticas de una partícula constituyan un cuadrivector permite pasar fácilmente de un sistema de referencia inercial a otro. Los sistemas de referencia más empleados para describir un proceso del tipo [D.1] (o uno de 2 partículas $\rightarrow n$ partículas) son los siguientes:

² En función de la velocidad \mathbf{v} de la partícula, tenemos también:

$$E = \frac{mc^2}{\left(1 - \frac{|\mathbf{v}|^2}{c^2}\right)^{1/2}} \quad \mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\left(1 - \frac{|\mathbf{v}|^2}{c^2}\right)^{1/2}}$$

a) *Sistema de laboratorio* (figura D.1):

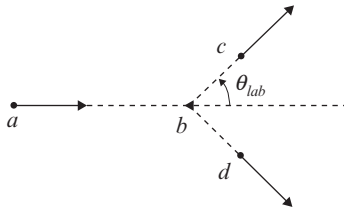


Figura D.1. Sistema de laboratorio.

La partícula blanco (*b*) permanece en reposo:

$$\mathbf{p}_b = 0 \quad (E_b = m_b c^2) \quad [\text{D.6}]$$

El ángulo de difusión θ_{ab} es el formado por la dirección incidente de la partícula proyectil (*a*) y la de una de las partículas salientes.

b) *Sistema centro de masas* (figura D.2):

El momento (\mathbf{p}) total inicial y final es igual a cero:

$$\mathbf{p}_a^{CM} + \mathbf{p}_b^{CM} = 0 \quad ; \quad \mathbf{p}_c^{CM} + \mathbf{p}_d^{CM} = 0 \quad [\text{D.7}]$$

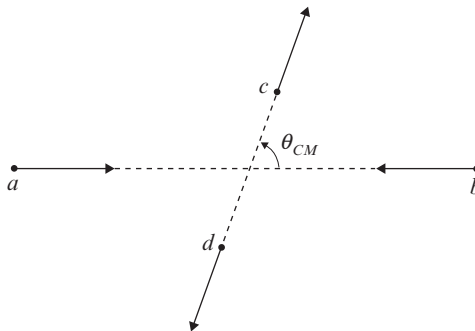


Figura D.2. Sistema centro de masas.

El ángulo θ_{CM} es el de difusión en el sistema centro de masas.

D.2. RELACIONES ENTRE VARIABLES EN EL SISTEMA DE LABORATORIO Y EN EL CENTRO DE MASAS

Para relacionar las variables cinemáticas (iniciales y finales) descritas en el sistema de laboratorio con las correspondientes en el sistema centro de masas se hace uso de expresiones —función de dichas variables— invariantes Lorentz. Por ejemplo, si se quiere relacionar las energías y los módulos de los momentos de las partículas iniciales, se puede partir del invariante Lorentz $p_a \cdot p_b$ (que tiene el *mismo* valor en los dos sistemas de referencia):

$$E_a m_b = c^{-2} E_a^{CM} E_b^{CM} + \mathbf{p}_{CM}^2 \quad [\text{D.8}]$$

(sistema de laboratorio) (sistema centro de masas)

donde $|\mathbf{p}_{CM}| = |\mathbf{p}_a^{CM}| = |\mathbf{p}_b^{CM}|$. De aquí, y con ayuda de [D.3], se tiene:

$$|\mathbf{p}_{CM}| = |\mathbf{p}_a| \frac{m_b c^2}{\sqrt{m_a^2 c^4 + m_b^2 c^4 + 2E_a m_b c^2}} \quad [\text{D.9.a}]$$

$$E_a^{CM} = \frac{m_a^2 c^4 + E_a m_b c^2}{\sqrt{m_a^2 c^4 + m_b^2 c^4 + 2E_a m_b c^2}} \quad [\text{D.9.b}]$$

$$E_b^{CM} = m_b c^2 \frac{m_b c^2 + E_a}{\sqrt{m_a^2 c^4 + m_b^2 c^4 + 2E_a m_b c^2}} \quad [\text{D.9.c}]$$

Es muy conveniente expresar las variables cinemáticas iniciales y finales en función de variables que sean invariantes bajo transformaciones de Lorentz. Por ejemplo:

$$s = (p_a + p_b)^2 \quad [\text{D.10.a}]$$

$$t = (p_a - p_c)^2 \quad [\text{D.10.b}]$$

$$u = (p_a - p_d)^2 \quad [\text{D.10.c}]$$

(donde p_a , etc., son los cuadrimomentos correspondientes en cualquier sistema de referencia); s , t y u son las llamadas variables de Mandelstam.

Considerando primero s , se tiene:

$$s = (E_a^{CM} + E_b^{CM})^2 c^{-2} = m_a^2 c^2 + m_b^2 c^2 + 2E_a m_b \quad [\text{D.11}]$$

(sistema centro de masas) (sistema de laboratorio)

(s es igual, por tanto, al cuadrado de la energía *total* en el sistema CM en unidades naturales, $c = 1$); de aquí se sigue inmediatamente para las variables en el sistema de laboratorio:

$$E_a = \frac{1}{2m_b}(s - m_a^2c^2 - m_b^2c^2) \quad ; \quad c|\mathbf{p}_a| = \frac{1}{2m_b}\sqrt{\lambda(s, m_a^2c^2, m_b^2c^2)} \quad [\text{D.12.a, b}]$$

donde $\lambda(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 - 2xy - 2xz - 2yz$ (función de Källen). Y teniendo en cuenta [D.8]:

$$|\mathbf{p}_{CM}| = \frac{1}{2\sqrt{s}}\sqrt{\lambda(s, m_a^2c^2, m_b^2c^2)} \quad [\text{D.13.a}]$$

y con ayuda de [D.3]:

$$E_a^{CM} = \frac{c}{2\sqrt{s}}(s + m_a^2c^2 - m_b^2c^2) \quad ; \quad E_b^{CM} = \frac{c}{2\sqrt{s}}(s + m_b^2c^2 - m_a^2c^2) \quad [\text{D.13.b}]$$

Pero a partir de la ley de conservación del cuadrimomento total ($p_a + p_b = p_c + p_d$) la variable s puede también escribirse como:

$$s = (p_c + p_d)^2 = (E_c^{CM} + E_d^{CM})^2c^{-2} \quad [\text{D.14}]$$

luego:

$$|\mathbf{p}_c^{CM}| = |\mathbf{p}_d^{CM}| = \frac{1}{2\sqrt{s}}\sqrt{\lambda(s, m_c^2c^2, m_d^2c^2)} \quad [\text{D.15.a}]$$

y con ayuda de [D.3]:

$$E_c^{CM} = \frac{c}{2\sqrt{s}}(s + m_c^2c^2 - m_d^2c^2) \quad ; \quad E_d^{CM} = \frac{c}{2\sqrt{s}}(s + m_d^2c^2 - m_c^2c^2) \quad [\text{D.15.b}]$$

Las energías y los módulos de los momentos de las partículas finales, en el sistema de laboratorio, se pueden expresar fácilmente en función de t [D.10.b] y u [D.10.c]:

$$t = (p_a - p_c)^2 = (p_d - p_b)^2 = m_b^2c^2 + m_d^2c^2 - 2E_d m_b \quad [\text{D.16.a}]$$

$$u = (p_a - p_d)^2 = (p_c - p_b)^2 = m_c^2c^2 + m_b^2c^2 - 2E_c m_b \quad [\text{D.16.b}]$$

donde se ha considerado la conservación del cuadrimomento total. De [D.16.a, b] y [D.2] se siguen:

$$E_d = \frac{1}{2m_b} (m_b^2 c^2 + m_d^2 c^2 - t) \quad ; \quad c|\mathbf{p}_d| = \frac{1}{2m_b} \sqrt{\lambda(t, m_b^2 c^2, m_d^2 c^2)} \quad [\text{D.17.a, b}]$$

$$E_c = \frac{1}{2m_b} (m_b^2 c^2 + m_c^2 c^2 - u) \quad ; \quad c|\mathbf{p}_c| = \frac{1}{2m_b} \sqrt{\lambda(u, m_b^2 c^2, m_c^2 c^2)} \quad [\text{D.18.a, b}]$$

Ahora sólo falta expresar los ángulos de difusión θ_{lab} y θ_{CM} (las direcciones de los momentos) en función de s , t y u . Para ello, de t [D.10.b], en el sistema centro de masas, se tiene:

$$t = m_a^2 c^2 + m_c^2 c^2 - 2E_a^{CM} E_c^{CM} c^{-2} + 2\mathbf{p}_a^{CM} \cdot \mathbf{p}_c^{CM} \quad [\text{D.19}]$$

siendo $\mathbf{p}_a^{CM} \cdot \mathbf{p}_c^{CM} = |\mathbf{p}_a^{CM}| |\mathbf{p}_c^{CM}| \cos \theta_{CM}$ (figura D.2), y con ayuda de [D.13.a, b] y [D.15.a, b], se sigue:

$$\cos \theta_{CM} = \frac{1}{\sqrt{\lambda(s, m_a^2 c^2, m_b^2 c^2)} \sqrt{\lambda(s, m_c^2 c^2, m_d^2 c^2)}} \cdot [\cdot [s^2 + s(2t - c^2(m_a^2 + m_b^2 + m_c^2 + m_d^2)) + c^4(m_a^2 - m_b^2)(m_c^2 - m_d^2)]] \quad [\text{D.20}]$$

Y de t [D.10.b] en el sistema de laboratorio:

$$t = m_a^2 c^2 + m_c^2 c^2 - 2E_a E_c c^{-2} + 2\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{p}_c \quad [\text{D.21}]$$

siendo $\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{p}_c = |\mathbf{p}_a| |\mathbf{p}_c| \cos \theta_{\text{lab}}$ (figura D.1), y con ayuda de [D.12] y [D.18], se tiene:

$$\cos \theta_{\text{lab}} = \frac{1}{\sqrt{\lambda(s, m_a^2 c^2, m_b^2 c^2)} \sqrt{\lambda(u, m_b^2 c^2, m_c^2 c^2)}} \cdot [2m_b^2 c^2 (t - m_a^2 c^2 - m_c^2 c^2) + (s - m_a^2 c^2 - m_b^2 c^2)(m_b^2 c^2 + m_c^2 c^2 - u)] \quad [\text{D.22}]$$

Por último, s , t y u no son independientes. En efecto, a partir de la conservación de la energía total en el sistema de laboratorio:

$$E_a + m_b c^2 = E_c + E_d \quad [\text{D.23}]$$

y teniendo en cuenta [D.12.a] y [D.17.a], se tiene:

$$E_c = \frac{1}{2m_b} (s + t - m_a^2 c^2 - m_d^2 c^2) \quad [\text{D.24}]$$

y, ahora, comparando con [D.18.a], resulta finalmente:

$$s + t + u = (m_a^2 + m_b^2 + m_c^2 + m_d^2)c^2 \quad [\text{D.25}]$$

Luego el número de variables cinemáticas *independientes* para el proceso [D.1] ($2 \rightarrow 2$) es igual a 2 (ejemplo 42.18).

E

Interferencia de un fotón consigo mismo*

Ramón F. Álvarez-Estrada

E.1. EXPERIMENTOS ANTERIORES A 1970

La Óptica Clásica nos ha enseñado que, en determinadas condiciones, un haz de luz (en el intervalo de longitudes de onda de 4000 Å a 9000 Å) interfiere consigo mismo. Así, dicho haz, conteniendo un número elevadísimo de fotones de energía baja (comparar con el capítulo 2), origina un sistema de máximos y mínimos en la intensidad, esto es, un contraste en la distribución de esta última. Además, y según se discutió en el capítulo 3, la Teoría Cuántica predice que un fotón individual puede interferir consigo mismo (recuérdese que un fotón lleva una función de onda asociada, según se vio en la sección 15.7). El objeto de este apéndice es ampliar el estudio presentado en el capítulo 3.

Es muy importante conseguir y garantizar que los paquetes asociados a fotones diferentes tengan solapamientos despreciables. Si se utilizan fuentes luminosas, es necesario¹ que éstas sean de muy débil intensidad y, así, que generen haces conteniendo un número suficientemente bajo de fotones. Un posible criterio se basa en conseguir que la longitud de coherencia L_c (sección 15.7) asociada a un fotón individual sea lo bastante grande como para que: i) su paquete de ondas asociado ocupe prácticamente toda la región donde se producirá la interferencia (interferómetro), y ii) se pueda descartar prácticamente la presencia simultánea de dos o más fotones en el interferómetro. Algunos valores típicos, correspondientes a algunos de los experimentos que mencionaremos en la tabla E.1 son:

- a) Las intensidades luminosas corresponden a 1 a 10^3 fotones/s · mm².
- b) L_c puede variar de 3 cm a 15 m.

Otro criterio utilizado con objeto de intentar garantizar que se opera con paquetes conteniendo un fotón es el siguiente. La cantidad de energía que fluye durante un tiempo característico (el tiempo para que una señal luminosa vaya desde la fuente al detector) debe ser pequeña comparada con la energía del fotón, $h\nu$. Aunque dichos criterios han

* El autor desea expresar su agradecimiento al profesor G. García Alcaine por haber efectuado una lectura agudamente crítica de los apéndices E, F y G, por varias discusiones y observaciones interesantes y constructivas y por haberle proporcionado una amplia bibliografía. Esta última ha sido de gran utilidad para la realización de dichos apéndices. También agradecemos al profesor J. L. Sánchez-Gómez diversas discusiones clarificadoras y certeras puntualizaciones sobre los fundamentos de la Mecánica Cuántica.

¹ Pero no suficiente, en general, como se discutirá más adelante en este apéndice.

sido sometidos a algunas críticas recientemente (que luego comentaremos), no deja de tener interés dar noticia somera de una serie de experimentos basados en aquellos y realizados entre 1909 y 1969 (tabla E.1).

TABLA E.1

Experimento: primer autor (año) (véanse referencias al final del apéndice)	Contraste en figura de interferencia al disminuir la intensidad de la luz	Comparación con la predicción de la Mecánica Cuántica
Taylor (1909)	Se mantiene	Consistente
Dempster (1927,a)	Se mantiene	Consistente
Dempster (1927,b)	Se mantiene	Consistente
Janossy (1957)	Se mantiene	Consistente
Dontsov (1967)	Tiende a desaparecer	Tiende a ser inconsistente
Reynolds (1969)	Se mantiene	Consistente
Bozec (1969)	Se mantiene	Consistente

Una representación muy esquemática de un típico dispositivo experimental (el de Reynolds et al., concretamente) se muestra en la figura E.1.

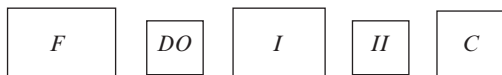


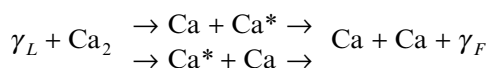
Figura E.1. Representación muy esquemática de un dispositivo experimental genérico para estudiar la interferencia de «un fotón consigo mismo». *F*: fuente de luz. *DO*: dispositivos ópticos (lentes, y filtros). *I*: interferómetro (Fabry-Perot, por ejemplo). *II*: intensificador de imagen. *C*: cámara detectora.

Experimentalmente, se analiza la diferencia entre máximos y mínimos de interferencia (es decir, el contraste) al disminuir mucho la intensidad luminosa, siendo la longitud de coherencia del orden del tamaño del interferómetro. Supongamos que el contraste se mantiene apreciablemente. En tal caso, *si el criterio basado en la longitud de coherencia garantizase que realmente hay un solo fotón en el interferómetro*, se podría concluir que los máximos y mínimos de intensidad observados serían debidos a una interferencia de aquél consigo mismo, y la predicción mecano-cuántica se confirmaría. Si, por el contrario, el contraste tendiese a desaparecer al disminuir la intensidad luminosa, podría haber, en principio, un desacuerdo con dicha predicción. Los resultados de diversos experimentos de esa clase y su comparación con la Mecánica Cuántica se resumen en la tabla E.1. Recuérdese que parte del experimento de Taylor y su base conceptual han sido ya discutidos en la sección 3.2. El experimento de Dontsov et al. es el único que mostró una tendencia a la desaparición del contraste al disminuir la intensidad luminosa. Así, motivó los posteriores de Reynolds et al. y Bozec et al., en los que se estableció que los contrastes de las figuras de interferencia se mantenían al decrecer la intensidad luminosa.

E.2. OTROS EXPERIMENTOS

Pese a la concordancia entre la Mecánica Cuántica y los experimentos mencionados en la tabla E.1, por lo cual hemos creído pertinente dar noticia de ellos, quizá podría objetarse que no está aún garantizado que un único fotón haya estado presente en cada caso en el interferómetro. Debido al carácter bosónico de los fotones, éstos tienden a «concentrarse» en un mismo estado cuántico, según mostró nuestro análisis en los capítulos 15 y 16. Así, podría argüirse que la estimación basada en la longitud de coherencia quizá no garantiza suficientemente la ausencia de solapamiento entre ellos en la región de interferencia. Otras posibles objeciones han sido formuladas por Grangier et al. No entraremos aquí en un debate acerca los experimentos y las eventuales críticas a su interpretación. Parece preferible presentar nuevos y más recientes experimentos, que no adolecen de aquellas posibles objeciones y muestran de forma independiente, y eventualmente más clara, lo importante: un fotón individual ciertamente puede interferir consigo mismo.

Resumiremos el experimento de Grangier et al. (1985). Un haz de moléculas de calcio Ca_2 , procedentes de una muestra a 1400°K , entra en una cámara de vacío y es bombardeado en dirección perpendicular a él por un haz de luz, procedente de un láser de Kriptón, con longitud de onda 406.7 nm ($1\text{ nm} = 1\text{ nanómetro} = 10^{-9}\text{ m}$), mediante impulsos cada 12 ns ($1\text{ ns} = 1\text{ nano segundo} = 10^{-9}\text{ s}$). Se produce un fenómeno de emisión de luz fluorescente, que es analizada y detectada en una tercera dirección ortogonal a las de los dos haces incidentes (molecular y láser). La longitud de onda de la luz fluorescente es 422.7 nm . La explicación del fenómeno de fluorescencia es como sigue. Cada molécula de calcio Ca_2 que absorbe un fotón γ_L de la luz láser se disocia en dos átomos que retroceden en direcciones opuestas. Uno de los átomos de Ca está en el estado fundamental, pero el otro está excitado (se representa por Ca^*) y pasará, en tiempos del orden de 1 ns , al estado fundamental emitiendo un fotón γ_F , que contribuye a la luz fluorescente generada. Claramente, hay dos posibilidades para el átomo excitado. El fenómeno para cada molécula se representa así:



Así pues, hay un único fotón γ_F por cada molécula que puede ser emitido de una de las dos formas indicadas. Esto permite una interferencia entre ambas posibilidades, que se interpreta así: hay un fotón γ_F que interfiere consigo mismo. La detección de los fotones γ_F se realiza individualmente. Una representación esquemática del experimento se muestra en la figura E.2.

Se mide el intervalo de tiempo t entre cada pulso de radiación láser y la detección de un fotón γ_F . Repitiendo el experimento en sus diversas fases, se mide el número de fotones γ_F , $N(\gamma_F)$, en función de t . Esta repetición proporciona, en el caso actual, lo análogo al «conjunto de un gran número de copias idénticas del sistema», discutido en la sección 6.9. Los resultados experimentales muestran que $N(\gamma_F)$ es una función con típicos máximos y mínimos de tipo interferencial. Más aún, dichos resultados son concordantes con predicciones mecano-cuánticas acerca de la interferencia, consigo mismo, de un fotón γ_F indivi-

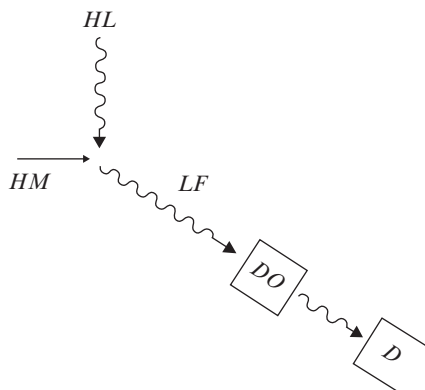


Figura E.2. Haz molecular: HM. Haz láser: HL. Luz fluorescente: LF. Dispositivos ópticos (lente, filtro interferencial y polarizador): DO. Fotodetector (tubo fotomultiplicador): D.

dual emitido por uno u otro de los átomos de Ca. Un análisis algo más detallado, basado en las relaciones de incertidumbre, muestra que no es posible conocer con precisión, para cada γ_F detectado, cuál de los dos átomos de Ca fue el que lo emitió.

A continuación, resumiremos otro experimento de Grangier et al. (1986). Un haz de átomos de Ca es irradiado con luz láser. Los átomos de Ca excitados vuelven al estado fundamental mediante una cascada de dos saltos cuánticos sucesivos, en cada uno de los cuales se emite un fotón. Los dos fotones γ_1 , γ_2 emitidos van en direcciones opuestas. La detección del primer fotón γ_1 sirve para «alertar» a los fotodetectores D_1 y D_2 , a fin de que «se preparen» a detectar, en un tiempo posterior, al segundo fotón γ_2 , que hace las veces, en lo que sigue, de «luz procedente de una fuente luminosa». En las condiciones del experimento, la probabilidad de detección simultánea en un detector de dos fotones procedentes de átomos distintos es pequeña. El fotón γ_2 pasa a un dispositivo en el que puede transmitirse o reflejarse, siendo detectado en cada caso mediante los tubos fotomultiplicadores D_1 o D_2 . Esto se repite un gran número de veces para cada pareja γ_1 , γ_2 . Los resultados para el número total de fotones γ_2 detectados indican que o bien D_1 detecta o lo hace D_2 , es decir, la gran mayoría de las veces sólo se da una posibilidad (reflexión o transmisión), siendo muy pequeño el número de veces en que ambos D_1 y D_2 detectan a la vez, de acuerdo con lo comentado antes. Esto garantiza experimentalmente que en D_1 o en D_2 se está detectando cada vez un estado conteniendo un único fotón γ_2 . Así concluye la primera parte del experimento (figura E.3.(a)). La segunda parte de éste consiste en hacer que γ_2 pase a través de un interferómetro. En este, γ_2 puede seguir dos caminos diferentes, tras lo cual ambas posibilidades pueden interferir. Se hace variar la diferencia de caminos en el interferómetro para que haya interferencias destructivas y constructivas y, para cada valor de dicha diferencia, se detecta γ_2 (figura E.3.(b)). La interferencia es de cada fotón consigo mismo, y hay que repetir todo el proceso un gran número de veces. De nuevo, esa repetición genera, en el fenómeno bajo estudio, lo análogo al «conjunto de gran número de copias idénticas del sistema» (sección 6.9), y permite hallar la correspondiente probabilidad. La distribución experimental de esta última muestra típicos máximos y mínimos de tipo inter-

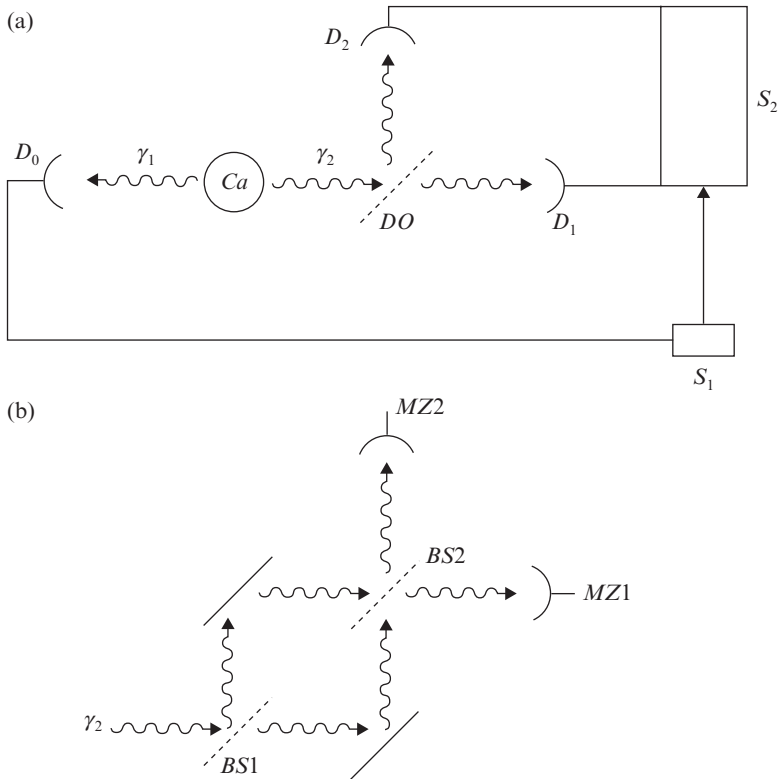


Figura E.3. (a) (Primera parte del experimento.) Los fotones γ_1 , γ_2 son emitidos en cascada por los átomos excitados (Ca). γ_1 es detectado en D_0 y esto «alerta», a través de los dispositivos S_1 y S_2 , a los fotodetectores D_1 y D_2 . DO es un dispositivo óptico en el que γ_2 puede transmitirse o reflejarse, antes de su detección, en D_1 o en D_2 . (b) (Segunda parte del experimento.) Dentro de un interferómetro, el fotón γ_2 puede seguir dos caminos distintos a partir de $BS1$. Tras ello, ambas posibilidades interfieren en $BS2$. Los «haces recombinados», tras las interferencias constructivas o destructivas, son detectados en $MZ1$ y en $MZ2$.

ferencial. Los resultados de las dos partes del experimento están, de nuevo, en buen acuerdo con las predicciones de la Mecánica Cuántica.

El lector interesado encontrará en Grangier et al. (1985 y 1986), y en las referencias allí citadas, no sólo discusiones mucho más detalladas y profundas de estos experimentos, sino también de su comparación con la Mecánica Cuántica, que han sido omitidas aquí.

BIBLIOGRAFÍA

- Bozec, P., Cagnet, M. y Roger, G. (1969). *C. R. Hebd. Seances Acad. Sci.*, 289: 883.
 Dempster, A. J. y Batho, H. F. (1927). *Phys. Rev.*, 30: 644.

Física cuántica

- Dontsov, Y. P. y Baz, A. I. (1967). *Sov. Phys. JETP* (traducción inglesa), 25: 1.
Grangier, P., Roger, G. y Aspect, A. (1986). *Europhysics Letters*, 1: 173.
Grangier, P., Aspect, A. y Vigue, J. (1985). *Phys. Rev. Lett*, 54: 418.
Janossy, L. y Naray, Z. (1957). *Acta Phys. Acad. Sci. Hung*, 7: 403.
Reynolds, G. T., Spartialian, K. y Scarl, D. B. (1969). *Nuevo Cimento*, B61: 355.
Taylor, G. I. (1909). *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 15: 114.

Mencionaremos el siguiente artículo de carácter general:

- Kidd, R., Ardini, J. y Anton, A. (1989). «Evolution of the Modern Photon». *Am. J. Phys.*, 57: 27.

F

Interferencia y difracción de neutrones

R. F. Álvarez-Estrada

F.1. ASPECTOS GENERALES

El neutrón es una partícula nuclear eléctricamente neutra con masa $m_n = 1.6749 \cdot 10^{-27}$ kg, inestable (con una vida media del orden de 886 s) y con espín $\hbar/2$ y momento magnético asociado $\mu_n = -1.91$ magnetones nucleares. Nos ocuparemos de fenómenos neutrónicos que ocurren en intervalos de tiempo inferiores a su vida media, con lo que el neutrón puede ser tratado como una partícula estable. El hecho de tener carga nula le permite atravesar medios materiales sin interactuar apreciablemente con las cargas eléctricas existentes en los átomos: básicamente, sufre los efectos de corto alcance de la fuerza nuclear (con tal de que pase a distancias del orden de 10^{-13} cm de un núcleo atómico). En general, en los fenómenos que estudiaremos en este apéndice, los efectos de absorción de los núcleos del medio sobre los neutrones que se propagan en él son despreciables.

Otra característica práctica muy importante de los neutrones, mencionada en otras partes de este libro, es que son producidos muy copiosamente en los reactores nucleares. En éstos se producen, en particular, los llamados neutrones térmicos, con una distribución de velocidades que puede describirse adecuadamente mediante la estadística clásica de Maxwell-Boltzmann (sección 17.1) correspondiente a una temperatura absoluta $T \approx 300$ K (para una discusión más detallada, véanse Alcober Bosch, 1989 y 1990, y Byrne, 1994). A partir de un conjunto de tales neutrones térmicos, con velocidades variables en magnitud y dirección, pueden conseguirse haces «monocromáticos» con energía y dirección bastante bien definidas. Específicamente, la energía no-relativista del neutrón es, entonces, del orden de 0.023 eV (siendo su velocidad 2200 m/s). Para conseguir la monocromatización, se utiliza, básicamente, la dispersión (más propiamente habría que llamarla difracción) del sistema de neutrones con distribución de Maxwell-Boltzmann por un cristal: recuérdese la sección 18.4, y, para más detalles, véase Bacon (1962). En lo sucesivo, y para fijar las ideas, al referirnos a los neutrones térmicos en este apéndice supondremos que ya están monocromatizados, siendo su energía 0.023 eV. En ellos nos concentraremos en buena parte de este apéndice (aunque también se discutirán, más brevemente, los denominados neutrones fríos y ultrafríos). Otra propiedad (¿una casualidad feliz?) de los neutrones térmicos es que su longitud de onda de Broglie λ es aproximadamente 1.8 \AA y, así, es del orden del espaciado en una red cristalina típica. Ello permite que los neutrones térmicos sufran, en general, fenómenos de difracción muy marcados en los cristales. Mediante procedimientos que no detallaremos

aquí, puede conseguirse que su energía disminuya, generándose los llamados neutrones fríos y ultrafríos.

Sea un neutrón térmico, frío o ultrafrío, propagándose en un medio sólido (un cristal, por ejemplo) o fluido. De acuerdo con numerosos análisis teóricos y experimentales, los fenómenos de interferencia y propagación coherente del neutrón se describen aceptando que su función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ satisface la ecuación de Schrödinger (6.4.8), donde $V(\mathbf{r})$ es el potencial nuclear (también llamado potencial óptico). Éste tiene un valor *promedio* dado por

$$\frac{2\pi\hbar^2}{m_n} b\rho \quad \text{[F.1.1]}$$

En [F.1.1], ρ es el número de átomos del medio por unidad de volumen (por ejemplo, cm^3) y b es la amplitud de dispersión neutrón-núcleo para energía cinética del neutrón prácticamente nula. El orden de magnitud de [F.1.1], para la gran mayoría de los medios de interés físico, es 10^{-7} eV (para neutrones térmicos, fríos y ultrafríos) y, por tanto, es muy pequeño comparado con la energía cinética de un neutrón térmico.

Desde hace algunas décadas, se han podido realizar múltiples e interesantes experimentos de interferometría neutrónica debidos, en gran medida, a que, previamente, había sido posible formar (mediante técnicas de crecimiento) monocristales de silicio casi perfectos, con dimensiones del orden de varios centímetros. Genéricamente, dichos experimentos se basan en dividir un haz de neutrones en dos subhaces (*I* y *II*) que, una vez separados espacialmente, son sometidos a agentes físicos diferentes (siguiendo, así, historias o caminos distintos). Posteriormente, los dos subhaces vuelven a ser recombinados de forma coherente, y se analiza su interferencia. En general, los experimentos de interferometría neutrónica realizados hasta la fecha se caracterizan por las propiedades siguientes:

- i) Durante un cierto intervalo temporal (t_1, t_2) , el interferómetro contiene solamente un neutrón del haz emitido previamente por la fuente (por ejemplo, el uranio de un reactor nuclear).
- ii) Durante (t_1, t_2) , los fenómenos de interferencia detectados sólo pueden ser debidos a la de ese neutrón consigo mismo (puesto que el neutrón «siguiente» en el haz aún no ha salido de la fuente).

Estas propiedades se justifican ordinariamente así: el tiempo que necesita un neutrón para recorrer todo el interferómetro es varios órdenes de magnitud menor que el intervalo que transcurre entre la emisión sucesiva de dos neutrones por la fuente. Obsérvese que la velocidad media de estos neutrones es de 2200 m/s y que las dimensiones del interferómetro son del orden de varios centímetros (por ejemplo, $10 \times 7 \times 7$ cm; véase Rauch, 1986).

Nótese que los neutrones son fermiones. Esto podría sugerir que, si el haz neutrónico tiene baja intensidad, estaría posiblemente más garantizado que no haya dos o más neutrones simultáneamente en el interferómetro, contrariamente al caso de los fotones, que

son bosones (recuérdese la discusión del apéndice E). Obsérvese que utilizaremos términos como «haz» y «subhaz» (que podrían sugerir a algunos lectores flujos conteniendo muchos neutrones) simplemente por ser de uso habitual, y pese a que, de hecho, representan aquí flujos correspondientes solamente a un neutrón en el interferómetro.

Un típico monocristal de silicio, preparado para realizar interferometría neutrónica, se muestra en la figura F.1: se le conoce como interferómetro de tipo Bonse-Hart. El cristal se corta de forma que hay tres láminas paralelas que emergen del resto, que proporciona un soporte estructural. El haz de neutrones incidente entra en la zona *A* de la primera lámina. La estructura se prepara para que ocurra lo siguiente:

- i) Debido a la dispersión por la estructura periódica de la primera lámina, se producen esencialmente los dos subhaces *I* y *II* en dos direcciones, dadas por la ley de Bragg, como se sigue del análisis en las secciones 2.4 (ecuación [2.4.1]) y 18.4.
- ii) Los subhaces entran en la segunda lámina en *B* y *C*, y, tras atravesarla, se producen dos nuevos haces separados espacialmente que, tras tener «historias distintas», como se mencionó previamente, llegan, en principio, con fases distintas, a la tercera lámina en la zona *D*, donde interfieren.
- iii) El haz resultante, tras atravesar la tercera lámina, puede llegar en forma de dos subhaces a los detectores C_1 y C_2 . Dependiendo de las fases relativas con las que los subhaces *I* y *II* se recombinaron en *D*, será C_1 o C_2 el detector que reciba los neutrones que llegan.

El agente físico creador de una fase adicional en el haz *I* (por ejemplo, un medio material adicional, un campo magnético...) puede colocarse en el camino de dicho haz entre la primera y la segunda láminas.

Nótese que el haz incidente en el interferómetro no necesita estar muy monocromatizado. En efecto, la dispersión que aquél sufre en la primera lámina del interferómetro ya le convierte en monocromático.

Recalcamos que *cada* neutrón se encuentra simultáneamente en los dos subhaces *I* y *II* (y no solamente en uno de ellos), habiendo una función de onda no nula asociada a

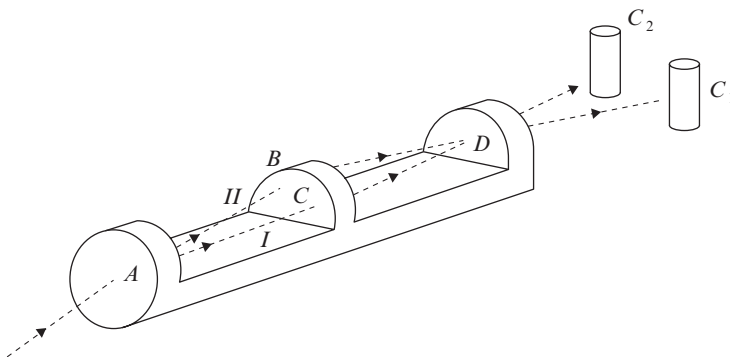


Figura F.1. Interferómetro de neutrones de tipo Bonse-Hart.

cada uno de dichos subhaces. Cada neutrón interfiere consigo mismo, como se ha dicho, y su detección en C_1 o C_2 es individual. Es necesario repetir el proceso un gran número de veces, cada vez con un único neutrón (procedente de la misma fuente, en condiciones iniciales análogas) ocupando el interferómetro y pudiendo seguir el camino I o el II hasta su detección. Los resultados de todas esas detecciones constituyen la figura de interferencia. La repetición de todo el proceso hace las veces, en el caso actual, de «conjunto de un gran número de copias idénticas del sistema microscópico», según se discutió en la sección 6.9, y permite obtener las probabilidades.

Veamos un ejemplo con neutrones térmicos para fijar las ideas. Sea Ψ_I la función de onda, aproximadamente plana, en D del neutrón correspondiente al subhaz I . Supongamos que el neutrón, en el camino del subhaz II , está sometido a una interacción nuclear constante (en promedio), tal como [F.1.1] a lo largo de una distancia d . Esto se consigue colocando en dicho camino una muestra de un medio material de espesor apropiado. Recordemos la función de onda [6.4.4] y [6.4.1], y notemos que [F.1.1] es mucho menor que la energía cinética E del neutrón. En consecuencia, la función de onda [6.4.4] para el neutrón en el subhaz II puede reemplazarse por el producto de una onda aproximadamente plana multiplicada por

$$\exp\left[i\frac{p}{\hbar}\frac{1}{2E}\frac{2\pi\hbar^2\rho b}{m_n}d\right] = \exp(i\lambda\rho bd)$$

siendo $E = p^2/2m_n$. Como las «historias» de los subhaces I y II coincidirían si no hubiera habido la interacción nuclear, parece natural que, en D , la función de onda del subhaz II sea

$$\Psi_{II} = \exp(i\lambda\rho bd) \cdot \Psi_I \quad [\text{F.1.2}]$$

Por tanto, la función de onda total de un neutrón en D , habiendo llegado según el camino I o el II , es

$$\Psi = \Psi_I + \Psi_{II} = [1 + \exp(i\lambda\rho bd)]\Psi_I \quad [\text{F.1.3}]$$

El módulo cuadrado (proporcional a la «intensidad» en D) es

$$|\Psi|^2 \propto 1 + \cos \lambda\rho bd \quad [\text{F.1.4}]$$

Al variar d (lo cual se consigue cambiando el espesor de la muestra), la «intensidad» queda modulada y varía también, según [F.1.4] indica, anulándose si $\cos \lambda\rho bd = -1$. Así, la muestra material, colocada en el camino del subhaz II , constituye un agente físico que crea una fase adicional en dicho haz. Interesantes discusiones de carácter general sobre interferometría neutrónica pueden encontrarse en Greenberger (1979) y (1983).

F.2. CAMBIO DE SIGNO DE LA FUNCIÓN DE ONDA NEUTRÓNICA DEBIDO A UNA ROTACIÓN DE 360° O A UN CAMPO MAGNÉTICO

Consideremos un cierto sistema de coordenadas S y, respecto a él, un cierto sistema físico SF . Por otra parte, sea un cierto eje caracterizado por el vector unitario \mathbf{u} , que pasa por el origen de S , e imaginemos una rotación muy lenta de SF en torno a \mathbf{u} de magnitud igual a 360°. Tras dicha rotación, la posición de SF vuelve a coincidir con la que tenía antes de iniciar aquella. Si SF es macroscópico y está aislado, de acuerdo con la Física Clásica no debe haber ningún efecto observable relativo al primero, como consecuencia de dicha rotación. Esta afirmación no es cierta en todos los casos si SF es microscópico. En efecto, supongamos que SF es un neutrón, recordemos que éste tiene espín 1/2, y sea

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_+(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_-(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$$

su función de onda con dos componentes respecto al sistema S (capítulo 13). La Mecánica Cuántica predice que, como resultado de dicha rotación de magnitud 360° en torno a \mathbf{u} , la función de onda del neutrón cambia de signo, esto es,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow -\Psi(\mathbf{r}, t) \quad [\text{F.2.1}]$$

(véase el ejercicio 13.6). ¿Es posible llevar a cabo experimentos para verificar si el cambio de signo [F.2.1] ocurre realmente bajo rotaciones de 360°? Dichos experimentos han sido realizados con neutrones térmicos gracias, precisamente, al interferómetro de neutrones (Werner et al., 1975). La idea es, en principio, sencilla. Tras dividir, en aquel, un haz de neutrones térmicos incidente en dos subhaces bien separados espacialmente, uno de los subhaces se haría girar 360° en torno a una dirección determinada, con lo cual la correspondiente función de onda neutrónica adquiriría el signo menos indicado en [F.2.1]. A continuación, los dos subhaces se recombinarían, se harían interferir de nuevo y se estudiaría la distribución de intensidades (es decir, del módulo cuadrado de la función de onda *total*, que es la suma de las asociadas a ambos subhaces). La Mecánica Cuántica, claramente, predice que allá donde, en caso de no haber sido efectuada la rotación, había una interferencia constructiva (con un máximo en la intensidad detectada), debería haber, habiéndose realizado aquella, una interferencia destructiva. Esa predicción podría ser contrastada con los resultados experimentales.

En la práctica, en vez de que uno de los subhaces gire un ángulo de 360° en torno a un eje, lo que se hace es someterlo a un campo magnético \mathbf{B} independiente del tiempo y constante. Es fundamental que \mathbf{B} *no* actúe sobre el otro subhaz. De acuerdo con el ejercicio 13.7, el efecto del campo magnético durante un tiempo adecuado sobre la función de

onda neutrónica es equivalente a una rotación de 360° , pues genera el mismo cambio de signo que en [F.2.1].

Un diagrama esquemático del dispositivo experimental, con un campo magnético actuando sobre uno de los subhaces, se muestra en la figura F.2. Es útil comparar ésta con la figura F.1: en el caso presente, el agente físico que introduce una fase adicional en uno de los subhaces es un campo magnético.

El resultado del experimento con neutrones térmicos es consistente con la predicción mecanocuántica.

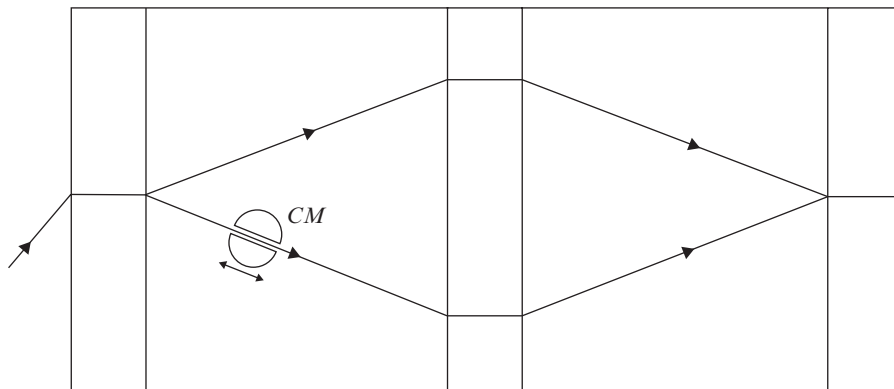


Figura F.2. Representación esquemática del experimento de Werner et al. (1975). *CM* indica un campo magnético que actúa sobre uno de los subhaces en el interferómetro.

F.3. EFECTOS DE LA GRAVEDAD SOBRE LOS NEUTRONES TÉRMICOS

La diferencia de energías potenciales de un neutrón sometido al campo gravitatorio en la superficie de la Tierra para diferencias de altura de 1 metro es del orden de 10^{-7} eV. Éste resulta ser también el orden de magnitud de la energía de un neutrón:

- i) En un campo magnético moderado (1.7 tesla).
- ii) O bien sometido al potencial nuclear medio [F.1.1] al moverse en un cristal (cuarzo, por ejemplo).

La influencia de la fuerza de la gravedad debida a la Tierra sobre los neutrones térmicos puede ser puesta de manifiesto experimentalmente con el interferómetro. Alternativamente, cabe decir que hay fenómenos de interferencia de un neutrón consigo mismo debidos a la fuerza de la gravedad.

El dispositivo experimental de Colella et al. (1975) es similar al de la figura F.1, con una diferencia esencial: todo el interferómetro se ha hecho girar un cierto ángulo, de forma

que los puntos B y C ya *no* están en un plano horizontal, sino a diferentes alturas z_B, z_C . La nueva disposición se muestra en la figura F.3. Sobre ella, analicemos las funciones de onda de un neutrón térmico en los subhaces I o II , justo al salir de la primera lámina. Supondremos que, entonces, son aproximadamente planas, y que el momento p_I del subhaz I está en el plano horizontal, en tanto que el del subhaz II , p_{II} no lo está. En un recorrido muy pequeño (dado por un r infinitesimal) a partir de la cara de salida de la primera lámina, la función de onda (independiente del tiempo) del neutrón en el subhaz I es:

$$\Phi_I(\mathbf{r}) = \exp \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_I \mathbf{r} \quad [\text{F.3.1}]$$

en tanto que la correspondiente al subhaz II está dada en [6.4.4] y [6.4.1] con $V(\mathbf{r}) = mgr$. Aquí se tiene $\mathbf{g} = (0, 0, -g)$, siendo $g = 9.8 \text{ m/s}^2$ la aceleración de la gravedad. Para neutrones térmicos $p_{II}^2/2m$ es de orden de 10^{-2} eV , así que

$$|V(\mathbf{r})| \ll \frac{p_{II}^2}{2m_n}$$

Por tanto, la parte independiente del tiempo correspondiente a [6.4.4] para el subhaz II es (tras aproximar en [6.4.1.]

$$\Phi_{II}(\mathbf{r}) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_{II} \mathbf{r} \left[1 - \frac{m_n V(\mathbf{r})}{p_{II}^2} \right] \right\} \quad [\text{F.3.2}]$$

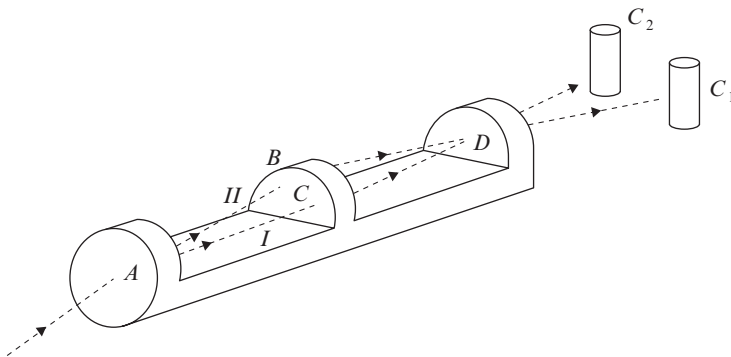


Figura F.3. Representación esquemática del experimento de Colella et al. (1975). Los puntos B y C están a diferentes alturas respecto a un plano horizontal. C_1 y C_2 representan detectores, como en la figura F.1.

es decir, aparece una fase adicional. Si $\mathbf{r} = (x, y, z)$ es finito, hay una fase similar por cada elemento infinitesimal de longitud y han de sumarse todas ellas. Aunque la magnitud de $V(\mathbf{r})$ es del orden de 10^{-9} eV para $z = 1$ cm, la fase acumulada por el subhaz II a lo largo de un camino de unos 10 cm es ciertamente medible. El resultado neto es que, cuando los subhaces I y II se recombinan en D , hay una diferencia de fase entre ellos debido a la fuerza de la gravedad, que origina una típica figura de interferencia.

Los resultados experimentales están de acuerdo con la predicción mecanocuántica.

El experimento de Colella et al. (1975) que acabamos de resumir tiene, además, el interés siguiente. Es consistente con (e incluso muestra) que la ecuación de Schrödinger [6.4.8] es también válida si el potencial $V(\mathbf{r})$ incluye interacciones gravitatorias, como la creada por la Tierra.

F.4. OTROS EFECTOS CON NEUTRONES TÉRMICOS

- a) Ha sido posible medir la influencia de la rotación de la Tierra sobre neutrones térmicos mediante interferometría. Estos experimentos (Werner et al., 1979) constituyen la versión, para neutrones térmicos, del efecto Sagnac (esto es, los efectos de rotaciones pueden ser detectados por interferometría óptica): concretamente, Michelson, Gale y Pearson pusieron de manifiesto la rotación de la Tierra detectando una variación en la velocidad de la luz mediante un interferómetro óptico (de acuerdo con la teoría de la relatividad). En el caso de los neutrones, es preciso que la dirección del haz incidente sea vertical, y que el interferómetro gire en torno a dicho haz convenientemente, para introducir una fase en uno de los subhaces respecto al otro. El resultado experimental es consistente con lo que la Mecánica Cuántica predice.
- b) Un haz de neutrones está polarizado según una dirección caracterizada por el vector unitario \mathbf{u} si cada uno está en un estado de espín χ tal que

$$\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{u} \chi = + \frac{\hbar}{2} \chi$$

(es decir, la proyección de su espín según \mathbf{u} es positiva). Véase el capítulo 13 para mayor detalle. Es posible formar experimentalmente haces de neutrones térmicos polarizados, según una dirección \mathbf{u} . Para ello, un haz incidente, inicialmente no polarizado atraviesa un campo magnético \mathbf{B} no-uniforme paralelo a \mathbf{u} . Debido a su momento magnético asociado, cada neutrón sufre una interacción distinta con \mathbf{B} , que depende de la proyección de su espín según \mathbf{u} (comparar con el capítulo 13). Esto permite dividir el haz incidente en dos subhaces, cada uno polarizado, que forman un pequeño ángulo (unos segundos de arco) entre sí. Seleccionando uno de los subhaces solamente, se obtiene, finalmente, un haz de neutrones con alto grado de polarización ($\sim 95\%$), que permite realizar nuevos experimentos de interferometría. Nos limitaremos a mencionar sucintamente el que permite verificar

la composición de espines (Summhammer et al., 1983). El haz neutrónico, ya polarizado según el eje z positivo, penetra en el interferómetro de silicio, dividiéndose, como siempre, en dos subhaces I y II (cada uno también polarizado según el eje z). Se actúa sobre el subhaz II (mediante un pequeño solenoide que lleva corriente continua y crea un campo magnético) de forma que los neutrones en él pasen a estar polarizados en la dirección opuesta, es decir, según el eje z negativo. Posteriormente, ambos subhaces I y II vuelven a recombinarse en una cierta región, donde interfieren y, más tarde, se detectan. Puede conseguirse que el haz final recombinado esté polarizado según una dirección *perpendicular* al eje z . Esto es, componiendo mediante una superposición lineal (¡es decir, en este caso, experimentalmente!) subhaces polarizados según el eje z en ambos sentidos, se obtiene un haz resultante que está polarizado según el eje x o el y . Véase el capítulo 13. Una vez más, los resultados experimentales están de acuerdo con la Mecánica Cuántica.

F.5. NEUTRONES FRÍOS

Los neutrones fríos típicos tienen longitudes de onda de De Broglie del orden de 20 \AA .

Resumiremos algunos interesantes experimentos de difracción de neutrones fríos por una y dos rendijas, y discutiremos su comparación con las predicciones de la Mecánica Cuántica. Una discusión detallada puede verse en Zeilinger et al. (1988). El experimento de difracción por una rendija se representa esquemáticamente en la figura F.4. Un haz de neutrones fríos libres pasa por un cristal monocromador (CM) que le convierte en un paquete centrado en torno a una longitud de onda de De Broglie media $\lambda = 19.26 \text{ \AA}$ (con una pequeña anchura $\Delta\lambda = 0.7 \text{ \AA}$). Tras ello, el haz atraviesa sucesivamente una estrecha rendija de entrada S_1 , un tubo evacuado, una simple y estrecha rendija difractante S_2 y un segundo tubo evacuado hasta llegar a la rendija de salida S_3 , donde un detector acusa la llegada de los neutrones. Posteriormente, el dispositivo experimental fue modificado, convirtiendo la simple rendija difractante S_2 en una doble (incorporando un alambre de boro, muy absorbente). Después, una nueva serie de experimentos, ahora de difracción por doble rendija, fue llevada a cabo.

Los resultados experimentales para el número de neutrones detectados en diferentes posiciones en S_3 están en excelente acuerdo con la predicción de la Mecánica Cuántica, tanto si S_2 es una rendija simple como si es doble.

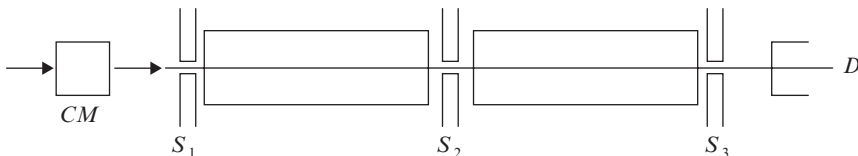


Figura F.4. Difracción de neutrones fríos por una rendija (S_2).

Otros experimentos con neutrones fríos, asimismo de acuerdo con la Mecánica Cuántica, se discuten en las actas del Workshop de Grenoble (1983).

F.6. NEUTRONES ULTRAFRÍOS

Los llamados neutrones ultrafríos tienen energías cinéticas no-relativistas menores que, o a lo sumo del orden de 10^{-7} eV (y velocidades inferiores a 10 m/s), siendo su longitud de onda unos 10^3 Å.

Una peculiaridad de los neutrones ultrafríos es que les resulta bastante más difícil penetrar en un medio material que a los térmicos. Como consecuencia, las ondas de De Broglie asociadas a los ultrafríos sufren reflexión total en paredes formadas por sustancias adecuadas. Esta propiedad única permite almacenarlos en cavidades vacías cerradas (denominadas «botellas neutrónicas») durante centenares de segundos. La energía cinética de un neutrón ultrafrío es del orden de sus energías potenciales gravitatoria (en la Tierra) y nuclear media (por ejemplo, debida a los núcleos del medio material que forma las paredes reflectoras de «una botella»). En consecuencia, para los neutrones ultrafríos dentro de «una botella» (que sufren la fuerza nuclear solamente cuando chocan con la pared), la interacción debida a la gravedad no puede despreciarse. La interacción gravitatoria ha sido utilizada para focalizar haces de neutrones ultrafríos. Posteriormente, éstos se han utilizado para realizar diversos experimentos de interferencias y difracción. En general, los resultados experimentales con neutrones ultrafríos están también de acuerdo con las predicciones de la Mecánica Cuántica. El lector interesado en una discusión más detallada de los neutrones ultrafríos puede consultar Steyerl (1984) y las actas del Workshop de Grenoble (1983).

F.7. COPIAS IDÉNTICAS DE UN SISTEMA Y SISTEMA INDIVIDUAL

Ampliaremos aquí la discusión del final de la sección 6.9. Como se expuso allí, tras numerosos experimentos, se ha aceptado que la función de onda Ψ proporciona máxima información posible (de carácter estadístico, es decir, distribuciones de probabilidad) acerca de un conjunto de copias idénticas de una partícula o sistema microscópico, habiendo sido preparadas todas ellas de forma similar. No es posible obtener más información acerca del conjunto de copias idénticas que la contenida en Ψ . La cuestión (que continúa siendo objeto de debate) es si, además, dicha función de onda da información completa de un sistema individual.

Consideremos un haz de neutrones térmicos que atraviesan un interferómetro, según se expuso en el apartado F.I. Como allí se discutió, los experimentos se pueden realizar en condiciones tales que no haya más que un neutrón del haz en el interferómetro, durante el intervalo de tiempo, T , necesario para que el primero atraviese el segundo. Así, el con-

junto de todos los neutrones que atraviesan el interferómetro sucesivamente durante los intervalos temporales $(t, t + T)$, $(t + T, t + 2T)$, $(t + 2T, t + 3T)$..., podría considerarse como un conjunto de copias idénticas del mismo sistema microscópico, a saber, un neutrón individual efectuando dicho tránsito. Ese conjunto de copias idénticas viene representado por Ψ , en [F.1.3]. Ciertamente, la idea de que, además, un neutrón individual que atraviesa el interferómetro esté representado por esa función de onda Ψ y de que ésta suministrase una descripción completa y exhaustiva de aquél, puede resultar intuitiva y proporcionar una imagen convincente a diversos físicos. Otros físicos, por el contrario, consideran que dicha idea no puede dar lugar a verificaciones experimentales, y, por tanto, está más allá de la Física, en función de diversos argumentos, uno de los cuales es el siguiente. Un neutrón individual, al ser sometido a una detección o medición, sólo puede dar lugar a un suceso. Para obtener distribuciones de probabilidad, hay que tener muchos sucesos, es decir, repetir muchas veces las mediciones: justamente para eso es necesario el conjunto de copias idénticas del sistema microscópico. El debate no parece cerrado, pero es irrelevante por lo que se refiere a las aplicaciones habituales de la Física Cuántica (aunque sí tiene interés en la interpretación de la función de onda y de las mediciones). Al estudiar, como a lo largo de este libro se hace, una partícula o sistema microscópico, es suficiente considerar el conjunto de las correspondientes copias idénticas y las respuestas dadas a las cuestiones primera y tercera al final de la sección 6.9. Es interesante y recomendable, en relación con este debate relativo a la interpretación de la función de onda, la lectura de las secciones 9-3 y 9-4 del libro de Ballentine (1998).

Ampliando la discusión en la sección 18.5, resumiremos el argumento siguiente, que contribuye a apoyar que la función de onda $\Psi = \Psi(\mathbf{r}, t)$ representa, en general, un conjunto de copias idénticas y a dificultar que pueda interpretarse, en general, como representando una copia individual (... , lo que no excluirá esta última interpretación en ciertas condiciones concretas, como también comentaremos). Dicho argumento ha sido utilizado por diferentes investigadores previamente: más información y detalles pueden verse en Ballentine (1998, capítulo 14). Escribamos:

$$\Psi = |\Psi| \exp[(i/\hbar)S] \tag{F.7.1}$$

donde $|\Psi| = |\Psi(\mathbf{r}, t)| \geq 0$ está dado en [6.6.2] y $S = S(\mathbf{r}, t)$ es la fase (real) de Ψ . La sustitución de [F.7.1] en [6.4.9] (con V real) conduce a dos ecuaciones. Una es:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} [\nabla S]^2 + V + V_Q = 0 \tag{F.7.2}$$

siendo

$$V_Q = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\nabla^2 |\Psi|}{|\Psi|} \tag{F.7.3}$$

y la otra es [6.7.9], con la densidad de corriente de probabilidad \mathbf{J} dada en [6.7.8]. El conjunto de ambas ecuaciones (cuánticas, no lineales y acopladas entre sí) para $|\Psi|$ y S es estrictamente equivalente a [6.4.9] (lineal, para Ψ). \mathbf{J} es también igual a:

$$\frac{1}{m} = |\Psi|^2 \nabla S \quad [\text{F.7.4}]$$

La demostración de [F.7.2] (con [F.7.3]), [6.7.9] y [F.7.4]) es un cálculo directo que, por brevedad, omitiremos. Además se tiene:

$$\langle p \rangle = \int d^3r |\Psi|^2 \nabla S$$

V_Q se conoce como «potencial cuántico». Para la onda plana en [6.2.11] y [7.3.4], se tiene $V_Q = 0$. La fase S y [F.7.2] permiten estudiar la transición de la descripción cuántica a la clásica en detalle [como, por ejemplo, en Ballentine (1998)], limitándonos aquí a una breve discusión.

En la transición hacia el dominio clásico, se estudian las predicciones de la Mecánica Cuántica en un régimen caracterizado por magnitudes muy grandes comparadas con magnitudes (de igual dimensión) típicas de las escalas atómicas o microscópicas (siendo estas últimas, groseramente hablando, del orden de \hbar). Si Ψ describiese una entidad individual, parecería razonable esperar que, al ir hacia el régimen clásico, el dominio en el que $|\Psi|$ fuese no despreciable tuviese un tamaño cada vez más pequeño, tendiendo progresivamente a estar concentrado en torno a cierto punto. Dicho punto sería asimilable a la posición clásica de la partícula en t . En la evolución temporal cerca del régimen clásico, durante cierto tiempo, esos dominios tan concentrados serían asimilables a una trayectoria clásica (solución de [7.1.4] y [7.1.7]). Y cabría esperar también que $V_Q \rightarrow 0$. Dichos comportamientos son válidos para diversas Ψ (en ciertos intervalos de tiempo), como las consideradas en la sección 7.3, y eso fue de enorme utilidad en el proceso de inducción que llevó a las variables dinámicas cuánticas, en general. Verificándose tales condiciones, parecería entonces razonable interpretar que cada una de dichas Ψ en el dominio genuinamente cuántico (sin efectuar la transición al régimen clásico) representase una copia individual. Pero debe notarse que, en general, un paquete de ondas se ensancha cada vez más, para tiempos adecuadamente grandes (y para $t \rightarrow +\infty$). Dicho ensanchamiento fue comentado en la sección 6.5 para un paquete de ondas libres y constituye una propiedad general, es decir, en presencia de interacciones. Parecería difícil interpretar un paquete muy ancho, para tiempos muy largos y cerca del régimen clásico, como una trayectoria clásica. Por tanto, la asimilación del paquete ancho, para grandes tiempos y en el régimen cuántico, a una copia individual no parecería ni directa ni obvia. En muchas situaciones físicas, en intervalos de tiempo adecuadamente limitados, el ensanchamiento es despreciable, y no parecería haber objeción a esa interpretación de Ψ como representante de una copia individual, en las condiciones indicadas.

Por otra parte, existen diversas Ψ tales que, en el límite clásico y para todo t , $V_Q \rightarrow 0$ aunque el tamaño del dominio en el que $|\Psi| \neq 0$ no tiende a cero. En tal caso, el límite

clásico de dicha función de onda no sería asimilable a una trayectoria clásica de una partícula individual (como las descritas en [7.1.4]), sino a un conjunto de trayectorias clásicas. Dicho conjunto sería descrito, cerca del régimen clásico, por una distribución de probabilidad y una densidad de corriente de probabilidad verificando una ecuación de continuidad clásica, formalmente análoga a [6.7.9].

Y existen funciones de onda tales que, al tender al régimen clásico, V_Q no se anula. Véase Ballentine (1998).

Ha sido posible aislar experimentalmente un fotón individual en el interior de una cavidad de microondas (durante tiempos τ_{fc} del orden de 130 milisegundos): véase el apéndice T. En tal caso, se ha generado experimentalmente una única copia. Durante tiempos $< \tau_{fc}$, parece natural que ese fotón individual se pueda representar mediante una función de onda, al menos, en el espacio de momentos (véase la sección 15.7), sin necesidad de considerar copias adicionales de fotones idénticamente confinados. Por otra parte, se han realizado experimentos (también descritos en el apéndice T) enviando iones, de uno en uno, que interaccionan sucesiva e individualmente con el mismo y único fotón confinado en la cavidad. La duración total de todas esas interacciones sucesivas es inferior a τ_{fc} . Y, en este punto, conviene matizar lo siguiente. Puede considerarse que todos los iones están idénticamente preparados y que el fotón, antes y después de interaccionar con cada ión, está esencialmente (con buena aproximación) en el mismo estado. Cada ión (i) que se envía y el mismo y único fotón (f) constituyen una copia individual, que denominamos $S_{i,f}$. Y el conjunto $C[S_{i,f}]$ de todas las $S_{i,f}$ constituye, en el caso actual, el conjunto de todas las copias idénticas del sistema ión-fotón, que es necesario para repetir experimentos, obtener una estadística de resultados y evaluar probabilidades. Es decir, en el caso actual parecería tener sentido que una función de onda en el espacio de momentos representase una entidad cuántica individual (el fotón confinado), pero al estudiar procesos dinámicos ión-fotón parece inevitable considerar un conjunto de copias idénticas.

Recíprocamente, es también posible aislar experimentalmente un único ión en una trampa durante un cierto tiempo τ_{ia} y enviar fotones, de uno en uno, que interaccionan sucesiva e individualmente con el ión atrapado: véase también el apéndice T. El ión atrapado sería una copia individual y podría representarse por una función de onda, sin necesidad de considerar copias adicionales de iones idénticamente atrapados. Pero las interacciones de los sucesivos fotones idénticamente preparados con el ión único parecen requerir inevitablemente un conjunto de copias idénticas del sistema ión-fotón para, repitiendo el experimento, dar lugar a unas probabilidades, como en el caso anterior del fotón confinado en la cavidad.

En resumen, parece adecuado que, en los casos generales y para todo t , lo que Ψ represente sea un conjunto de copias idénticas e idénticamente preparadas. Véanse las secciones 6.9 y 18.5.

NOTA ADICIONAL

Como una extensión natural del contenido de este apéndice, reseñaremos que muy recientemente se han realizado interferómetros atómicos en los que la onda de materia

asociada a un átomo (y no a un neutrón o electrón) interfiere consigo misma. El interés de ello es que, a temperatura ambiente ($T \approx 300$ K), la longitud de onda de de Broglie (λ) para átomos es unas 10.000 veces menor que la longitud de onda de la luz visible, es decir, tales interferómetros atómicos son mucho más sensibles que los ópticos. Una serie de experimentos de doble rendija (como el esquematizado en la figura F.4 para neutrones) ha sido llevada a cabo por Carnal y Mlynek (1991) con átomos de helio. Ahora la anchura de cada rendija es 10^{-6} m, la separación entre ambas es 8×10^{-8} m, y la λ media para cada átomo es 0.56 \AA (correspondiente a $T = 295$ K) en un experimento y 1.03 \AA (para $T = 83$ K) en otro. Cada átomo completo pasa simultáneamente a través de ambas rendijas, tras lo cual las dos posibilidades (con funciones de onda Ψ_I y Ψ_{II}) se recombinan (dando lugar a la función de onda total $\Psi_I + \Psi_{II}$) y, posteriormente, el átomo es detectado. Las franjas de interferencia obtenidas tienen buen contraste. Otro interferómetro (que, en particular, ha requerido nuevas técnicas de obtención de redes de difracción) y otra serie de experimentos con átomos de sodio han sido realizados por Keith, Ekstrom, Turchette y Pritchard (1991). Un interesante resumen de dichos interferómetros, así como de otro procedimiento que (mediante pulsos de luz láser) también permite realizar interferencias de un átomo completo consigo mismo, puede verse en Flam (1991). Ha sido posible efectuar un experimento de interferencia en doble rendija con sistemas, también microscópicos, pero más grandes, concretamente con moléculas de fullerenos C_{60} . Una molécula de fullereno C_{60} es un estado ligado constituido por 60 núcleos de carbono (y por un cortejo electrónico). En el experimento cada molécula de fullereno actúa como una entidad indivisible, y, así, es toda su masa M la que da lugar a (y la que hay que utilizar para evaluar) su longitud de onda de de Broglie. De nuevo, el experimento realizado por Arndt, Nairz, Vos-Andreae, Keller, van der Zouw y Zeilinger (1999) puso de manifiesto la interferencia de la onda de materia asociada a cada molécula de fullereno C_{60} consigo misma. Los mismos autores señalan que también han observado las interferencias al utilizar C_{70} . Es también interesante mencionar experimentos acerca de:

- a) Difracción de electrones, también por un haz estacionario de luz, debido a Freimund, Aflatooni y Batelaan (2001).
- b) Interferencia de la función de onda de un electrón por Liang, Bockrath, Bozovic, Hafner, Thinkham y Park (2001) (lo cual puso de manifiesto, una vez más, su naturaleza mecano-cuántica), utilizando un nanotubo como guía de onda.

BIBLIOGRAFÍA

- Alcober Bosch, V. (1989). *Revista Española de Física*, vol. 3, núm. 2, 37, 1989, y vol. 4, núm. 2, 23.
- Arndt, M., Nairz, O., Vos-Andreae, J., Keller, C., van der Zouw, G. y Zeilinger, A. (1999). *Nature*, 401, 680.
- Bacon, G. E. (1962). *Neutron Diffraction*. Londres: Oxford University Press.
- Ballentine, L. E. (1998). *Quantum Mechanics. A Modern Development*. Singapur, World Scientific.
- Byrne, J. (1994). *Neutrons, Nuclei and Matter: An Exploration of the Physics of Slow Neutrons*. Bristol, Institute of Physics Publishing.

- Carnal, O. y Mlynek, J. (1991). *Phys. Rev. Lett.*, 66: 2689.
- Colella, R., Overhauser, A. W. y Werner, S. A. (1975). *Phys. Rev. Lett.*, 34: 1472.
- Flam, F. (1991). *Science*, 252: 921.
- Freimund, D. L., Aflatooni, K. y Batelaan, H. (2001). *Nature*, 413, 142.
- Greenberger, D. M. (1983). *Rev. Mod. Phys.*, 55: 875.
- Greenberger, D. M. y Overhauser, A. W. (1979). *Rev. Mod. Phys.*, 51: 43.
- Iannuzzi, M., Orecchini, A., Sacchetti, F., Facchi, P. y Pascazio, S. (2006). *Phys. Rev. Lett.*, 96: 080402 (experimento con un haz de neutrones térmicos libres, producidos en un reactor nuclear, que pone de manifiesto que aquéllos son fermiones, descritos por funciones de onda antisimétricas: por tanto, la probabilidad de que dos neutrones del haz, en el mismo estado de espín, puedan estar en el mismo instante en la misma posición espacial es nula; dicho fenómeno para neutrones, también conocido como *antibunching*, tiene un papel complementario del efecto establecido experimentalmente por R. Hanbury Brown y R. Q. Twiss en *Nature*, 1956, vol. 177, 27, para fotones: estos últimos, por ser bosones, se describen mediante funciones de onda simétricas). Fenómenos de *antibunching* similares han sido observados experimentalmente en gases densos formados por átomos idénticos fermiónicos (es decir, cada átomo puede considerarse un fermión); véase C. Day, *Physics Today*, marzo, 2007, y las referencias allí citadas.
- Keith, D. W., Ekstrom, C. R., Turchette, Q. A. y Pritchard, D. E. (1991). *Phys. Rev. Lett.*, 66: 2693.
- Liang, W., Bockrath, M., Bozovic, D., Hafner, J. H., Tinkham, M. y Park, H. (2001). *Nature*, 411, 665.
- Rauch, H. (1986). «Neutron Interferometry and Quantum Mechanics», en *Fundamental Aspects of Quantum Mechanics* (editores V. Gonnì y A. Frigerio). Nueva York: Plenum Press.
- Steyerl, A. (1984). «Neutron Wave Optics with Ultracold Neutrons», en *The Wave Particle Dualism*, editores, S. Diner et al., D. Reidel Publishing Company, pp. 85-99.
- Summhammer, J., Badurek, G., Rauch, H., Kischko, U. y Zeilinger, A. (1983). *Phys. Rev.*, A27: 2523.
- Werner, S. A., Colella, R., Overhauser, A. W. y Eagen, C. F. (1975). *Phys. Rev. Lett.*, 35: 1053.
- Workshop on Reactor Based Fundamental Physics, Institut Laue-Langevin, Grenoble, 7-9 de noviembre de 1983. *Journal de Physique*, 1984, 45: C3.
- Zeilinger, A., Gahler, R., Shull, C. G., Treimer, W. y Mampe, W. (1988). *Rev. Mod. Phys.*, 60: 1067.

G

Teorías de variables ocultas. Resultados experimentales

R. F. Álvarez-Estrada

G.1. MECÁNICA CUÁNTICA Y TEORÍAS DE VARIABLES OCULTAS: ALGUNAS GENERALIDADES

Ampliaremos aquí nuestro análisis acerca de la interpretación probabilística, iniciado en el capítulo 6 y desarrollado en los capítulos 7 y 15. En este libro nos hemos adherido a la interpretación aceptada por la gran mayoría de la comunidad científica. Dicha interpretación acepta que la función de onda Ψ da las probabilidades de los posibles resultados de medidas sobre un gran conjunto de copias idénticas (análogamente preparadas) de un sistema microscópico individual SF y que Ψ y dichas probabilidades constituyen la información más completa que es posible obtener sobre SF . Otras ideas básicas (que forman parte, genéricamente, de lo que también se conoce como la interpretación de Copenhague) son las siguientes:

1. Cuando un sistema microscópico evoluciona en presencia de un aparato de medida, es imposible separar la descripción del primero de la del segundo: éste siempre influye sobre aquél. Se rechaza la idea de que se pueda atribuir propiedades objetivas (independientes del aparato de medida) a los sistemas microscópicos.
2. Diversas variables dinámicas del sistema microscópico están sometidas a la complementariedad (recuérdese el capítulo 3), o bien, dichas variables se agrupan constituyendo parejas complementarias. Los dos operadores asociados a cada una de esas parejas, genéricamente, no conmutan entre sí; por ejemplo,

$$x \text{ y } p_x \left(= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

De forma natural, se acepta que cualquier intento de determinar o medir una de esas variables (por ejemplo, x) produce una incertidumbre en la variable complementaria (p_x). Esto está de acuerdo con las relaciones de incertidumbre.

3. Supongamos que un sistema microscópico está representado en el instante t por el estado o función de onda normalizada Ψ , y consideremos la variable dinámica A (A puede ser la energía, una componente de la posición, etc.). Sean Ψ_j los autoestados o autofunciones del operador autoadjunto A con autovalores correspon-

dientes a_j , esto es $A\Psi_j = a_j\Psi_j$ (omitimos posibles degeneraciones, por sencillez). Según se discutió en el apéndice B, se tiene

$$\Psi = \sum_j C_j \Psi_j \quad , \quad \sum_j |C_j|^2 = 1 \quad , \quad \langle A \rangle = \sum_j a_j |C_j|^2 \quad [\text{G.1.1}]$$

Imaginemos que, en el instante t , un aparato de medida mide la variable dinámica A en el sistema y que el resultado de la medida es a_i (uno de los posibles autovalores de A , necesariamente). Supongamos que *inmediatamente* después, esto es, tras un lapso temporal infinitesimalmente pequeño después de t , el aparato vuelve a medir la misma variable A en el sistema microscópico. Para una clase muy importante de variables A , en la que nos concentraremos enteramente (por ejemplo, la posición), es físicamente natural lo siguiente. El resultado de esa segunda medida debe ser el mismo, es decir, de nuevo a_i , *siempre y con certeza*. La consecuencia es que, *debido a esa certeza*, el sistema debe estar, justo tras la primera medida y antes de la segunda, en el autoestado Ψ_i relativo al autovalor a_i , necesariamente. Esto es, debido a la interacción con el aparato inherente a la primera medición, el sistema microscópico ha pasado de Ψ a Ψ_i ; este «salto» recibe el nombre de reducción de la función de onda. La interpretación de Copenhague *no* dice cómo se efectúa esta reducción, simplemente la acepta como un hecho.

Por todo ello (y dejando aparte situaciones especiales como la de las dos medidas sucesivas, que acabamos de mencionar), la Mecánica Cuántica es genuinamente incapaz de predecir, en el caso general, resultados de medidas, *con certeza* (con probabilidad igual a la unidad en todos los casos) en dichos sistemas.

Aunque la interpretación de Copenhague ha sido aceptada por la mayor parte de la comunidad científica, diversos físicos a lo largo de los años, han intentado buscar nuevos parámetros para un sistema microscópico individual, tales que su especificación permita predecir, con certeza y en general, el resultado de cualquier medida en éste. Esos parámetros se denominan, genéricamente, variables ocultas, y van más allá de la Mecánica Cuántica, pues pretenden ofrecer más información que la que ésta proporciona acerca de un sistema físico. Se denominan teorías de variables ocultas todos aquellos modelos para un sistema microscópico basados en las hipótesis siguientes:

- i) La descripción mecano-cuántica es genuinamente incompleta.
- ii) Es posible especificar el estado de un sistema individual más de lo que la descripción cuántica permite.

El realismo es un punto de vista filosófico según el cual la realidad externa del mundo físico existe por sí misma y tiene propiedades definidas, *sea o no observada* (es decir, con o sin aparato de medida).

Consideremos dos regiones espaciales R_1 y R_2 . Supongamos que es imposible que una señal luminosa, a velocidad c , se propague partiendo de algún punto de R_1 en t_1 hasta

llegar a algún punto de R_2 en t_2 : diremos que R_1 y R_2 tienen una «separación de género espacial». Imaginemos que los resultados de medidas relativas a los fenómenos F_1 y F_2 , que ocurren, respectivamente, en las regiones R_1 y R_2 (con separación de género espacial) son independientes. Una teoría de variables ocultas que acepta este último requisito con validez general se suele llamar local, aunque sería más correcto denominarla separable.

J. S. Bell obtuvo unas importantes relaciones, denominadas genéricamente «desigualdades de Bell». Éstas han de ser verificadas por los resultados de medidas efectuadas sobre sistemas microscópicos hipotéticos descritos por teorías de variables ocultas realistas (es decir, basadas en el realismo) y locales. El interés de las desigualdades de Bell es enorme. Por un lado, las desigualdades son violadas, en determinadas condiciones, por las predicciones de la Mecánica Cuántica. Esto es lógico, pues ésta proporciona una información genuinamente diferente de la que resulta de las teorías de variables ocultas. Por otro lado, ha sido posible realizar experimentos, y contrastar si sus resultados verifican las desigualdades de Bell y si, en caso de violarlas, esto ocurre en la forma predicha por la Mecánica Cuántica. Descripciones detalladas de las teorías de variables ocultas y de las desigualdades de Bell caen fuera del nivel de este libro. Lo mismo ocurre con la llamada paradoja de Einstein, Podolsky y Rosen, íntimamente relacionada con aquellas teorías. El lector interesado en todos estos temas encontrará información y discusiones claras e interesantes en las referencias dadas al final de este apéndice.

Aun así, parece conveniente ofrecer en este libro una descripción somera de los experimentos mencionados y de sus resultados en comparación con las predicciones de las teorías de variables ocultas y con las de la Mecánica Cuántica. Ésos serán los objetivos de la mayor parte de este apéndice. Antes de ello, señalaremos que también es interesante conocer la existencia de otras teorías o interpretaciones alternativas a la Mecánica Cuántica «ortodoxa» tratada en este libro. Entre dichas alternativas, cabe citar:

1. La de la onda piloto¹, de L. de Broglie (extendida por D. Bohm).
2. La estocástica.

Una presentación detallada de ellas cae fuera del marco del presente libro. El lector interesado encontrará interesantes exposiciones de ellas (así como de sus limitaciones) en Bell (1990), Bohm y Hiley (1987 y 1989), Bohm, Hiley y Kaloyerou (1987) y Holland (1995).

¹ En esta teoría, que combina conceptos clásicos y cuánticos, la difracción de un electrón por una doble rendija se interpretaría así: i) se acepta que el electrón pasaría, necesariamente, por una sola de las rendijas; ii) la onda «piloto» que le acompañaría lo haría a través de ambas a la vez, originando así el fenómeno de la difracción, y iii) el electrón, al otro lado de la pantalla, no se encontraría donde la interferencia de las ondas difractadas fuese destructiva, sino allá donde fuera constructiva. Una extensión de dicha teoría al caso electromagnético conduce a la siguiente imagen: habría ondas electromagnéticas y fotones, de modo que las primeras actuarían como «guías» o «pilotos» para los segundos. Se aceptaría que dichas ondas no sólo darían las probabilidades para detectar fotones, sino que, además, tendrían cierta realidad física. Wang, Zou y Mandel (1991) han realizado experimentos para someter a prueba las predicciones de la teoría de la onda piloto en el caso electromagnético. Sus resultados experimentales contradicen claramente dichas predicciones, pero resultan ser compatibles con las de la Mecánica Cuántica.

G.2. EMISIÓN DE FOTONES EN CASCADA

Consideremos un átomo (Ca, Hg, deuterio), inicialmente en un estado estable, que pasa, mediante la acción de un agente externo, a uno excitado. Supondremos que, desde éste, realiza dos saltos cuánticos sucesivos en cascada entre niveles atómicos, emitiendo en cada uno un fotón hasta que llega a otro estado más estable (eventualmente, el fundamental). Lo interesante es detectar los dos fotones (γ_1, γ_2) en coincidencia y analizar sus estados de polarización, es decir, de espín. Una representación muy esquemática de los diversos experimentos se muestra en la figura G.1.

Algunas transiciones atómicas, típicas de tales experimentos se especifican a continuación:

- Ca en el estado $4S^2 1S_0$ se excita al $3d4p 1P_1$, que pasa a $4p^2 1S_0$. Desde aquí se produce la cascada, pasando sucesivamente a $4p4S 1P_1$ y de éste a $4S^2 1S_0$, emitiendo γ_1 y γ_2 , respectivamente. Las longitudes de onda de γ_1 y γ_2 son 551.3 nm y 422.7 nm (nm designa un nanómetro = 10^{-9} m).
- El isótopo ^{200}Hg se excita al estado 7^3S_1 , que efectúa dos saltos sucesivos, en cascada, a los estados 6^3P_1 y 6^1S_0 (estable). Los fotones emitidos tienen longitudes de onda 435.8 nm y 253.7 nm, respectivamente.

Como radiaciones de excitación se utilizan, típicamente, haces de electrones o radiación láser o, a veces, ambos sucesivamente.

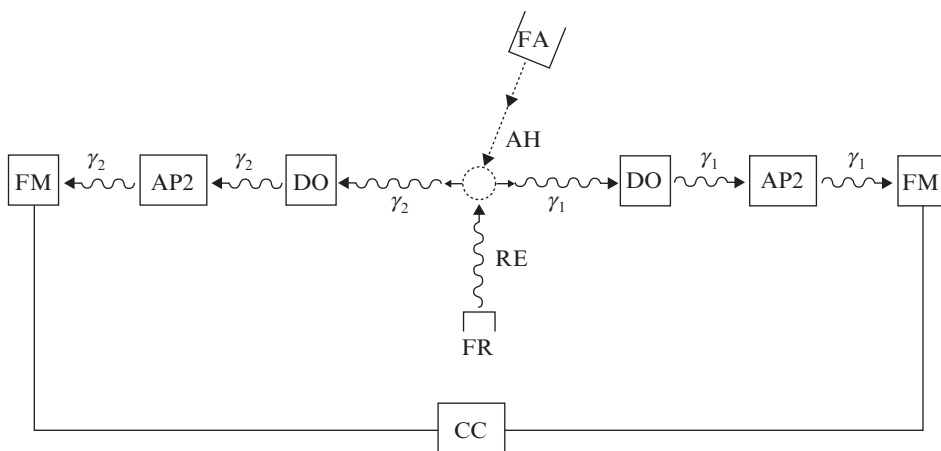


Figura G.1. Los átomos de un haz (AH), emitido por la fuente FA, son excitados a un nivel atómico inestable en la región R mediante la radiación de excitación RE (emitida por la fuente FR). Los átomos vuelven a un nivel más estable, emitiendo dos fotones en cascada, γ_1 y γ_2 , que pasan por analizadores de polarización lineal AP1, AP2, antes de llegar a los fotomultiplicadores FM, que forman parte de un circuito en coincidencia CC. DO representan dispositivos ópticos (filtros y lentes).

En los experimentos realizados se miden las siguientes cantidades físicas:

1. El número de veces, $R(\phi)$, que ambos fotones γ_1 y γ_2 son detectados en coincidencia por ambos fotomultiplicadores FM, cuando el plano de polarización del polarizador AP1 forma un ángulo ϕ con el de AP2.
2. Los números de veces, R_1 y R_2 que los dos fotones se detectan en coincidencia cuando uno de los polarizadores se retira, dejando que el otro actúe. Concretamente, R_1 corresponde al caso en que AP1 está presente y AP2 retirado, y análogamente con R_2 . Por su brevedad, omitiremos referencias a R_1 y R_2 en lo que sigue.
3. El número de veces, R_0 , que ambos fotones son detectados en coincidencia cuando ambos AP1 y AP2 han sido retirados.

En el caso presente, unas desigualdades de Bell, expresadas en una forma adecuada para su contraste con resultados experimentales, son

$$-0.25 \leq \eta \leq +0.25 \quad [\text{G.2.1}]$$

siendo

$$\eta = \frac{R(\phi = 67.5^\circ) - R(\phi = 22.5^\circ)}{R_0} \quad [\text{G.2.2}]$$

Recuérdese que [G.2.1] son válidas si, a su vez, lo son las teorías variables ocultas locales y realistas. A guisa de ilustración, daremos una predicción de la Mecánica Cuántica (basada en ciertas restricciones, como la de suponer polarizadores perfectos):

$$\eta = -0.354 \quad [\text{G.2.3}]$$

que, claramente, viola las desigualdades anteriores de Bell. Bajo otras condiciones, relacionadas con el experimento en cuestión, la predicción mecano-cuántica puede diferir de [G.2.3]. En cualquier caso, se considerarán situaciones en las que dicha predicción difiere de las desigualdades de Bell [G.2.1]. Los ángulos elegidos en [G.2.2] proporcionan un caso en el que dicha discrepancia es máxima. Diversos experimentos de transiciones atómicas, con emisión de fotones en cascada, así como su comparación con las desigualdades de Bell y con las predicciones de la Mecánica Cuántica, se resumen en la tabla G.1. Dicha tabla también incluye los valores obtenidos experimentalmente para $|\eta|$ ($|\eta|_{\text{exp}}$) y la correspondiente predicción mecano-cuántica ($|\eta|_{MC}$). La tabla G.1 no incluye resultados experimentales ni predicciones mecano-cuánticas para $|\eta|$ en los experimentos de Aspect (1981, b) y (1982) ni en el de Hassan (1986, b), puesto que en ellos se contrastaron otras formas de las desigualdades de Bell que no explicaremos aquí y que pueden verse en las referencias. Nos limitaremos a resaltar que hay excelente concordancia entre los resultados experimentales de Aspect (1981, b) y (1982) y las correspondientes predicciones de la Mecánica Cuántica.

TABLA G.1

Experimento: primer autor (año) (véanse referencias completas al final del apéndice)	$ \eta _{\text{exp}}$	Comparación con la desigualdad de Bell [G.2.1]	$ \eta _{MC}$	Comparación con la predicción de la Mecánica Cuántica
Freedman (1972)	0.300 ± 0.008	Violación	0.301 ± 0.007	Buen acuerdo
Holt (1973)	0.216 ± 0.013	Acuerdo	0.266	Desacuerdo
Clauser (1976, a)	0.2885 ± 0.0093	Violación	0.2841	Buen acuerdo
Clauser (1976, b)	0.235 ± 0.025	Resultados no concluyentes	0.252	Acuerdo
Fry (1976)	0.296 ± 0.014	Violación	0.294 ± 0.07	Buen acuerdo
Aspect (1981, a)	0.3072 ± 0.0043	Violación	0.308 ± 0.002	Buen acuerdo
Aspect (1981, b)		Violación		Buen acuerdo
Aspect (1982)		Violación		Buen acuerdo
Perrie (1985)	0.268 ± 0.010	Violación	0.272 ± 0.008	Buen acuerdo
Hassan (1986, a)	0.271 ± 0.021	Violación	0.272 ± 0.008	Buen acuerdo
Hassan (1986, b)		Resultados no concluyentes		Buen acuerdo

Algunos autores (Marshall (1983), Selleri (1984), Marshall (1985), Santos (1988), Ferrero (1985)) han criticado la interpretación de estos experimentos, pero el consenso favorable a ésta y a su acuerdo con la Mecánica Cuántica es muy mayoritario (véase, por ejemplo, Aspect (1985), Sanz (1987)).

G.3. ANIQUILACIÓN ELECTRÓN-POSITRÓN EN DOS FOTONES

Imaginemos un positrón (e^+) con movimiento muy lento, emitido por una fuente radioactiva (^{23}Na , ^{64}Cu) que encuentra un electrón (e^-), también con velocidad muy pequeña, en un blanco material. Entonces, se produce, con gran probabilidad, una aniquilación de ambos. Si no hay otra materia (núcleos atómicos, por ejemplo) a cortas distancias de la zona de interacción, lo más probable es que el resultado de la aniquilación sea un par de fotones (γ), con momentos prácticamente iguales y opuestos. La energía de cada γ

es del orden de 0.5 MeV. Supondremos que tanto el positrón como el electrón están no polarizados, es decir, fijada una dirección, es igualmente probable que la proyección del espín del positrón sobre ella sea $+\hbar/2$ que $-\hbar/2$, y, análogamente, para el electrón. En estas condiciones, y de acuerdo con la Mecánica Cuántica, los espines de los dos fotones están correlacionados entre sí. Esto quiere decir que, si la proyección del espín de un fotón toma un cierto valor, lo más probable es que la proyección del espín del otro adquiera un valor concreto (esto es, sus dos posibles proyecciones no tienen igual probabilidad). Este hecho, reformulado en términos de los planos de polarización, en los que vibran los dos campos eléctricos, respectivamente asociados a ambos fotones, implica lo siguiente: lo más probable es que ambos planos sean perpendiculares entre sí.

No es fácil construir detectores estandar que permitan medir las correlaciones de esos fotones de energía relativamente alta (en el intervalo de los rayos gamma). Para superar esa limitación y poder medir esas correlaciones, se hará uso de ciertas propiedades del efecto Compton. Así, supongamos que cada uno de los dos fotones producidos en la aniquilación incide, posteriormente, sobre un electrón diferente, produciéndose, así, dos dispersiones fotón-electrón (efecto Compton). En una dispersión de Compton, sea E_{in} el campo eléctrico asociado al fotón incidente. Pues bien, y, de nuevo, de acuerdo con la Mecánica Cuántica en dicho efecto-Compton, lo más probable es que el plano formado por los momentos de los fotones incidente y emitido sea perpendicular a E_{in} . En otros términos, los rayos gamma se producen con máxima probabilidad (máxima sección eficaz) en una dirección perpendicular a E_{in} . Así pues, las dos dispersiones Compton hacen el papel de analizadores de polarización lineal de los dos fotones producidos en la aniquilación $e^- - e^+$.

Se han realizado diversos experimentos en los que se han medido las correlaciones de los dos fotones reemitidos tras ambos efectos Compton, al ser registrados en sendos detectores, conectados mediante un circuito de coincidencia.

Una representación esquemática de todo el proceso se da en la figura G.2. Específicamente, se cuenta el número de pares de fotones que llegan a los dos detectores en coincidencia, para diversas orientaciones entre los dos planos de dispersión Compton de ambos fotones. A posteriori, el número de detecciones en coincidencia permite determinar y verificar la correlación entre los espines de los dos fotones emitidos en la aniquilación $e^- e^+$, y, tras hacer algunas hipótesis, comparar con las predicciones de la Mecánica Cuántica.

Diversos experimentos, así como la comparación de sus resultados con las predicciones de la Mecánica Cuántica, se resumen en la tabla G.2. En general, los resultados de los diversos experimentos mencionados en la tabla, con la excepción del de Faraci et al., tienden a ser inconsistentes con las predicciones de las teorías de variables ocultas.

Clauser y Shimony (1978) han observado que la interpretación de los experimentos basados en la aniquilación $e^- - e^+$ requiere hipótesis más fuertes que los relativos a emisión de fotones en cascada. Por tanto, según dichos autores, los experimentos resumidos en esta sección son menos decisivos que los de la sección G.2 por lo que se refiere a refutar las teorías de variables ocultas realistas y locales. Sin entrar en un debate sobre ello, al menos parece claro que los experimentos de aniquilación $e^- - e^+$ proporcionan nuevas pruebas, interesantes e independientes (de las de la sección G.2), de la consistencia de la Mecánica Cuántica.

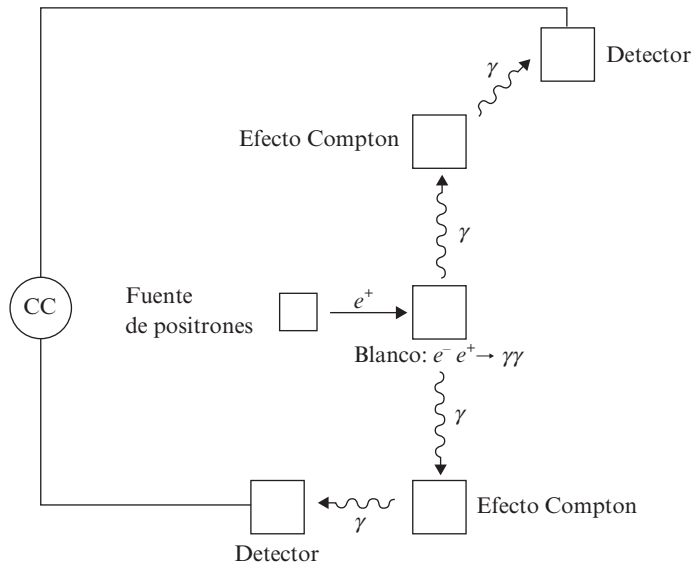


Figura G.2. Aniquilación $e^+ - e^-$ produciendo dos fotones. Estos últimos experimentan, posteriormente, sendos efectos Compton. CC representa un circuito en coincidencia.

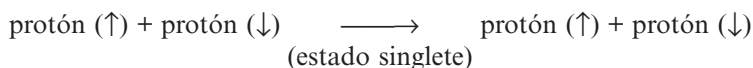
TABLA G.2

Experimento: primer autor (año) (véanse referencias completas al final del apéndice)	Comparación con la predicción de la Mecánica Cuántica
Langhoff (1960)	Buen acuerdo
Faraci (1974)	Desacuerdo
Kasday (1975)	Buen acuerdo
Wilson (1976)	Buen acuerdo
Bruno (1977)	Buen acuerdo

G.4. DISPERSIÓN ELÁSTICA PROTÓN-PROTÓN A BAJA ENERGÍA

Resumiremos un interesante experimento de dispersión elástica protón-protón a baja energía realizado por Laméhi-Rachti y Mittag en 1976.

Un haz de protones, con energías cinéticas no-relativistas $E = 13.2$ o 13.7 MeV, fue enviado sobre un blanco conteniendo hidrógeno. A esas energías, lo más probable, según la Mecánica Cuántica, es que la interacción protón-protón se produzca cuando las proyecciones de sus espines sobre un eje sean opuestas (espines antiparalelos), es decir, cuando sus estados de espín formen un estado singlete (véanse los capítulos 13 y 22). Podemos representar esa situación así:



La interacción se produce a energía tan baja que el momento angular orbital del sistema (en su centro de masas) es $l = 0$ muy predominantemente, de acuerdo con la Mecánica Cuántica (capítulo 18).

Cada uno de los dos protones dispersados interacciona, de nuevo y separadamente, con un blanco distinto de carbono, tras lo cual es registrado por detectores L_1 (o R_1) y L_2 (o R_2). Es decir, en unos casos los pares de protones dispersados, tras interaccionar con los dos blancos de carbono, son registrados en L_1, L_2 , en otros por L_1, R_2 , etc. Los blancos de carbono desempeñan aquí el papel de analizadores de polarización. El par de detectores L_1, R_1 está, esencialmente, en el plano P_1 en el que se produce la dispersión inicial protón-protón. El grupo L_2, R_2 está en otro plano, P_2 , que forma un cierto ángulo θ con el plano P_1 . Véase la figura G.3.

Se registraron detecciones de parejas de protones en coincidencia cuando uno llegó al grupo de detectores L_1 o R_1 y otro al grupo L_2 o R_2 . Se estudiaron los diversos números de detecciones en coincidencia según se hubieren producido en (L_1, L_2) , (L_1, R_2) , etc., al variar θ , y (tras hacer ciertas hipótesis) se comparó con la predicción de la Mecánica Cuántica.

Los resultados de este experimento:

- i) Son ciertamente compatibles con la Mecánica Cuántica.
- ii) Tienden a ser inconsistentes con las teorías de variables ocultas (aunque no tienen la precisión suficiente para garantizar una violación estricta de las correspondientes desigualdades de Bell).

Según Clauser y Shimony (1978), este experimento se apoya en hipótesis aún más restrictivas (en particular, de carácter mecano-cuántico) que los basados en la aniquilación $e^- - e^+$. Las diversas observaciones del final de la sección G.3 también se aplicarían al experimento descrito en esta sección.

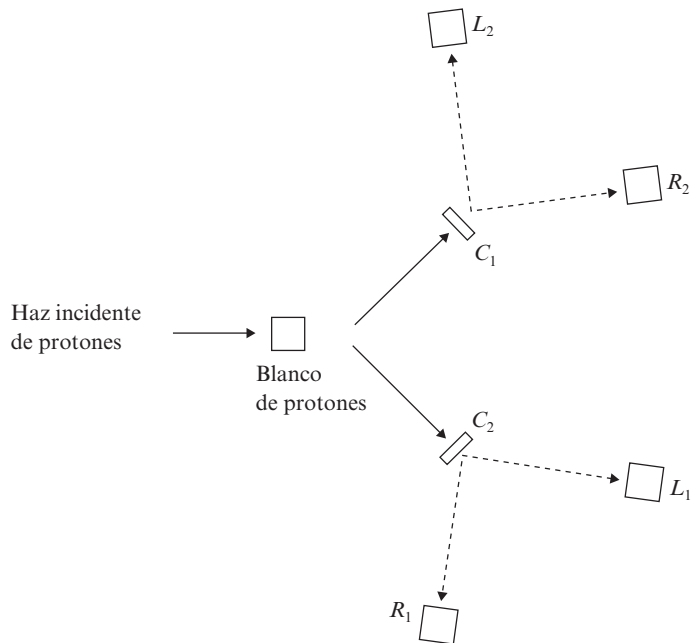


Figura G.3. Representación esquemática del experimento de Laméhi-Rachti y Mittag. L_1 , R_1 , L_2 y R_2 son detectores. C_1 y C_2 representan sendos blancos conteniendo carbono.

G.5. MEDICIONES SUCESIVAS EN UN SISTEMA MECANO-CUÁNTICO

Imaginemos un sistema microscópico sobre el cual se efectúan sucesivamente dos mediciones separadas entre sí por un tiempo muy corto. Bohm y Bub propusieron una teoría de variables ocultas que predecía, para la segunda medición, resultados diferentes de los de la Mecánica Cuántica (discutidos previamente en la sección G.1 de este apéndice). Con objeto de comparar la teoría de Bohm y Bub con la Mecánica Cuántica, Papaliolios realizó un interesante experimento en 1967 (utilizando haces de fotones de baja intensidad y tres analizadores de polarización). El resultado experimental no tuvo la precisión suficiente para descartar la teoría de Bohm y Bub (si bien debilitó la confianza en su credibilidad) y fue, por otra parte, consistente con la predicción mecano-cuántica.

G.6. RELACION DE INCERTIDUMBRE POSICION-MOMENTO: EXPERIMENTOS

Los estudios sobre la relación de incertidumbre posición-momento (consecuencia fundamental de la complementariedad, es decir, de la dualidad onda-corpúsculo), presentados en las secciones 3.5 y 7.8, serán ampliados y correlacionados aquí.

En la sección 3.5, al analizar el experimento idealizado (de Bohr) se consideraron sucesivamente la indeterminación Δp_x en el momento (ecuación [3.5.1]) y el límite de precisión Δx (ecuación [3.5.2]), obteniéndose la relación de indeterminación [3.5.3], que es semicuantitativa. Véase también la ecuación [3.5.4] y el comentario debajo de ella. En el argumento de la sección 3.5, el sentido e interpretación que se dieron a dichas Δp_x y Δx procedían directamente de la dualidad onda-corpúsculo: más precisamente, del estudio del efecto Compton y de ideas básicas, proporcionadas por la Óptica sobre la resolución de un microscopio. En otros términos, en la sección 3.5 (y en la 3.6) se consideró la precisión en la medición de una variable de una entidad microscópica y la perturbación e indeterminación que, inevitablemente, se producen en los valores de la variable complementaria de la primera.

Por otra parte, en la sección 7.8 se introdujeron las incertidumbres Δp_x y Δx (así, con otras denominaciones aunque con los mismos símbolos empleados en la sección 3.5) de forma matemáticamente precisa, basadas en las distribuciones estadísticas para una función de onda genérica Ψ de los posibles valores de las correspondientes variables (es decir, en el marco de la interpretación probabilística de la Física Cuántica). Y se dedujo matemáticamente la correspondiente desigualdad de incertidumbre [7.8.9]. Dichos valores serían los resultados de posibles medidas repetidas en un gran número de copias idénticas representadas por Ψ , incluso si no se efectuase ninguna medición. Cualitativamente, es natural que las Δp_x y Δx de la sección 3.5 y la [3.5.3] se correspondan físicamente (y, al menos, cualitativamente) con las de la sección 7.8 y la [7.8.9], pero no está claro a priori que sean cuantitativamente coincidentes ni ha sido establecido. Así, no se ofreció ninguna relación cuantitativa, ni entre ambas parejas de magnitudes ni entre la [3.5.3] (semicuantitativa) y la [7.8.9] (desigualdad rigurosa). No es ajeno a ello el hecho de que tampoco se han dado definiciones cuantitativamente precisas de las Δp_x y Δx de la sección 3.5.

Ballentine (1998, capítulo 8) ha enfatizado lo siguiente:

- i) Las incertidumbres Δp_x y Δx de la sección 7.8, cuyo significado estadístico se acaba de recordar, NO son errores de procesos de medición.
- ii) Un estudio experimental para comprobar [7.8.9] NO involucra mediciones simultáneas de x y p . Lo que sí requiere son medidas repetidas de una (p_x) u otra (x) en un gran número de copias idénticas e idénticamente preparadas, representadas todas por el mismo estado Ψ .

Mencionaremos a continuación algunos experimentos de las últimas décadas que han comprobado experimentalmente la validez de la desigualdad [7.8.9]. Se realizaron experimentos de difracción de neutrones con longitud de onda de De Broglie igual a 4.43 \AA por una única rendija (con anchura variable en experimentos sucesivos, entre 4.1 y 21 micras), se obtuvieron las correspondientes distribuciones angulares de intensidad de neutrones difractados, y se verificó [7.8.9]: véase Shull (1969). En un experimento posterior, Nairz et al. (2002) consideraron un haz de moléculas de fullereno C_{60} (procedente de un horno a temperatura 900 K): el haz fue difractado por una estrecha rendija con cierta anchura (Δx) que se hizo variar, en experimentos sucesivos, hasta un mínimo de 70 nm. Se midió la distribución de moléculas C_{60} difractadas en el plano de detección, situado a 1.33 m tras la rendija. El análisis de dicha distribución permitió determinar Δp_x y confirmar experimentalmente [7.8.9] para moléculas grandes, del tamaño de las de C_{60} .

Y volvamos al contenido de la sección 3.5. Sean A y B variables mecano-cuánticas complementarias (no conmutantes, es decir, $[A, B] \neq 0$): por ejemplo, x y p_x . Sean ΔA y ΔB las incertidumbres de A y B para una función de onda genérica Ψ , en el sentido del capítulo 7 (por ejemplo, ΔA estará dada por [7.9.1], sustituyendo H por A y análogamente con B). A continuación caracterizaremos muy brevemente el límite de precisión (también denominado «ruido») $\varepsilon(A)$ en una medición de A y, como resultado de aquélla, la perturbación $\eta(B)$ inducida en B , en un contexto que permita extender la relación de indeterminación [3.5.3] (y no en el de [7.8.9]). Ahora el énfasis se pone en la generación de la perturbación inducida en la variable (complementaria) B , al efectuar una medición de A en el estado Ψ , que Heisenberg consideraba originalmente en su relación de indeterminación [W. Heisenberg (1927). *Zeits. Physik* 43, 172]. Las magnitudes $\varepsilon(A)$ y $\eta(B)$ que constituyen, respectivamente, posibles caracterizaciones cuantitativas de las Δx y Δp_x en la sección 3.5 (cuando $A = x$ y $B = p_x$), tienen estructuras típicas de una desviación cuadrática media, es decir, formalmente similares a [7.8.1] y [7.8.2], pero con ciertas sustituciones adecuadas de $(x - \langle x \rangle)^2$ y $|\Psi|^2$. En el caso de $\varepsilon(A)$ (ruido), $x - \langle x \rangle$ y $|\Psi|^2$ se sustituyen por cierta diferencia de valores de A en una medición (uno relativo a ella y el otro como resultado concreto de ella) y cierta probabilidad de que esa diferencia se produzca. Para $\eta(B)$, la prescripción es similar, pero siendo sustituidos $x - \langle x \rangle$ y $|\Psi|^2$ por otra diferencia y otra probabilidad. Omitiremos las caracterizaciones precisas, que son algo complicadas y pueden verse en Ozawa (2003), Rozema et al. (2012) y en la bibliografía que dan.

La correspondiente generalización de [3.5.3], que se denomina relación de indeterminación ruido-perturbación, es (Ozawa, 2003):

$$\varepsilon(A)\eta(B) + \varepsilon(A)\delta B + \eta(B)\delta A \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [A, B] | \Psi \rangle| \quad [\text{G.6.1}]$$

[G.6.1] también ha sido denominada relación medición-perturbación (Rozema et al., 2012). Nótese que la generalización directa de [3.5.3], cambiando x por A y p_x por B , no es [G.6.1] sino:

$$\varepsilon(A)\eta(B) \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [A, B] | \Psi \rangle| \quad [\text{G.6.2}]$$

Conviene resaltar que, tras las definiciones de $\varepsilon(A)$ y $\eta(B)$, la desigualdad [G.6.1] ha sido obtenida matemáticamente en tanto que [G.6.2] no procede de ninguna demostración, sino que es una conjetura. Se ha realizado un experimento compatible con [G.6.1], pero que viola [G.6.2] (Rozema et al., 2012).

G.7. CONCLUSIÓN

En la actualidad, y según la gran mayoría de los especialistas, la situación (para partículas materiales microscópicas no-relativistas, eventualmente en interacción con fotones) es la siguiente:

- a) No hay contradicciones entre los experimentos, en su conjunto, y las predicciones de la Mecánica Cuántica (pese a que algunas de estas últimas son muy fuertes y más difíciles de cumplir, a priori, que las de las teorías de variables ocultas, realistas y locales). Las alternativas que hasta ahora se han propuesto para «completar» la Mecánica Cuántica son mucho más difíciles de conciliar que ésta con los resultados experimentales.
- b) Aunque no debería afirmarse en principio que una teoría concreta da la descripción más completa concebible de la realidad, todo parece indicar que la Mecánica Cuántica: i) proporciona la máxima información física accesible y posible acerca de un sistema microscópico individual, y únicamente ésa (ya que, en principio, no contiene elementos que no pudieran ser comprobables experimentalmente) y ii) posee toda la potencia predictiva que es o pueda ser accesible experimentalmente (a pesar de preconcepciones filosóficas en contra, aparentemente muy naturales).

Esperamos que el contenido de este apéndice, junto con los de los apéndices E y F harán que el lector aprecie que la Mecánica Cuántica: i) por un lado, continúa siendo, en la actualidad, un tema de investigación vivo y apasionante y, a la vez, ii) es una disciplina científicamente establecida y aceptada, dado que sus predicciones concuerdan con los experimentos realizados hasta la época presente, por muy diversos que sean.

BIBLIOGRAFÍA

- Álvarez Galindo, G. y García Alcaine, G. (1987). *Anales de Física*, A83: 247.
- Aspect, A. y Grangier, P. (1985). *Lett. Nuovo Cimento*, 43: 345.
- Aspect, A., Dalibard, J. y Roger, G. (1982). *Phys. Rev. Lett.*, 49: 1804.
- Aspect, A., Grangier, P. y Roger, G. (1981). *Phys. Rev. Lett.*, 47: 460.
- Aspect, A., Grangier, P. y Roger, G. (1982). *Phys. Rev. Lett.*, 49: 91.
- Ballantine, L. E. (1970). *Rev. Mod. Phys.*, 42: 358.
- Belinfante, F. J. (1973). *A. Survey of Hidden Variable Theories*. Oxford: Pergamon Press.
- Bell, J. S. (1964). *Physics*, 1: 195, y *Rev. Mod. Phys.*, 1966, 38: 447.
- Bell, J. S. (1990). *Lo decible y lo indecible en Mecánica Cuántica*. Madrid: Alianza Editorial.
- Bohm, D. y Bub, J. (1966). *Rev. Mod. Phys.*, 38: 453.
- Bohm, D. y Hiley, B. J. (1987). *Physics Reports*, 144: 323.
- Bohm, D. y Hiley, B. J. (1989). *Physics Reports*, 172: 94.
- Bohm, D., Hiley, B. J. y Kaloyerou, P. N. (1987). *Physics Reports*, 149: 349.
- Bruno, M., Agostino, M. D' y Maroni, C. (1977). *Nuovo Cimento*, B40: 143.
- Clauser, J. F. (1976). *Il Nuovo Cimento*, B33: 740.
- Clauser, J. F. (1976). *Phys. Rev. Lett.*, 36: 1223.
- Clauser, J. F. y Shimony, A. (1978). «Bell's Theorem: Experimental Tests and Implications», *Reports on Progress in Physics*, 41: 1881.
- Duncan, A. J. (1986). *Book of Invited Papers. 10th. Int. Conf. on Atomic Physics*, editores H. Narumi e I. Schimamura, p. 121, Tokio, 25-29 agosto.
- Duncan, A. J. (1986). *Microphysical Reality and Quantum Formalism*, editores G. Tarozzi y A. van der Merwe, D. Reidel, Dordrecht.

- Duncan, A. J. y Kleinpöppen, H. (1988). «Experimental Investigation of the Einstein-Podolsky Rosen Question and Bell's Inequality», en *Quantum Mechanics versus Local Realism*, editor F. Selleri. Nueva York: Plenum Press.
- Einstein, A., Podolsky, B. y Rosen, N. (1935). *Phys. Rev.*, 47: 777.
- Faraci, C., Gutkowski, D., Notarrigo, S. y Pennisi, A. R. (1974). *Lett. Nuovo Cimento*, 9: 607.
- Ferrero, M. y Santos, E. (1985). *Phys. Lett.*, A108: 373.
- Freedman, S. J. y Clauser, J. F. (1972). *Phys. Rev. Lett.*, 28: 938.
- Fry, E. S. y Thompson, R. C. (1976). *Phys. Rev. Lett.*, 37: 485.
- Galindo, A. y Pascual, P. (1989). *Mecánica Cuántica*. Volumen II, apéndices E y F. Madrid: Eudema Universidad.
- García Alcaine, G. y Álvarez Galindo, G. (1987). *Revista Española de Física*, 1: 2, 29.
- Haji-Hassan, T., Duncan, A. J., Perrie, W., Beyer, H. J. y Kleinpöppen, H. (1986). *Abstracts 10th International Conference of Atomic Physics*, editores H. Narumi e I. Shimamura, pp. 63-64, Tokio, 25-29 agosto; *Phys. Lett.*, 1987, A123: 110.
- Holland, P. R. (1995). *The Quantum Theory of Motion*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Holt, R. A. y Pipkin, F. M. (1974). *Harvard University Preprint*.
- Jammer, M. (1966). *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*. Nueva York: McGraw-Hill.
- Jammer, M. (1974). *The Philosophy of Quantum Mechanics*. Nueva York: John Wiley.
- Kasday, L. R., Ullman, J. D. y Wu, C. S. (1975). *Nuovo Cimento*, 825: 663. L. R. Kasday en *Foundations of Quantum Mechanics* (editor, B. d'Espagnat), Nueva York: Academic Press, 1971, pp. 195-210.
- Lamehi-Rachti, M. y Mittag, W. (1976). *Phys. Rev.*, D14: 2543.
- Langhoff, H. (1960). *Z. Phys.*, 160, 186.
- Marshall, T. W., Santos, E. y Selleri, F. (1983). *Lett. Nuovo Cimento*, 38: 417.
- Marshall, T. W. y Santos, E. (1985). *Phys. Lett.*, 107A: 164.
- Papaliolios, C. (1967). *Phys. Rev. Lett.*, 18: 622.
- Perrie, W., Duncan, A. J., Beyer, H. J. y Kleinpöppen, H. (1985). *Phys. Rev. Lett.*, 54: 1790, 2647(E).
- Pipkin, F. M. (1978). «Atomic Physics Tests of the Basic Concepts in Quantum Mechanics», en *Advances in Atomic and Molecular Physics*, 14: 281-340, Academic Press.
- Sánchez-Gómez, J. L. y Sánchez-Ron, J. M. (1983). *Anales de física*, A79: 85, y A81: 40.
- Santos, E. (1988). *Revista Española de Física*, 2: 38.
- Sanz, A. L. y Sánchez-Gómez, J. L. (1987). *Europhysics Lett.*, 3: 519.
- Selleri, F. (1984). *Lett. Nuovo Cimento*, 39: 252.
- Wilson, A. R., Lowe, J. y Butt, D. K. (1976). *J. Phys. G*: 2, 613.
- Wang, L. J., Zou, X. Y. y Mandel, L. (1991). *Phys. Rev. Lett.*, 66: 1111.

Recalamos que el análisis y las discusiones presentadas en este apéndice se han referido a partículas materiales microscópicas no-relativistas (y, eventualmente, a sus interacciones con fotones). Una extensión al caso de partículas materiales relativistas (es decir, a la correspondiente Mecánica Cuántica Relativista) excedería ampliamente el nivel de este libro. El lector interesado puede consultar, por ejemplo:

Sánchez-Gómez, J. L. (1988). *Microphysical Reality and Quantum Formalism*. En A. van der Merwe et al. (eds.), Kluwer Academic Publishers.

Otras referencias de interés son:

Aspect, A. (1999). *Nature*, 398, 189 (análisis y discusión más actualizados de diversos experimentos relativos a las desigualdades de Bell).

- Brown, D. E., Arthur, J., Baron, A. Q. R., Brown, G. S. y Shastri, S. (1992). *Phys. Rev. Lett.*, 69, 699.
- Durr, S., Nonn, T. y Rempe, G. (1998). *Nature*, 395, 33 (difracción de átomos por ondas luminosas estacionarias, destruyéndose las interferencias debido justamente a un fenómeno de enredo o *entanglement*, y no a perturbaciones producidas por la medición).
- Friedman, J. R., Patel, V., Chen, W., Tolpygo, S. K. y Lukens, J. E. (2000). *Nature*, 406, 43 (experimento de superposición cuántica de estados macroscópicos).
- García Alcaíne, G. y Álvarez Galindo, G. (2001). *Revista Española de Física*, 15, 29 (argumentos en contra de la reducción de la función de onda).
- Greenberger, D. M., Horne, M. A. y Zeilinger, A. (1993). «Multiparticle Interferometry and the Superposition Principle», *Physics Today*, agosto, p. 22 (artículo de carácter general).
- Myatt, C. J., King, B. E., Turchette, Q. A., Sackett, C. A., Kielpinski, D., Itano, W. M., Monroe, C. y Wineland, D. J. (2000). *Nature*, 403, 269 (experimento de decoherencia de superposiciones cuánticas).
- Nogues, G., Rauschenbeutel, A., Osnaghi, S., Brune, M., Raimond, J. M. y Haroche, S. (1999). *Nature*, 400, 239 (experimento en el que un fotón individual es detectado sin ser absorbido ni, por tanto, destruido por el detector; el experimento, que pertenece a lo que se denominan la clase de los «quantum nondemolition experiments», requirió una cavidad que sólo permitía estados sin y con un único fotón; lo que hace singular a este experimento es que, por el contrario, en los experimentos habituales los fotones detectados son, ciertamente, absorbidos). Véase el apéndice T.
- Peres, A. (1998). *Quantum Theory: Concepts and Methods*, Dordrecht: Kluwer Academic Publishers (libro de nivel superior. No trata, en general, las aplicaciones habituales de la Física Cuántica. Por el contrario, discute aspectos conceptuales y, entre otros temas, presenta una visión moderna de las desigualdades de Bell, el proceso de medición y la conexión con la teoría de la información).
- Pinkse, P. W. H., Fischer, T., Maunz, P. y Rempe, G. (2000). *Nature*, 404, 365 (experimento en el que, en el interior de una microcavidad, el campo electromagnético correspondiente, en promedio, a un fotón puede atrapar a un átomo sin destruirlo).
- Revista Española de Física*, 2000, 14. Número especial: *Cien Años de Quanta* [se trata de un número monográfico (con contribuciones de diversos autores) que ofrece una panorámica actualizada de múltiples aspectos de la Mecánica Cuántica].
- Row, M. A., Kielpinski, D., Meyer, V., Sackett, C. A., Itano, W. M., Monroe, C. y Wineland, D. J. (2001). *Nature*, 409, 791 (nuevo experimento en el que se encuentra una violación de una desigualdad de Bell al medir correlaciones en iones de berilio; la violación medida está en excelente acuerdo con la predicción de la Mecánica Cuántica, y, por el contrario, no se explica en términos de Física Clásica).
- Schlosser, N., Raymond, G., Protsenko, I. y Grangier, P. (2001). *Nature*, 411, 1024 (experimento en el que un láser crea «trampas» microscópicas, en cada una de las cuales, a lo sumo, un átomo de rubidio puede quedar atrapado durante un intervalo de tiempo máximo de 2 segundos).
- Szrietgiser, P., Guery-Odelin, D., Arndt, M. y Dalibard, J. (1996). *Phys. Rev. Lett.*, 77, 4. (Confirmación experimental de la relación de incertidumbre energía-tiempo.)

Algunos ejercicios ilustrativos simples de las desigualdades de Bell pueden verse en:

Fernández Álvarez-Estrada, R. y Sánchez-Gómez, J. L. (1996). *100 problemas de Física Cuántica*. Madrid: Alianza.

Una exposición actualizada y simplificada de diversos aspectos de la Física Cuántica (el principio de superposición en términos de experimentos con fotones, las desigualdades de Bell y reformulaciones de ellas, en las que se han basado diversos experimentos...) es:

Cassinello, A. y Sánchez-Gómez, J. L. (2013). *La realidad cuántica*. Madrid: Crítica.

Información amplia, variada y actualizada (en consistencia con la Mecánica Cuántica), acerca de otros experimentos sobre la desigualdad de Bell (y desigualdades relacionadas con ella), correlaciones cuánticas y otros temas estrechamente relacionados puede verse en:

Amselem, E. et al. (2012). *Phys. Rev. Lett.* 108: 200405.

Bartosik, H. et al. (2009). *Phys. Rev. Lett.* 103: 040403.

Bovino, F. A. et al. (2006). *Phys. Rev. A* 73: 062110.

Cabello, A. (2011). *Nature* 474: 456.

Canas, G. et al. (2014). *Phys. Rev. A* 90: 032109.

Chen, Y.-A. et al. (2006). *Phys. Rev. Lett.* 97: 170408.

Lima, G. et al. (2010). *Phys. Rev. A* 81: 040101 (R).

Sobre las diversas relaciones de incertidumbre posición-momento y los correspondientes experimentos, resumidos en la sección G.6, pueden consultarse:

Nairz, O., Arndt, M. y Zeilinger, A. (2002). *Phys. Rev. A* 65: 012119.

Ozawa, M. (2003). *Phys. Rev. A* 67: 042105.

Rozema, L. A., Darabi, A., Mahler, D. H., Hayat, A., Soudagar, Y. y Steinberg A. M. (2012). *Phys. Rev. Lett.* 109: 100404.

Shull, C. G. (1969). *Phys. Rev.* 179: 752.

Debe citarse

Weinberg, S. (2013). *Lectures on Quantum Mechanics*. Cambridge: Cambridge Univ. Press.

La sección 3.7 de este libro revisa diversas interpretaciones de la Mecánica Cuántica, sin aceptar ningún cambio en los fundamentos de ésta (es decir, aceptando [6.4.9] y su generalización en [7.12.9] y [7.12.10] y excluyendo enteramente variables ocultas). Se concentra en: i) la llamada «interpretación de los muchos universos», señalando algunas de sus dificultades, e ii) la denominada «interpretación de las historias decoherentes o consistentes» (en la que la función de onda se limita a proporcionar probabilidades, descartando de entrada que de una descripción más completa que la probabilística del estado físico de un sistema microscópico), que puede considerarse como una reinterpretación (con algunos matices) de la interpretación de Copenhague y en la que no encuentra inconsistencias. De todas formas, el autor expresa: *a)* su insatisfacción con la idea de que la función de onda se limite a dar un algoritmo para calcular probabilidades y de que no exista una descripción más completa de los estados físicos de un sistema microscópico; *b)* su juicio (al menos, personal) de que no existe actualmente ninguna interpretación de la Mecánica Cuántica que esté libre de producir alguna insatisfacción o de generar debates interpretativos, y *c)* su impresión (no menos personal) de que podría haber alguna otra teoría de la cual la actual Mecánica Cuántica que conocemos fuese una buena aproximación.

H

Bandas en una dimensión: modelo de Krönig-Penney

José Luis Vicent

Un caso muy sencillo de plantear y relativamente simple de resolver es el de una cadena lineal de átomos, todos iguales y separados la misma distancia. El único inconveniente de tratar con este modelo es que estamos en un caso irreal. A pesar de ello, merece la pena analizarlo por su evidente valor pedagógico. Como se ha indicado en los correspondientes capítulos, una parte importante de las propiedades de los sólidos emerge de una manera natural de las simetrías del sólido. En el caso ficticio de un sólido unidimensional, todo se simplifica de una manera drástica.

R. L. Krönig y W. G. Penney (1931) estudiaron las funciones de onda y las energías de un sólido unidimensional perfecto. A continuación, siguiendo el desarrollo original de estos autores, se calculará el espectro de energías de tal sistema y se obtendrá, de una manera natural, la existencia de bandas de energía.

Sea una cadena lineal de átomos, todos iguales y separados la misma distancia entre sí. En la figura H.1 se representa esta situación en función del potencial atómico y de la distancia.

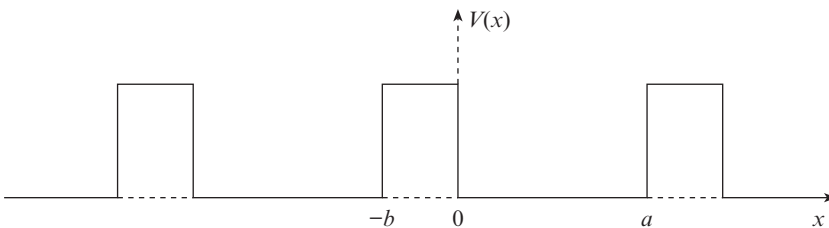


Figura H.1. Forma del potencial en el modelo de Krönig-Penney.

La ecuación de Schrödinger correspondiente será

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} [T - V(x)]\varphi = 0$$

cuya solución, como se vio en la sección 30.1, son las funciones de Bloch

$$\varphi(x) = u(x)e^{iax}$$

En nuestro caso, la función periódica $u(x)$ tiene un período $a + b$. Por tanto, para encontrar explícitamente la función $u(x)$, basta con encontrar la solución en un período, por ejemplo, desde $x = -b$ hasta $x = a$. La ecuación para $u(x)$ tiene la forma

$$\frac{d^2u}{dx^2} = 2i\alpha \frac{du}{dx} - (\alpha^2 + \gamma^2)u = 0$$

para valores de x comprendidos entre $-b \leq x \leq 0$.

La solución es de la forma:

$$u = Ae^{(-i\alpha + \gamma)x} + Be^{(-i\alpha - \gamma)x}$$

Ahora, cuando se tiene x en el intervalo $0 \leq x \leq a$, la ecuación toma la forma

$$\frac{d^2u}{dx^2} + 2i\alpha \frac{du}{dx} - (\alpha^2 - \beta^2)u = 0$$

con la solución

$$u = Ce^{i(-\alpha + \beta)x} + De^{i(-\alpha - \beta)x}$$

donde

$$\beta = \left(\frac{8\pi^2 m}{h^2} T \right)^{1/2}, \quad \gamma = \left[\frac{8\pi^2 m}{h^2} (V_0 - T) \right]^{1/2}$$

Analicemos un poco más estas soluciones. Por lo pronto, las constantes A , B , C y D tienen que ser tales que las soluciones cumplan la condición de que, para $x = 0$, las dos soluciones sean iguales y, asimismo, lo sean las primeras derivadas, es decir, que las funciones solución estén perfectamente conectadas en la frontera, esto es, sean continuas. Pero no son éstas las únicas condiciones que se deben cumplir. Hay que tener presente que las funciones $u(x)$ son periódicas, esto es, de nuevo tenemos que las soluciones y sus primeras derivadas deben ser iguales para $x = -b$ y $x = a$, que, dada la condición de periodicidad, es, en realidad, el mismo punto. El cálculo a partir de este punto resulta un tanto largo; a continuación daremos únicamente los datos más significativos. De momento, de las cuatro condiciones de igualdad antes señaladas resultan las cuatro ecuaciones homogéneas siguientes

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ (-i\alpha + \gamma)A + (-i\alpha - \gamma)B &= i(-\alpha + \beta)C + i(-\alpha - \beta)D \\ Ae^{(i\alpha - \gamma)b} + Be^{(i\alpha + \gamma)b} &= Ce^{i(-\alpha + \beta)a} + De^{i(-\alpha - \beta)a} \\ (-i\alpha + \gamma)Ae^{(i\alpha - \gamma)b} + (-i\alpha - \gamma)Be^{(i\alpha + \gamma)b} &= i(-\alpha + \beta)Ce^{i(-\alpha + \beta)a} + i(-\alpha - \beta)De^{i(-\alpha - \beta)a} \end{aligned}$$

que, a su vez, solamente se pueden satisfacer si las cantidades β y γ cumplen la relación

$$\frac{\gamma^2 - \beta^2}{2\beta\gamma} \sinh \gamma b \sin \beta a + \cosh \gamma b \cos \beta a = \cos \alpha(a + b) \quad [\text{H.1}]$$

El siguiente paso que proponen Krönig y Penney parece una arbitrariedad peligrosa, pero simplifica enormemente el formalismo matemático, al mismo tiempo que no modifica el sentido físico. Estos autores proponen el caso en que el pozo de potencial esté en el límite muy intenso y muy estrecho, formando matemáticamente una sucesión periódica de δ de Dirac con período a , esto es, se considera la situación en la que $b = 0$ y $V_0 \rightarrow \infty$, ahora con la condición de que la cantidad $\gamma^2 b$ permanezca finita, que lo único que significa es que se mantiene constante la «intensidad» del pozo de potencial.

Si llamamos al límite

$$\lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ \gamma \rightarrow \infty}} \frac{\gamma^2 ab}{2} = P \quad [\text{H.2}]$$

se tiene que la relación [H.1] se simplifica enormemente y resulta ser

$$\frac{P \sin \beta a}{\beta a} + \cos \beta a = \cos \alpha a$$

que, de todas formas, es una ecuación trascendente en βa .

Para encontrar las soluciones de esta ecuación recurrimos al método gráfico siguiente (véase figura H.2), donde arbitrariamente elegimos para P el valor $3\pi/2$. Entonces se tiene que los valores de βa solución de la ecuación anterior [H.1], son las proyecciones, en el eje βa , de las intersecciones de la curva (figura H.2) con una línea recta paralela a este eje y dibujada a una distancia $\cos \alpha a$ paralela a este eje. Ahora, dado que el coseno está comprendido entre $+1$ y -1 , y como los valores máximos en el eje Y de esta curva son mayores que 1 , entonces, al variar α (que en realidad es variar k), nos encontramos en que las únicas intersecciones de la curva son trozos confinados entre $+1$ y -1 . El eje X (βa) también está dividido en partes que contienen los valores permitidos de βa (marcados con trazos gruesos en la figura H.2).

El resultado fundamental que se obtiene en esta discusión, que, sin duda, es muy sencilla de plantear desde el punto de vista físico, pero algo complicada de resolver matemáticamente, consiste en que: las energías permitidas de un electrón que se mueve en una red unidimensional perfecta forman un espectro continuo de energías (bandas de energía) separadas por intervalos finitos prohibidos (zanjas de energía).

Este modelo tan trivial permite avanzar algo más de una manera muy simple. Basta para ello jugar con los valores que tiene el parámetro P , definido en la expresión [H.2]. En primer lugar, si $P \rightarrow 0$, es decir, no existen pozos, los intervalos prohibidos de energía desaparecen, tenemos que la curva de la figura H.2 es $\cos \beta a$, se tiene un espectro continuo de energía desde 0 hasta ∞ ; electrones libres. Si, por el contrario, $P \rightarrow \infty$, se tiene que las zonas permitidas son las que ahora se reducen, terminando por ser los puntos $n\pi$ en el eje

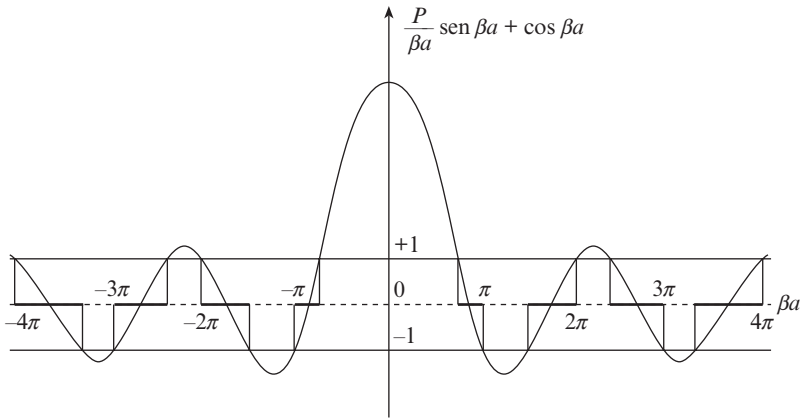


Figura H.2. Representación gráfica de las raíces de la ecuación H.3, suponiendo para P el valor $3\pi/2$.

βa , el espectro de energía es ahora discreto, no tenemos bandas. Los electrones, al contrario que en el caso anterior (electrones libres), se convierten en electrones ligados.

Superconductores de alta temperatura crítica

José Luis Vicent

Se conocen con el nombre de superconductores de alta temperatura crítica a los compuestos descubiertos a partir de 1986, que tienen como origen la familia $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Bednorz y Müller encuentran indicios de superconductividad a temperaturas del orden de 30 K en fases del óxido LaSrCuO . Esta temperatura era muy superior a la temperatura crítica máxima conocida hasta entonces (23 K en Nb_3Ge). Chu y sus colaboradores encuentran unos meses más tarde, a principio de 1987, la familia $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (YBCO en lo que sigue) con $T_c = 92$ K.

Desde el punto de vista de las aplicaciones, estos superconductores son cruciales, porque permanecen en estado superconductor para temperaturas muy superiores a la del nitrógeno líquido (77 K). El N es un gas muy abundante y barato y de muy fácil manejo. La superconductividad anterior a 1986 necesitaba la utilización como líquido criogénico del He, gas muy escaso, muy caro, de temperatura de transición al estado líquido de 4,2 K, por lo que requiere instalaciones costosas y de manejo complicado. Baste decir que, además de necesitarse temperaturas muy bajas, el He es un elemento con propiedades muy peculiares. Por ejemplo, un litro de He en estado gaseoso ocupa un volumen de $0,7 \text{ m}^3$; las precauciones para su utilización y el coste económico hacen que, aunque la superconductividad sea una tecnología bien establecida, su utilización no esté todo lo extendida que pudiera. Esta situación daba un vuelco espectacular con el descubrimiento de la familia YBCO. Actualmente se conocen varias familias más. Citando los compuestos más característicos de cada familia, tendríamos: $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ con temperaturas críticas del orden de 90 K, $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$ (125 K) y $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$, que, bajo presión, alcanza temperaturas críticas del orden de 150 K. Desde el punto de vista de las posibles aplicaciones, la característica más importante de todas estas familias de superconductores de alta temperatura (SAT en lo que sigue) es que son óxidos, más parecidos a una taza de café que a un hilo de Cu. A pesar de las evidentes dificultades tecnológicas, dado el ingente esfuerzo investigador realizado, actualmente se cuentan con láminas delgadas depositadas sobre cintas de acero que son capaces de transportar densidades de corrientes eléctricas de 10^6 A cm^{-2} a temperaturas de 77 K y en presencia de campos magnéticos de 50 kOe. Asimismo, se ha conseguido bajar en 9 órdenes de magnitud el ruido de dispositivos superconductores para la media de campos magnéticos débiles construidos con SAT. Actualmente, estos dispositivos empiezan a ser competitivos con los realizados con superconductores convencionales, pero trabajando en este caso a 77 K y no a 4,2 K.

Desde el punto de vista estrictamente científico, estos nuevos materiales presentan propiedades y efectos extraordinariamente interesantes. A continuación pasaremos, sin querer ser exhaustivos, a resumir brevemente los más importantes:

1. Presentan características propias del efecto superconductor, tal como se explicaban en el capítulo 33, alguna de ellas en grado extremo, como, por ejemplo, las ya mencionadas altas temperaturas críticas, también campos magnéticos críticos sumamente altos. Se tiene cuantización del flujo magnético, con el mismo valor del fluxoide elemental (hc/e^2) que en los superconductores clásicos, efectos Meissner, efecto Josephson, etc.
2. Estructuralmente, son extraordinariamente anisótropos, con planos de Cu-O que desempeñan un papel crucial en la superconductividad. Esta anisotropía hace que presenten una gran dependencia de sus propiedades con los ejes cristalinos. No hay que olvidar que se trata de una transición de fase, es decir, por ejemplo, la temperatura crítica no depende para nada de los ejes, como es obvio, pero, por ejemplo, la longitud de penetración del campo magnético sí. En realidad los parámetros característicos de la superconductividad son muy anisótropos, en algunas familias se tiene comportamientos casi bidimensionales.
3. Diagramas de fases muy complicados, con proximidad en composición a fases aislantes y/o antiferromagnéticas.
4. Estos SAT pueden ser tratados desde el punto de vista teórico con la teoría fenomenológica de la superconductividad clásica (Ginzburg-Landau). Las longitudes coherentes son extraordinariamente anisótropas y muy cortas, del orden de 1 nm.
5. No existe actualmente una teoría microscópica aceptable que explique estos SAT. Los portadores de corriente superconductora son pares de Cooper, pero no se conoce cuál es la interacción, la «goma» que los mantiene ligados. El diagrama de fases (H, T) es muy complejo, con zonas de comportamiento que se pueden asimilar a sistemas líquidos y otros sólidos desordenados, tipo vidrios, y a su vez con distintas características cada uno de ellos.
6. Los SAT, en presencia de campo magnético, presentan grandes diferencias con los clásicos. Por ejemplo, existe una amplia zona reversible del diagrama (H, T) donde la corriente crítica tiende a cero.

J

Efecto Hall cuántico

J. L. Vicent

En 1879, E. H. Hall descubrió el efecto que lleva su nombre, que es una de las herramientas más útiles para obtener información de las propiedades de los metales y de los semiconductores. Asimismo, este efecto es un método de medida, por ejemplo, de campos magnéticos, mediante la utilización de las llamadas sondas Hall.

Poco más de un siglo después del descubrimiento del efecto Hall, en 1981, K. von Klitzing descubre el llamado efecto Hall cuántico. A este curioso efecto le dedicaremos este apéndice, pero, previamente, unas pocas líneas para describir brevemente el efecto Hall.

En la figura J.1 se representa la disposición geométrica del experimento. Si a un conductor por el que pasa una corriente en la dirección X se le aplica un campo magnético perpendicular en la dirección Z , aparece una diferencia de potencial, llamada potencial Hall, en la dirección Y . El origen de este potencial no es ni más ni menos que la fuerza de Lorentz. La explicación es bien sencilla, la fuerza de Lorentz sobre los electrones de conducción es

$$\frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H}$$

Esta fuerza está dirigida en la dirección Y y acumulará electrones en la muestra en la dirección del eje Y . Por tanto, aparece un campo eléctrico en el plano X, Y que se opone al movimiento de más electrones acumulándose en un lado de la muestra. El campo para el cual se produce el equilibrio es el campo Hall, de tal forma que se tiene

$$e\mathbf{E} = \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H}$$

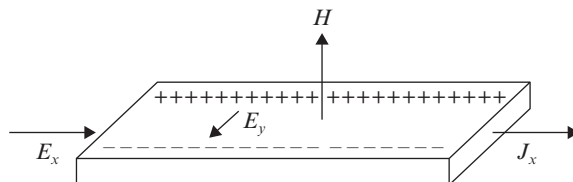


Figura J.1. Geometría de efecto Hall.

Recordando el valor de la densidad de corriente

$$j = nev \tag{J.1}$$

donde n es la densidad de portadores por unidad de volumen. Se define la constante Hall R_H como

$$E_H = R_H j \times H$$

Esta constante es una característica del material.

En primera aproximación se puede obtener una expresión general para el tensor de resistividades con un cálculo muy sencillo.

En estado estacionario se puede escribir

$$v = \frac{e\tau}{m} \left(E + \frac{1}{c} V \times H \right)$$

donde τ es el tiempo de relajación, v la velocidad y m la masa de los portadores.

Si llamamos

$$\mu = \frac{e\tau}{m} \quad ; \quad \xi = \frac{\mu H}{c}$$

La ecuación anterior se puede escribir como

$$v_x = \mu E_x + \xi v_y$$

$$v_y = \mu E_y - \xi v_x$$

$$v_z = \mu E_z$$

Recordando la expresión [J.1] y la expresión de la conductividad

$$J_\lambda = \sigma_{\lambda\nu} E_\nu$$

y teniendo en cuenta que la resistividad es la inversa de la conductividad, se llega a la siguiente expresión para la geometría que estamos considerando ($j_y = 0, j_z = 0, H_y = 0$ y $H_x = 0$)

$$\rho = \frac{1}{ne\mu} \begin{pmatrix} 1 & -\xi & 0 \\ \xi & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Este modelo que acabamos de desarrollar es incompleto; por ejemplo, no da cuenta del efecto conocido como magneto-resistencia transversal, pero es suficiente para el propósito de este apéndice.

Como resultado final, que nos interesa destacar para lo que sigue, la resistividad, cuando se tiene un plano conductor con un campo magnético aplicado perpendicularmente a dicho plano, viene dada por la expresión

$$\rho = \frac{H}{nec} \quad [J.2]$$

A continuación se va a dedicar el resto del apéndice al efecto Hall cuántico. Para ello hay que recordar y repetir el principio de la sección 31.5 sobre los niveles de Landau.

En su forma más simple, el efecto Hall cuántico (EHC en lo que sigue) se refiere a la condensación de electrones en un sistema de dos dimensiones (en principio, un plano) bajo la influencia de un campo magnético intenso y a muy bajas temperaturas.

El EHC proviene de que la densidad de electrones está cuantizada en múltiplos enteros de una constante determinada. Esto se puede ver fácilmente resolviendo la ecuación (sección 31.5)

$$\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi = E\psi$$

Eligiendo un *gauge* donde la variable y no aparezca explícitamente

$$\mathbf{A} = (0, xH, 0)$$

se obtiene

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi + \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{eHx}{c} \right)^2 \psi = \varepsilon\psi$$

donde, escribiendo

$$\frac{eH}{\hbar c} = l^{-2}$$

que tiene una solución del tipo

$$\psi \propto e^{iqy} F(x)$$

donde $F(x)$ es la ecuación de un oscilador armónico desplazado del origen, se tiene finalmente

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{(ix_0 y/l^2)} \phi_n \left(\frac{x - x_0}{l} \right)$$

con $q = x_0/l^2$ y donde ϕ_n es la función de onda normalizada del oscilador armónico

$$\varphi_n(\eta) = \left(\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\eta^2} H_n(\eta)$$

donde $H_n(\eta)$ son los polinomios de Hermite.

Siendo los autovalores de la energía

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

Las funciones propias dependen de dos números cuánticos (x_0 y n), pero solamente n aparece en la energía. Cada valor de n se llama un nivel de Landau y tendremos una condensación del gas de electrones en este conjunto de niveles, cada uno con un número cuántico bien definido n . La degeneración de estos niveles se puede calcular teniendo en cuenta que el momento p debe de estar cuantizado en un sistema finito de área $L_x L_y$, tal que

$$x_0 = \frac{2\pi s}{L_y} l^2$$

donde s es un número entero.

El valor máximo para s se obtiene teniendo en cuenta que el centro de la órbita (x_0) debe permanecer dentro de la dimensión lineal L_x (despreciamos el radio de la órbita, que es muy pequeño cuando el campo magnético es muy intenso; recordar ejercicio 3.51). Se obtiene

$$\frac{2\pi s}{L_y} l^2 \leq L_x \Rightarrow S_{\text{máx}} = \frac{L_x L_y}{2\pi l^2} = \frac{eH}{hc} L_x L_y$$

La densidad de electrones en un nivel de Landau dado es

$$b = \frac{eH}{hc}$$

Como vemos, es independiente del nivel que sea. b es el número, que por unidad de superficie, contienen cada nivel de Landau.

Bajo la condición de que la energía de Fermi, ε_F , esté situada entre dos niveles de Landau consecutivos, la densidad de electrones será un entero múltiplo de b , esto es

$$b = a \frac{eH}{hc} \quad , \quad \varepsilon_a < \varepsilon_F < \varepsilon_{a+1}$$

donde a es un entero.

Sustituyendo en la expresión [J.2], se obtiene

$$\rho = \frac{h}{ae^2}$$

Hemos llegado de esta forma a un resultado extraordinario: el efecto Hall de un gas de electrones en dos dimensiones (en un plano), con un campo magnético intenso y en la dirección perpendicular al plano, está cuantizado con un cuanto elemental formado por constantes universales

$$\frac{e^2}{h}$$

Hay una gran cantidad de experimentos que han confirmado este espectacular efecto. Debido al hecho de que los estados electrónicos están, en estas condiciones, localizados, la resistividad Hall para cada uno de estos valores permanece constante para un intervalo finito de valores de la densidad electrónica. La señal Hall que se recoge en el experimento tiene una serie de plateaux que permiten determinar con gran precisión constantes universales, como la constante de estructura fina, etc.

Desde el punto de vista experimental, actualmente se conocen las técnicas para fabricar dispositivos en los que se den las condiciones necesarias para observar el EHC. Se necesita que los electrones estén atrapados en un «plano», esto es, fabricar un sistema con un carácter de dos dimensiones muy marcado. Los semiconductores en el amplio campo de la microelectrónica son los candidatos más adecuados. En concreto, por ejemplo, sistemas MOSFET (en inglés, transistores de emisión de campo semiconductor-óxido-metal) y superredes o heteroestructuras formadas por el crecimiento de películas muy delgadas de dos semiconductores en una secuencia A-B-A-B alternados, pueden producir pozos de potencial muy estrechos. Hoy en día, en el laboratorio es una técnica casi trivial el crecimiento controlado, capa a capa y átomo a átomo, de muchas de estas estructuras. Se sabe hacer materiales casi a voluntad con un diseño previo de sus propiedades. La técnica experimental para su obtención se conoce con las siglas inglesas MBE (Epitaxia de Haces Moleculares). Desgraciadamente, su descripción está fuera de lugar en este apéndice.

Por último, cabe resaltar que la diferencia entre las dos superficies que encierran el «plano» (gas de electrones en dos dimensiones) es el aspecto experimental crucial para que exista el efecto. La aparición de estados localizados debidos a la imperfección de superficies reales es lo que produce el efecto Hall cuántico. Las dos superficies son distintas, y esto es la clave.

K

El láser

José Luis Escudero
José Manuel Guerra

Los procesos de emisión y absorción estimulados de radiación son utilizados para la realización de un tipo de fuente luminosa basada en la amplificación de la radiación electromagnética. La palabra LASER es el acrónimo anglosajón de *Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*, que significa amplificación de luz por emisión estimulada de radiación.

En este lugar nos proponemos describir de una manera sencilla el funcionamiento de un dispositivo láser.

Consideraremos un colectivo formado por N centros (átomos, moléculas, iones, etc.) que interaccionan con una radiación de energía por unidad de volumen y de intervalo de frecuencia u_ν .

Designemos con las etiquetas 1 y 2 a dos niveles de energía de los centros del colectivo. Absorbiendo un fotón (de energía $E_2 - E_1 \approx h\nu$), un centro puede pasar del nivel de energía E_1 al de energía E_2 (véase figura K.1). Análogamente, emitiendo un fotón, un centro puede pasar desde el nivel E_2 al E_1 .

La presencia de fotones con una densidad de energía u_ν estimula la realización de los procesos de absorción y emisión de fotones.

La probabilidad de que un centro efectúe una transición estimulada entre dos niveles es proporcional a la densidad de energía de radiación u_ν y al tiempo dt durante el que se produce la interacción entre el centro y la radiación. Por otra parte, los fotones emitidos o absorbidos no son todos de la misma frecuencia $\nu = (E_2 - E_1)/h$, sino que, debido a diferentes procesos de interacción externa (colisiones, vibraciones, campo cristalino, etc.) o al efecto Doppler (en los gases), o simplemente al tiempo finito de permanencia en un nivel por emisión no estimulada (principio de incertidumbre energía-tiempo) la probabilidad de transmisión se reparte en frecuencias con una distribución de probabilidad:

$$g(\nu) d\nu \quad ; \quad \int g(\nu) d\nu = 1$$

La distribución de $g(\nu)$ es el perfil espectral de la luminiscencia espontánea.

Por tanto, la probabilidad de que el proceso estimulado producido en el tiempo dt se efectúe con fotones en el intervalo de frecuencias $d\nu$ es proporcional a $g(\nu)u_\nu d\nu dt$.

Entonces, si el número de centros en el nivel E_2 es N_2 , el número de fotones emitidos es:

$$(d^2N_f)_{\text{abs}} = B_{21}u_\nu N_2 g(\nu) d\nu dt$$

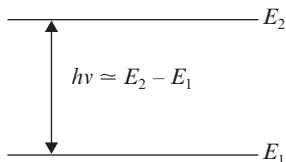


Figura K.1

De la misma forma, el número de fotones absorbidos por los N_1 centros que están en el nivel E_1 es:

$$(d^2N_f)_{\text{abs}} = B_{12}u_\nu N_1 g(\nu) d\nu dt$$

La variación que ha sufrido el número de fotones de la radiación será:

$$d^2N_f = (d^2N_f)_{\text{em}} - (d^2N_f)_{\text{abs}} = (B_{21}N_2 - B_{12}N_1)u_\nu g(\nu) d\nu dt$$

donde B_{21} y B_{12} son los coeficientes de Einstein de transición estimulada. Si V es el volumen ocupado por los N centros y por la radiación, la densidad u_ν es:

$$u_\nu = \frac{dN_1}{V d\nu} h\nu$$

y llamando:

$$n_1 = \frac{N_1}{V} \quad n_2 = \frac{N_2}{V}$$

tendremos:

$$\frac{du_\nu}{dt} = (B_{21}n_2 - B_{12}n_1)u_\nu g(\nu) h\nu$$

En el tiempo dt la radiación ha recorrido una distancia dx a la velocidad c de propagación en el medio material, es decir, que:

$$dt = \frac{dx}{c}$$

y, por tanto, la variación de la energía de los fotones por unidad de espacio recorrido será:

$$\frac{du_\nu}{dx} = (B_{21}n_2 - B_{12}n_1)u_\nu g(\nu) \frac{h\nu}{c}$$

Si los niveles de energía E_2 y E_1 están degenerados con degeneraciones g_2 y g_1 , el número de transiciones desde cada estado del nivel E_2 a todos los estados del E_1 será g_1 , y viceversa, por lo que las probabilidades de transición totales deben estar en la proporción de las degeneraciones, es decir:

$$\frac{B_{21}}{g_1} = \frac{B_{12}}{g_2}$$

Por tanto:

$$\frac{du_\nu}{dx} = \left(\frac{n_2}{g_2} - \frac{n_1}{g_1} \right) g_1 B_{12} u_\nu g(\nu) \frac{h\nu}{c}$$

donde:

$$\frac{n_2}{g_2} \quad \text{y} \quad \frac{n_1}{g_1}$$

son las poblaciones de centros en los estados degenerados de energías E_2 y E_1 , respectivamente.

Observamos que durante su camino dx , el incremento du_ν de la energía de radiación puede ser positivo o negativo, dependiendo de que la población de los estados de más energía sea mayor o menor que la de los estados de menor energía:

$$\frac{n_2}{g_2} > \frac{n_1}{g_1} \Rightarrow du_\nu > 0$$

$$\frac{n_2}{g_2} < \frac{n_1}{g_1} \Rightarrow du_\nu < 0$$

Si durante la propagación suponemos a las poblaciones de los niveles constantes, podemos integrar la ecuación de la energía:

$$u_\nu(x) = u_\nu(0) \exp \left[\left(\frac{n_2}{g_2} - \frac{n_1}{g_1} \right) g_1 B_{12} u_\nu g(\nu) \frac{h\nu}{c} x \right] = u_\nu(0) \exp [-\alpha(\nu)x]$$

donde:

$$\alpha(\nu) = - \left(\frac{n_2}{g_2} - \frac{n_1}{g_1} \right) g_1 B_{12} u_\nu g(\nu) \frac{h\nu}{c}$$

Vemos que la radiación, en su camino, se amplifica o se absorbe exponencialmente.

Si las poblaciones son las de equilibrio térmico:

$$\frac{n_2}{g_2} = \frac{n_1}{g_1} \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{KT}\right) \Rightarrow \frac{n_2}{g_2} < \frac{n_1}{g_1}$$

Por tanto, para que hubiera amplificación la temperatura habría de ser negativa.

Un medio material se puede convertir en un amplificador de radiación si alterando la situación de equilibrio térmico se consigue poblar más un nivel que otro de menor energía, es decir, si:

$$\frac{n_2}{g_2} > \frac{n_1}{g_1}$$

Esta anómala situación, que en principio parece difícil de conseguir, se puede realizar actualmente en muchos medios materiales que abarcan a casi todos los elementos simples y a multitud de moléculas en todos los estados de agregación de la materia (sólidos, líquidos y gases).

Los métodos empleados para invertir la relación de las poblaciones respecto al equilibrio térmico se denominan métodos de bombeo de poblaciones.

El método de bombeo por lo general requiere la intervención de otros niveles de energía distintos a aquellos en que se van a invertir las poblaciones.

Un esquema muy sencillo es el del bombeo óptico a tres niveles (véase figura K.2). En este esquema, el nivel E_2 es metastable, es decir, que un centro puede permanecer en él largo tiempo.

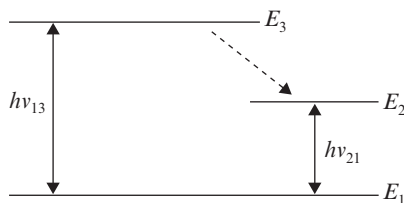


Figura K.2

Entonces, si se introduce una potente radiación en la frecuencia:

$$\nu_{31} = \frac{E_3 - E_1}{h}$$

se producirán absorciones que llevarán centros al nivel E_3 . Si la transición de E_3 a E_2 es muy rápida (como suelen serlo las transiciones no radiativas en los sólidos), una parte de los centros excitados a E_3 pasará al nivel E_2 , donde se irán acumulando hasta que la población de este nivel sea mayor que la del E_1 . Así, se habría conseguido la inversión de las

poblaciones entre los estados de los niveles E_2 y E_1 . Por tanto, si ahora se introduce una radiación de la frecuencia:

$$\nu_{21} = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

esta radiación será amplificada a su paso por el medio invertido.

En la práctica, la radiación de bombeo de frecuencia ν_{13} procede de una potente lámpara de flash o de descarga continua.

En la amplificación de la frecuencia ν_{12} en el medio invertido se suele introducir éste entre dos espejos paralelos que forman un oscilador o resonador óptico. Así, la radiación, al reflejarse en los espejos, atraviesa muchas veces el medio invertido (véase figura K.3). Una parte de la radiación amplificada se extrae a través de uno de los espejos (que es semitransparente) y constituye la salida de la radiación láser de frecuencia ν_{12} .

La radiación que se extrae es perpendicular a los dos espejos y, por tanto, tiene un grado importante de colimación y direccionalidad. La divergencia es típicamente del orden de 1 milirradián y usualmente es muy monocromática. Como, por otra parte, el campo electromagnético entre los dos espejos del oscilador se establece en las frecuencias de resonancia, son éstas las frecuencias que contienen la radiación láser.

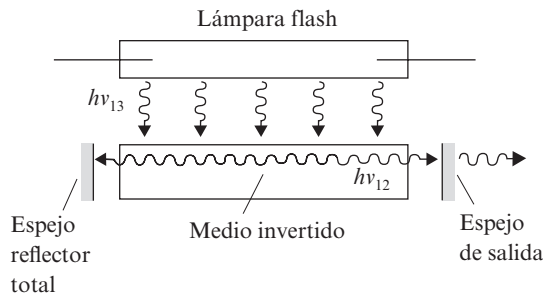


Figura K.3

Las frecuencias de resonancia corresponden a las ondas electromagnéticas cuya semilongitud de onda está contenida un número entero de veces en la distancia L entre los espejos:

$$L = n \frac{\lambda}{2}$$

Como la radiación de frecuencia ν_{12} debe coincidir con la frecuencia de estas resonancias y su geometría es la de estas ondas estacionarias, tendremos una radiación extraordinariamente ordenada y con un alto grado de coherencia.

En los osciladores láser, la radiación láser ν_{12} aparece como consecuencia de la emisión espontánea en esta frecuencia. En sucesivas reflexiones en los espejos, el campo emitido

espontáneamente se va aproximando rápidamente a la geometría de las soluciones resonantes estacionarias, que son las que tienen menos pérdidas, y, después de un corto tiempo, se establece el campo estacionario.

De esta forma, resulta que la radiación amplificada es producida por el propio medio invertido, y sus semillas proceden de los procesos espontáneos de emisión. Por esta razón el campo electromagnético producido por un oscilador láser es una superposición de campos coherentes con desfases arbitrarios entre ellos.

Actualmente, existe un gran número de tipos de láser distintos que cubren un espectro que se extiende entre el infrarrojo lejano o las microondas y frecuencias de los rayos X blandos. Los láseres tienen ya un importante papel en procesos industriales que cubren desde tratamientos térmicos de soldadura y corte de materiales hasta procesos químicos, separación de isótopos, control de contaminación y otras refinadas técnicas recientes.

Su papel en la investigación científica actual los convierte en insustituibles en multitud de técnicas de laboratorio, que cubren desde la espectroscopía hasta la fusión nuclear, de manera que puede afirmarse que gran parte de los avances tecnológicos que se están incorporando al uso cotidiano en la sociedad actual no habrían sido posibles sin los dispositivos del efecto láser.



La energía nuclear de fisión

C. Sánchez del Río

La reacción nuclear de fisión mencionada en el apartado 38.2 ha permitido la producción de energía del origen nuclear en gran escala. Las centrales nucleares actuales producen calor a unos 300 °C con una potencia típica de más de 3000 MW. La energía térmica así generada se transforma por métodos clásicos en unos 1000 MW de energía eléctrica, que se transporta a los usuarios a través de las redes de alta tensión existentes.

Para llegar a las centrales nucleares comerciales ya en funcionamiento fue preciso un desarrollo tecnológico muy importante que sustenta toda la industria nuclear. Ésta comprende la minería del uranio, la extracción química, el enriquecimiento isotópico en ^{235}U , la fabricación de los elementos combustibles, la central nuclear y la eliminación de los residuos radioactivos no aprovechables. No es éste el lugar para exponer las soluciones técnicas adoptadas en industria tan compleja. Ni siquiera es posible describir una central nuclear en unas pocas páginas. Por eso nos limitaremos aquí a una explicación elemental de la física que subyace en la producción masiva de la energía nuclear por el proceso de fisión.

Un neutrón puede producir una fisión, de la cual resultan dos fragmentos con notable energía cinética y varios neutrones. En principio, cada uno de estos neutrones podría producir nuevas fisiones que, a su vez, darían origen a más neutrones. Este proceso —reacciones en cadena— podría seguir creciendo hasta que el número de reacciones por unidad de tiempo fuera tal que la energía total desprendida fuese apreciable macroscópicamente. Dicho de otro modo, por este procedimiento se podría obtener energía útil de origen nuclear. Tiene este método la ventaja del gran contenido energético del combustible nuclear; como la fisión de un núcleo pesado ($A \approx 240$) produce unos 200 MeV, la fisión de todos los núcleos contenidos en un solo gramo desprende aproximadamente un MW-día. Esta cantidad es del orden de 10^6 veces mayor que la energía que se consigue consumiendo un gramo de combustible ordinario.

Un sistema en el cual se verifican reacciones de fisión en cadena se denomina reactor nuclear. Consiste en una cierta cantidad de elemento fisionable, junto con otros materiales, estructura, control, etc. El medio donde se realizan las fisiones se caracteriza por su factor de multiplicación infinita k_{∞} ; es la relación entre el número de neutrones de una generación y el número de neutrones de la anterior, si el medio fuera infinitamente extenso. Evidentemente, para que una reacción en cadena sea posible, es preciso que sea $k_{\infty} > 1$. El valor de k_{∞} depende no sólo del número de neutrones que se desprenden en cada fisión, sino también de la probabilidad de que una fisión se produzca. Y la probabilidad de que un neutrón llegue a producir una nueva fisión en el medio resulta de la competición de

varios posibles procesos (colisiones elástica e inelástica, captura y fisión), cuya probabilidad respectiva depende fuertemente de la energía del neutrón. Se ha observado que, como resultado de este conjunto de procesos, sólo es $k_{\infty} > 1$ cuando los núcleos pesados son aquellos que se fisionan incluso por los neutrones más lentos; por eso, estos elementos (^{233}U , ^{235}U y ^{239}Pu) se llaman, por antonomasia, materiales fisionables.

En un reactor nuclear, el medio donde se verifican las fisiones tiene un tamaño finito y por su superficie se pierden neutrones que dejan de contribuir a la reacción en cadena. Se define, en este caso, un nuevo factor de multiplicación finito k del mismo modo que antes. Basta que sea $k = 1$ para que la reacción en cadena se mantenga a un ritmo constante. Obviamente, será siempre k inferior a k_{∞} y tanto menor cuanto más pequeño sea el reactor, ya que entonces la relación de la superficie al volumen es mayor y la pérdida relativa de neutrones más grande; para un cierto medio con determinado k_{∞} , existe un tamaño crítico para el cual $k = 1$. Si $k > 1$, el número de fisiones crece continuamente y el reactor aumenta de potencia; si $k < 1$, ocurre lo contrario. Alrededor de $k = 1$ pueden producirse pequeños cambios en k (cambios de reactividad) mediante la extracción o introducción en el medio de materiales que capturen neutrones (control).

La forma más inmediata de conseguir una reacción en cadena consiste en disponer un bloque suficientemente grande de material fisionable puro. En este caso, los neutrones rápidos (≈ 1 MeV) emitidos en una fisión son todavía bastante energéticos cuando llegan ellos mismos a producir la fisión siguiente, ya que prácticamente sólo pierden energía por choques inelásticos; por eso, en este caso, se habla de reactores rápidos. En un bloque de ^{235}U , por ejemplo, es k_{∞} muy notablemente superior a la unidad; en estas condiciones, la pérdida superficial de neutrones será despreciable, siempre que la dimensión lineal del bloque sea del orden del camino libre medio de los neutrones o superior; el camino libre medio \bar{x} es [34.2.6]

$$\bar{x} = \frac{1}{N\sigma} \quad [\text{L.1}]$$

siendo N el número de núcleos por unidad de volumen (para el ^{235}U metal de densidad $18.7 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ es $N = 5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$) y σ la sección eficaz de cualquier proceso, que para neutrones rápidos no será muy distinta de πR^2 , siendo R el radio del núcleo dado por [36.2.2] con $r_0 \approx 1.4 - 1.5 \text{ F}$ (para el ^{235}U resulta $\sigma \approx 3.2 \times 10^{-24} \text{ cm}^2$). Según esto, \bar{x} es del orden de 6.5 cm. El tamaño crítico corresponderá a una dimensión lineal entre 6 cm y 10 cm. La masa crítica será del orden de 10 kg.

Si el bloque de material fisionable es algo mayor del tamaño crítico, de manera que $k > 1$, en cada generación aumenta el número de neutrones, y si es τ el tiempo entre dos generaciones, la potencia P crecerá con el tiempo t según la expresión

$$P = P_0 \exp \left[(k - 1) \frac{t}{\tau} \right] \quad [\text{L.2}]$$

En este caso, τ será el cociente del camino libre medio por la velocidad de los neutrones (del orden de $10^8 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$) y, por tanto, del orden de 10^{-8} s , lo que indica que el cre-

cimiento de potencia será de carácter explosivo si k es notablemente superior a la unidad (bomba atómica). Si difiere de la unidad en menos de la fracción de neutrones, que son emitidos en la fisión con un retraso del orden de segundos (neutrones retardados que constituyen el 0.75% del total), la fórmula [L.2] no es válida porque en cada generación hay que esperar a los neutrones retardados para completar el ciclo y el período de crecimiento es del orden de segundos. Estos valores de k menores de 1.0075 son los que se manejan cuando se desea un reactor rápido controlado.

A causa del gran aumento de la sección eficaz de fisión para los neutrones de energía muy baja (véase fórmula [38.9.2]), se puede ahorrar material fisionable mezclándolo con un moderador que reduzca la energía de los neutrones que van a producir nuevas fisiones. Un moderador es un material constituido por núcleos ligeros; por choque elástico con los mismos, se reduce la energía de los neutrones hasta valores comparables con la energía de agitación térmica del medio (neutrones térmicos). Un reactor que funcione según este principio se llama reactor térmico.

Una mezcla homogénea de ^{235}U (material combustible) y agua ordinaria (moderador) puede ser la base de un reactor térmico. Admitiendo que los neutrones no se pierden durante la moderación, el factor de multiplicación infinito será:

$$k_{\infty} = \frac{\nu N_u \sigma_f}{N_u \sigma_t + N_h \sigma_h} \quad [\text{L.3}]$$

siendo ν el número medio de neutrones emitidos por fisión ($\nu \approx 2.5$), σ_f la sección eficaz de fisión del ^{235}U para neutrones térmicos ($\sigma_f \approx 6 \times 10^{-22} \text{ cm}^2$), σ_t la sección eficaz total de captura —incluida fisión— del ^{235}U para neutrones térmicos ($\sigma_t \approx 7 \times 10^{-22} \text{ cm}^2$), σ_h la sección eficaz de captura del hidrógeno para neutrones térmicos ($\sigma_h \approx 3 \times 10^{-25} \text{ cm}^2$), N_h el número de átomos de hidrógeno por unidad de volumen (en el agua, $N_h \approx 6 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$), y N_u el número de átomos de ^{235}U por unidad de volumen. Según [L.3], para tener un valor de k_{∞} suficiente, es decir, entre 1.2 y 1.5, la concentración de ^{235}U debe ser entre 0.015 y 0.030 $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$. Con una disolución de una sal de ^{235}U en agua, en esta proporción, se tiene un medio donde una reacción en cadena propagada por neutrones térmicos es posible. Para estimar el tamaño crítico y la masa crítica puede utilizarse el siguiente argumento, parecido al usado en los reactores rápidos. Durante la moderación, un neutrón que choca con un protón pierde, en promedio, la mitad de su energía; por tanto, para pasar de 1 MeV a 1 eV necesitará unas 18 colisiones. El camino libre medio entre cada dos colisiones puede estimarse, con la fórmula [L.1], en unos 3 cm (para ello hay que tomar la sección eficaz de colisión neutrón protón, que es del orden de $2 \times 10^{-24} \text{ cm}^2$ para 1 MeV y de $2 \times 10^{-23} \text{ cm}^2$ para energías menores de 0.01 MeV). El camino recorrido por un neutrón hasta que es capturado será del orden de $18 \times 3 \text{ cm}$. Puede admitirse que si la dimensión lineal del reactor es 2/3 de este camino, el efecto de la superficie será despreciable. El tamaño crítico de este tipo de reactor térmico corresponderá, por tanto, a una dimensión lineal de 30 cm o 40 cm. La masa crítica será del orden de 1 kg de ^{235}U .

Los fragmentos de fisión son esencialmente núcleos inestables; sufren desintegraciones beta sucesivas acompañadas de emisión de rayos gamma. Por cada fisión se emiten varios de estos fotones. Como en cada fisión se desprenden 200 MeV de energía, hacen falta

Física cuántica

3×10^{10} fisiones por segundo para que la potencia disipada sea de 1 W. Como un curie de una sustancia radioactiva es, por definición, 3.7×10^{10} desintegraciones por segundo, un reactor equivale a una fuente radioactiva de varios curie por W de potencia. Para reactores de muchos megavatios de potencia, esta radioactividad da lugar a serios problemas de blindaje.

Algunos productos de fisión tienen, además, un período de desintegración de muchos años, por ello la eliminación de estos residuos altamente radioactivos es un asunto delicado y costoso.

M

La energía nuclear de fusión

C. Sánchez del Río

Es teóricamente posible obtener energía abundante de origen nuclear siguiendo un procedimiento paralelo a la reacción en cadena de la combustión ordinaria. Este método recibe el nombre de fusión termonuclear, o simplemente fusión, porque la energía proviene de reacciones nucleares exoenergéticas que ocurren cuando se unen dos núcleos ligeros. Es muy improbable que esto ocurra a temperatura ordinaria por la repulsión electrostática entre los núcleos, pero puede suceder (y de hecho sucede en el interior del Sol y las estrellas) si la temperatura es suficientemente elevada.

En efecto, si se va calentando un gas hasta temperaturas muy altas, queda primero parcial y luego totalmente ionizado. Se forma un gas que ya no está compuesto de moléculas o átomos, sino de núcleos y electrones. Es lo que se llama plasma totalmente ionizado. Suele decirse que un plasma es el cuarto estado de la materia en contraposición con los tres, sólido, líquido y gaseoso, que encontremos ordinariamente en la Tierra. Y conviene señalar que el plasma es el estado más abundante de la materia que constituye el Universo.

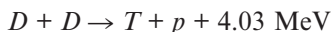
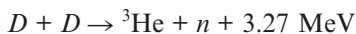
La energía cinética media E de los núcleos de un plasma totalmente ionizado viene dada por la conocida fórmula de la teoría cinética elemental

$$E = \frac{3}{2} kT$$

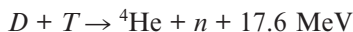
donde k es la constante de Boltzmann y T la temperatura absoluta. Para $T = 10^6$ K, la energía es 130 eV, y para $T = 10^8$ K, tendríamos una energía de 13 keV. Para estas energías, las secciones eficaces de reacción de los núcleos más ligeros ya no son despreciables, y es de esperar que las reacciones exoenergéticas se produzcan en abundancia si el plasma es suficientemente denso. También es de esperar que la energía desprendida pueda emplearse parcialmente para mantener el plasma a la temperatura necesaria, todo en analogía con la combustión ordinaria. Una vez provocada la ignición, el propio calor desprendido mantiene el proceso siempre que no haya pérdidas de energía que extingan la combustión; esto sucede, por ejemplo, cuando apagamos una cerilla soplando, porque extraemos el calor a un ritmo superior al de producción.

Las reacciones de interés para el proceso de fusión termonuclear serán, evidentemente, aquellas en que intervienen los isótopos del hidrógeno, deuterio (${}^2\text{H}$, que representaremos por D) y tritio (${}^3\text{H}$, que designaremos por T) para que la repulsión electrostática sea mí-

nima. En un plasma de deuterio pueden producirse las reacciones:



Ambas desprenden una cantidad razonable de energía y su sección eficaz es satisfactoria para energías de colisión de unos 50 keV. Existe, sin embargo, una reacción más favorable que se puede producir en un plasma que sea mezcla de deuterio y tritio, y es la siguiente:



Esta reacción presenta una sección eficaz razonable a energías de colisión de unos 10 keV, y necesita, por tanto, temperaturas menos altas que el plasma de deuterio. Además, la energía desprendida es más grande que en los casos anteriores y en su mayor parte se la lleva el neutrón, que sale fácilmente del plasma y de cuantos materiales lo rodeen.

Por todas estas razones la reacción deuterio-tritio es la elegida para el aprovechamiento práctico de la energía de fusión, a pesar de un claro inconveniente. El deuterio se encuentra en el agua corriente en una proporción de una parte en 7000, y no es difícil separarlo, como se hace ya en las fábricas de agua pesada (D_2O). El tritio, en cambio, apenas existe en la naturaleza porque es un nucleido radioactivo beta con un período de unos 12 años. Es preciso prepararlo mediante la reacción



Por fortuna, el litio (que contiene un 7.5% de ${}^6\text{Li}$) es muy abundante en la naturaleza, por lo que no hay que temer que llegue a faltar nunca. Los neutrones precisos para fabricar el tritio pueden obtenerse inicialmente en los actuales reactores nucleares de fisión, y en el futuro aprovechando los propios neutrones que se desprenden en la reacción de fusión.

Vemos, por tanto, que un plasma de deuterio-tritio puede, en principio, utilizarse como base de un reactor de fusión termonuclear, siempre que se cumplan determinadas condiciones. En primer lugar, hemos de ser capaces de confinar el plasma de alguna manera, asunto que trataremos después. En segundo lugar, es preciso calentar el plasma hasta la temperatura de ignición, que es de unos cien millones de grados celsius. En tercer lugar, el plasma debe ser tal que las pérdidas de energía no lo enfríen, extinguiendo la combustión nuclear iniciada.

Fundamentalmente, hay dos motivos por los cuales un plasma se enfría. Por una parte, el plasma es muy buen conductor del calor, por lo que tiende a perder energía a un ritmo que podemos cuantificar por el tiempo τ que se tarda en perder la mitad de la energía; es lo que se llama tiempo de confinamiento de la energía. Además, el plasma es una fuente intensa de rayos X blandos que se producen como radiación de frenado (Bremsstrahlung) cuando colisionan los electrones con los núcleos.

Cuanto más se calienta un plasma, mayor es su pérdida de energía por radiación de Bremsstrahlung. Pero también aumenta el número de reacciones de fusión que se producen. Llega un momento en que si la densidad del plasma es suficientemente alta y la energía no se disipa demasiado deprisa, la reacción de fusión puede mantenerse. Para un plasma de deuterio-tritio, ello exige que se verifique la desigualdad

$$n\tau > 10^{14} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}$$

en la cual n es el número de partículas por cm^3 y τ el ya citado tiempo de confinamiento en segundos. Esta condición se llama criterio de Lawson.

Para conseguir un reactor de fusión, por consiguiente, hace falta confinar un plasma de densidad adecuada durante un tiempo suficiente y calentarlo hasta la temperatura de ignición. En el interior del Sol o de las estrellas estos problemas están automáticamente resueltos. El plasma queda confinado por la fuerza gravitatoria que mantiene el astro y la ignición se alcanza cuando la misma compresión gravitatoria provoca la temperatura suficiente en el centro de la estrella. Conseguir lo mismo con una máquina es asunto mucho más difícil.

Empecemos por el problema del confinamiento. Observemos, en primer lugar, que hay dos maneras de satisfacer el criterio de Lawson: con densidad alta y tiempo corto o con densidad baja y tiempo largo. Estas dos posibilidades quedan reflejadas en los dos métodos que se están investigando para conseguir la fusión, que se conocen por confinamiento inercial y confinamiento magnético, respectivamente.

El método del confinamiento inercial se basa en comprimir brutalmente la materia hasta conseguir densidades de 200 a 1000 veces mayores que las de los sólidos o líquidos; si una vez comprimida puede calentarse una pequeña parte de su interior a la temperatura de ignición, el calor producido se transmitirá a las partículas circundantes haciendo que en ese plasma tremendamente denso la fusión prospere.

El procedimiento que se pretende usar para comprimir la materia es muy ingenioso. Consideremos una pequeñísima esfera hueca que contenga una mezcla gaseosa de deuterio-tritio en su interior. Si bombardeamos por todos los lados la esfera con rayos láser, electrones relativistas u otras partículas, se vaporizará la esfera, que quedará convertida en un plasma que escapará parcialmente hacia afuera, pero, por conservación de la cantidad de movimiento, provocará una implosión capaz de comprimir la mezcla gaseosa y juntamente con el calor producido dará lugar a la fusión termonuclear.

Entre los muchos problemas que hay que resolver para conseguir la fusión por confinamiento inercial conviene destacar la dificultad de depositar en las esferitas huecas energías del orden de muchos kilovatios-hora en un tiempo del orden de un nanosegundo. Los intentos continúan con láseres cada vez más potentes y con aceleradores de electrones o de iones pesados.

El método del confinamiento magnético pretende aprovechar el hecho de que un plasma totalmente ionizado está compuesto por partículas (núcleos y electrones) eléctricamente cargadas. Es sabido que una partícula cargada en presencia de un campo magnético se mueve, girando en trayectorias helicoidales, alrededor de una línea del campo, y si la línea es cerrada, la partícula quedará sujeta por dicha línea para siempre. Evidentemente, si no

hay una sola partícula sino muchas, la cosa es diferente, porque, al chocar unas partículas con otras, cambian de línea magnética, y aunque las líneas sean cerradas, el plasma se expande. No es difícil calcular el tiempo de expansión con este modelo simplificado de plasma, que resulta ser suficiente para satisfacer el criterio de Lawson, de aquí el optimismo con que se construyeron las primeras máquinas por confinamiento magnético, hace casi 40 años.

Sucede, sin embargo, que un plasma es cosa mucho más complicada de lo que parece. El tiempo de confinamiento medido es muy inferior al calculado según el ingenuo modelo mencionado, debido a fenómenos colectivos que se van dilucidando después de muchos años de trabajo teórico y experimental.

Tales estudios han permitido construir máquinas muy prometedoras en cuanto a su capacidad de contener el plasma mediante campos magnéticos. Las más conocidas son las de los tipos *stellarator* y *tokamak*. En ambas se mantiene el plasma dentro de un tubo cerrado de forma de toro y el campo magnético resulta de la superposición de dos campos; uno con líneas paralelas al eje del toro y otro envolvente con líneas cerradas en planos perpendiculares a dicho eje. La principal diferencia entre ambos tipos de máquina es que en el *stellarator* ambos campos están producidos por bobinas externas y podría, en principio, funcionar de modo continuo, mientras que en el *tokamak* el campo envolvente está producido por una corriente eléctrica que circula por el propio plasma y que se induce a impulsos por un campo magnético perpendicular al toro.

Alcanzar la temperatura de ignición en una máquina por confinamiento magnético no es problema fácil. En un *tokamak* se produce una elevación de temperatura por efecto Joule, pero el proceso es poco eficaz porque la resistencia eléctrica del plasma disminuye muy rápidamente al aumentar la temperatura. Para conseguir temperaturas más altas, se usan otros métodos de inyección de energía en el plasma mediante microondas o átomos neutros muy rápidos.

Las impurezas en el plasma pueden constituir un serio problema si son debidas a elementos pesados, porque la sección eficaz de Bremsstrahlung crece con el cuadrado del número atómico, con lo que las pérdidas de energía por radiación pueden llegar a impedir la ignición.

El aprovechamiento de la energía de fusión en las máquinas por confinamiento magnético se basa en la termalización y absorción de los neutrones rápidos (de unos 14 MeV) que salen del toro en todas direcciones. Para ello, hay que disponer de un moderador de neutrones rodeando la máquina y de un sistema de refrigeración del mismo para extraer la energía térmica que los neutrones producen. Puede incorporarse litio al moderador, con lo que aumenta la energía obtenida y, además, se produce tritio, que, como sabemos, es ingrediente esencial en el combustible del propio reactor de fusión.

El paso de una máquina de fusión que muestre la viabilidad del método a un reactor de interés comercial planteará en su día problemas técnicos muy importantes. Las bobinas para producir el campo magnético serán verosímilmente superconductoras, lo cual requerirá un sistema criogénico tal vez relativamente sencillo si se consiguen superconductores prácticos de temperatura menos baja. El moderador de neutrones, por el contrario, deberá funcionar a la mayor temperatura posible para mejorar el rendimiento termodinámico de las turbinas que aprovechan la energía térmica que depositen los neutrones. Todavía

deberá ser más alta la temperatura del moderador si se pretende utilizar la energía en procesos químicos, como pudiera ser la producción de hidrógeno. También habrá que incorporar al moderador un sistema para extraer el tritio. Todos estos requisitos deberán acomodarse en un espacio relativamente reducido, lo cual supone resolver un problema no fácil de ingeniería.

El altísimo flujo de neutrones rápidos que se producirán en el plasma necesitará el desarrollo de nuevos materiales resistentes a la radiación, y aunque se consigan éstos, los daños por radiación en el toro, las bobinas y la estructura de soporte serán importantes. Por ello, habrá que prever la sustitución periódica de estos elementos con los nuevos problemas de ingeniería que tal sustitución lleva consigo.

N

Fuentes. Aceleradores. Detectores

Marina Ramón Medrano

N.1. FUENTES

Se consideran aquí sólo los procedimientos para obtener haces de partículas *cargadas*, que son utilizadas en los aceleradores.

Electrones

Son emitidos por cátodos metálicos, por ejemplo, de tungsteno, a alta temperatura. Luego, los electrones son concentrados y focalizados mediante campos eléctricos.

Positrones

A partir del proceso de creación de un par:

$$\gamma \rightarrow e^- + e^+$$

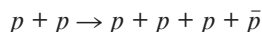
en presencia de un núcleo atómico (la energía y el momento son así conservados). El haz de fotones —de energía mayor que 1 MeV ($m_{e^-} = m_{e^+} = 0.5$ MeV)— puede provenir, por ejemplo, del bombardeo de un blanco material por electrones. Los positrones (e^+) se separan de los electrones (e^-) mediante campos magnéticos externos (las trayectorias de e^- y e^+ se curvan en sentidos opuestos por tener cargas de signo contrario).

Protones

Se obtienen, por ejemplo, a partir de la ionización de átomos de hidrógeno. Un tubo conteniendo gas hidrógeno a baja presión es atravesado por electrones con energías entre 10 eV y 100 eV; las colisiones de dichos electrones con los átomos ionizarán a éstos. Los protones se extraerán aplicando un campo eléctrico apropiado.

Antiprotones

Se producen en colisiones protón-protón a energías altas:



(el protón-blanco, casi en reposo, pertenece a un átomo de hidrógeno, y el protón-proyector lleva una energía de unos 6 GeV). Los antiprotones (\bar{p}) se separan mediante un campo magnético. Obsérvese que el proceso anterior conserva el número bariónico.

N.2. ACELERADORES

N.2.1. Introducción

Son dispositivos que permiten incrementar la energía cinética de partículas *cargadas estables*. En este punto es preciso recordar que las partículas cuanto más energéticas más capaces son de *explorar* distancias pequeñas (por ser menor su longitud de onda asociada; véase relación de De Broglie, capítulo 3). De la relación $200 \text{ MeV} \cdot 1 \text{ F} \sim 1$ (ejemplo, 42.1) se deduce el cuadro siguiente:

Distancia	Energía	Dominio físico
$1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm}$ (átomo)	$\sim 2 \text{ KeV}$	Física atómica
$10 \text{ F} = 10^{-12} \text{ cm}$ (núcleo)	$\sim 20 \text{ MeV}$	Física nuclear
$1 \text{ F} = 10^{-13} \text{ cm}$ (nucleón)	$\sim 200 \text{ MeV}$	Física de partículas

y si se quiere descender a nivel de objetos *elementales* (leptones y quarks) —es decir, a distancias del orden de 10^{-16} cm —, la energía de las partículas habrá de ser, por tanto, del orden de 10^2 GeV . También es oportuno recordar aquí que, para una partícula cargada, los campos eléctricos *aumentan su energía* y los magnéticos *controlan las trayectorias*. En efecto, una partícula cargada en presencia de un campo eléctrico (\mathbf{E}) y magnético (\mathbf{B}) está sometida a la fuerza de Lorentz:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q\left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \wedge \mathbf{B}\right)$$

luego $(dE/dt) = q\mathbf{v} \times \mathbf{E}$ (donde se ha tenido en cuenta $\mathbf{p} = (E/c^2)\mathbf{v}$; $E = \sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2}$).

Como ejemplos de grandes aceleradores consideraremos el LEP (*large electro-positron collider*, CERN, Ginebra, Suiza), y el LHC (*large hadron collider*, CERN). El primero, inaugurado en 1989, contribuyó a una buena parte de los experimentos más importantes de la última década del siglo XX (por ejemplo, mesones W^+ , W^- , Z^0 , corrientes débiles

neutras), y cesó su actividad en el año 2000 para dar lugar a la construcción del LHC. Este último gran acelerador fue inaugurado en el año 2008, y en él se estudian colisiones protón-protón; su gran éxito, hasta ahora, ha sido el descubrimiento de un bosón presentado como el esperado Higgs.

Como paso previo para la aceleración de haces de partículas, antes de pasar a los grandes aceleradores, existen aceleradores de menor tamaño y rango de energías. Consideraremos para ello dos tipos: los aceleradores lineales y los sincrotrones.

Acelerador lineal

A lo largo del acelerador (véase figura N.1) hay una serie de tubos metálicos (o pares de electrodos) alineados. Los tubos que ocupan las posiciones 1, 3, 5, ... están conectados entre sí y a un polo de un generador de tensión *alterna*; los 2, 4, 6, ... lo están entre sí y al otro polo del mismo generador.

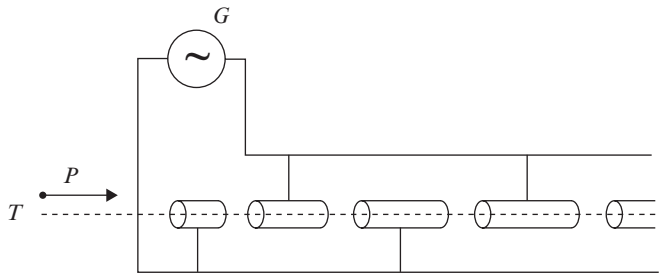


Figura N.1. Acelerador lineal. *G*: generador de tensión alterna; *T*: trayectoria de la partícula; *P*: partícula.

Por ejemplo, si en un instante dado, 1, 3, ..., son cátodos y 2, 4, ..., ánodos, una partícula *P* cargada positivamente será atraída por 1, siendo, por tanto, acelerada e incrementando su energía. La cuestión reside ahora en que la frecuencia de oscilación de la tensión alterna en el generador ha de ajustarse de forma que tras atravesar la partícula el tubo 1, el tubo 2 (y el 4, 6, ...) pase a ser un cátodo, siendo *P* nuevamente acelerada en el espacio que media entre los tubos 1 y 2. Y así sucesivamente, incrementando la partícula su energía en *cada* espacio entre dos tubos consecutivos. Las longitudes de los tubos habrán de ser cada vez mayores porque la partícula cada vez recorrerá un mayor espacio en un mismo intervalo de tiempo; la frecuencia del generador de alta tensión puede variar entre 20×10^6 y 200×10^6 Hz.

Sincrotrón

Consiste en una cavidad hueca en forma de anillo o toro rodeada por un imán, y con uno o varios sistemas de aceleración (véase figura N.2).

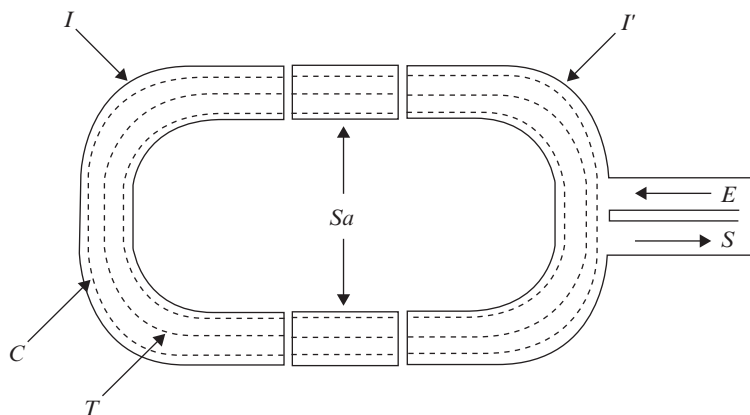


Figura N.2. Sincrotrón. *I*: imán; *C*: cavidad hueca; *T*: trayectoria de partículas; *Sa*: sistema de aceleración; *E* y *S*: entrada y salida de partículas.

Los imanes crean el campo magnético necesario para que las trayectorias de las partículas cargadas sean circulares. Cada sistema de aceleración consta de dos electrodos cilíndricos conectados a un oscilador, que establece una diferencia de potencial variable periódicamente con el tiempo. Como se ve, la *estabilidad* de las partículas es necesaria, porque éstas tienen que dar «muchas vueltas» hasta alcanzar —mediante aceleraciones sucesivas— la energía deseada. En el CERN existen dos sincrotrones, el PS (sincrotrón de protones) y el SPS (supersincrotrón de protones), que se utilizan para acelerar las partículas previamente a la entrada del acelerador principal (LEP, posteriormente reconvertido en el LHC). El PS tiene una circunferencia de 628 m, y el SPS de 6912 m. Estas instalaciones se utilizan también para la colisión de iones pesados (y la posible existencia de un plasma de quarks y gluones). Asimismo, el SPS interviene en los experimentos con neutrinos (los protones inciden sobre un blanco, de carbón, por ejemplo, produciendo piones y kaones que se desintegrarán vía débil dando lugar a neutrinos, detectados posteriormente en el Gran Sasso) (véase apéndice Q).

N.2.2. LEP

El LEP (CERN, Ginebra, Suiza) fue un gran anillo de casi 27 km de circunferencia en el que colisionaron electrones y positrones. A lo largo del anillo se distribuían 128 sistemas de aceleración que suministraban a las partículas 400 MeV en cada vuelta; sistemas de imanes mantenían electrones y positrones en su trayectoria circular. Obsérvese que se necesitaba un solo anillo para que colisionasen electrones y positrones, pues se movían en sentido contrario debido a tener cargas de signo opuesto. Dentro del anillo se había creado un gran vacío para evitar colisiones no deseadas. Como electrones y positrones se aniquilan mutuamente, en principio, toda la energía estaba disponible para la producción

de partículas; pero electrones y positrones —como todas las partículas cargadas— emiten radiación electromagnética al ser aceleradas (radiación sincrotrón), por tanto, había una cierta pérdida de energía. Por otra parte, dado que la energía radiada es proporcional a E^4/R (E , energía que lleva la partícula; R , radio de la trayectoria), y e^- y e^+ son partículas altamente relativistas (por su pequeña masa), había que aumentar R para disminuir las pérdidas por radiación. Ésa fue la razón del gran diámetro del LEP. Los dos haces de e^- y e^+ , tras alcanzar la energía deseada, se hacían colisionar en ciertas zonas en las que se habían colocado grandes y sofisticados detectores (Delphi, L3, ...). El esquema conjunto del LEP y los aceleradores auxiliares viene dado por la figura N.3.

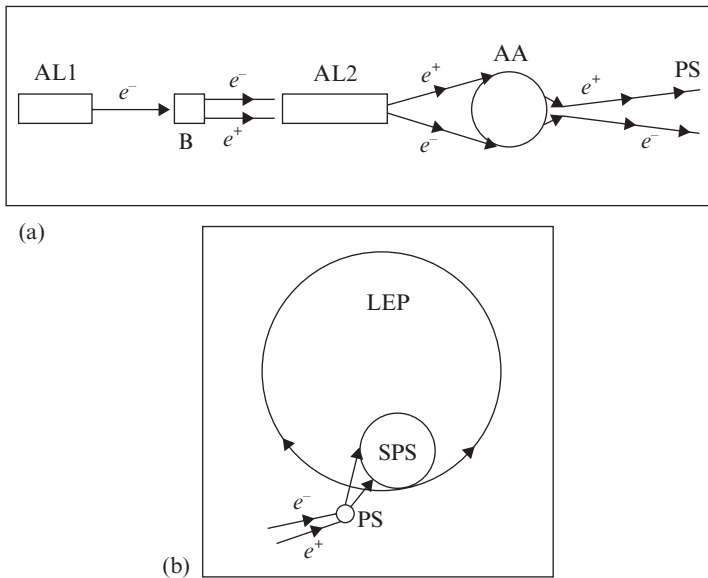


Figura N.3. Representación esquemática del LEP. (a) + (b). (a) AL1: primer acelerador lineal; B: blanco; AL2: segundo acelerador lineal; AA: anillo de almacenamiento; (b) sincrotrones PS y SPS; LEP.

Según la figura N.3, un haz de electrones era acelerado hasta 200 MeV en un primer acelerador lineal (AL1). Estos electrones se utilizaban, en parte, para producir positrones a través de la generación de fotones (en la colisión electrón-blanco). Los haces emergentes de e^- y e^+ se aceleraban hasta 600 MeV en un segundo acelerador lineal (AL2). «Paquetes» sucesivos de partículas eran coleccionados en un anillo de almacenamiento (AA; aceleradores tipo sincrotrón en forma de anillo que «almacenan» las partículas hasta formar haces suficientemente intensos). Después, los haces de e^- y e^+ eran inyectados en el PS, donde adquirían una energía de 3.5 GeV; más tarde, pasaban al SPS, donde se aceleraban hasta 20 GeV. Finalmente, ambos haces de e^- y e^+ se inyectaban en el LEP, donde cada uno adquiría una energía de 55 GeV. En una segunda fase del LEP se alcanzaron

energías del orden de 10^2 GeV. En las primeras semanas de funcionamiento del LEP ya se registraron 10 000 producciones de Z^0 (el mesón neutro mediador de las interacciones débiles), cuyas desintegraciones avalaban la existencia de sólo tres familias leptónicas activas ($Z^0 \rightarrow e^- + e^+, \mu^- + \mu^+, \tau^- + \tau^+, \nu_e + \bar{\nu}_e, \nu_\mu + \bar{\nu}_\mu, \nu_\tau + \bar{\nu}_\tau$).

El LEP (1989) dejó de funcionar en el año 2000, para su reconversión en el LHC (protón-protón, *large hadron collider*), inaugurado en octubre de 2008.

Otros aceleradores contemporáneos del LEP fueron, por ejemplo, el Hera ($\bar{e}p$), en DESY (Hamburgo, Alemania) y el de Serpoukhov (pp), en Rusia. Mención especial merece el Tevatrón (Laboratorio Enrico Fermi, Chicago, Estados Unidos), que fue un acelerador protón-antiprotón (número bariónico inicial y final, igual a cero), cuyos haces de partículas alcanzaron energías del orden de 1 TeV. Fue clausurado en 2011 por razones económicas.

N.3. LHC (*Large Hadron Collider*)

El funcionamiento efectivo del LHC comenzó en el año 2009 en el CERN. Al utilizar el mismo túnel circular que el LEP (con una longitud de 27 km, y a 100 m de profundidad), se hubo de clausurar y desmantelar este último. El LHC estudia colisiones protón-protón, y, por tanto, con un número (o carga) bariónico inicial B igual a 2 (e igual al B final, si el número bariónico se conserva).

Hasta el año 2013, la energía máxima total (en el centro de masas) fue de 8 TeV (1 TeV = 10^3 GeV). Un haz de protones es acelerado primero en un acelerador lineal, hasta 50 MeV; luego, estas partículas adquirirán energías crecientes en el PS y en el SPS (1.4 GeV y 25 GeV en PS; 450 GeV en SPS). Posteriormente, el haz se divide en dos subhaces que son inyectados en el LHC, donde se propagan en el anillo, en sentidos opuestos, hasta adquirir cada uno de ellos una energía de 4 TeV. Para dar una idea de la operatividad del LHC, se puede mencionar que ya a finales de 2012 habían tenido lugar unos 700 millones de colisiones protón-protón.

El gran éxito del LHC fue la detección de un bosón de espín cero, con una masa alrededor de los 125.5 GeV, que se identificó con la tan esperada partícula Higgs del Modelo Estándar de partículas elementales, anunciándose como tal públicamente el 4 de julio de 2012 en el CERN.

Tras un parada técnica en 2013, se reanudarán las colisiones en el año 2015, esperando alcanzar una energía máxima total de 14 TeV (es decir, con haces de protones de 7 TeV).

Para el LHC existen otros programas científicos importantes, tales como las colisiones de iones pesados, a fin de investigar el conjeturado plasma de quark y gluones.

No se ha desechado la idea de convertir el LHC en un acelerador protón-antiprotón (como el antiguo Tevatrón de Chicago; en este caso, el estado inicial, y final, debido a la colisión protón-antiprotón, tendría una carga bariónica igual 0).

En 2014, ha habido reuniones científicas en Ginebra (Suiza) en las que se ha hablado de un posible sucesor del LHC. Este nuevo superacelerador tendría 100 km de circunferencia, una energía máxima de 100 TeV y su funcionamiento estaría previsto para el año 2035. Dificultades técnicas aparte, su financiación sería el primer escollo.

N.4. DETECTORES

Se ha visto que en los aceleradores las partículas adquieren la energía necesaria para que, al colisionar, se produzcan otras o nuevas partículas. La cuestión reside entonces en determinar *cuáles* son las partículas que aparecen en el estado final de una reacción *concreta*, así como sus características (energías, momentos, ...). Los detectores serán los sistemas físicos específicamente diseñados para estudiar cada partícula *individualmente*; la detección estará basada, entonces, en la interacción de las partículas con el medio material que atraviesan. Por tanto, las partículas estables (capaces de propagarse durante un tiempo largo) tendrán una detección *directa*, mientras que las inestables la tendrán *indirecta*, a través de sus productos de desintegración.

Una detección habitual de las partículas cargadas está basada en su capacidad para ionizar los átomos del medio que atraviesan. El fundamento de una cámara de *detección electrónica* podemos verlo, por ejemplo, en la antigua cámara de chispas (véase figura N.4).

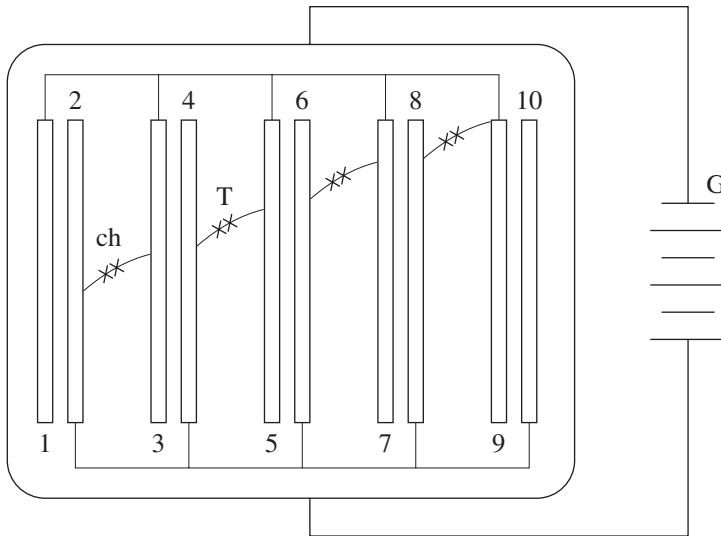


Figura N.4. Cámara de chispas. G: generador de tensión; T: trayectoria de la partícula; Ch: chispas.

La cámara de chispas está formada por una serie de láminas metálicas, conductoras y delgadas, colocadas paralelamente. Se establece una diferencia de potencial de miles de voltios entre los dos grupos de láminas 1, 3, 5, 7, ... y 2, 4, 6, 8, ... El espacio entre las placas está ocupado por un gas (en general, noble) a la presión atmosférica. Una partícula cargada, al atravesar la cámara ionizará el gas, produciéndose una descarga eléctrica, «chispas», entre cada dos placas consecutivas, y una serie de trazas que permitirán la reconstrucción de la trayectoria. Si la cámara se sitúa en una región en la que hay un cam-

po magnético constante, de intensidad y dirección conocidos, las trazas se curvarán; el sentido y el radio de la curvatura determinarán el signo de la carga y el momento.

Modernas cámaras de detección electrónica son, por ejemplo, las actuales *cámaras de deriva*. En ellas, una mezcla de gases, por ejemplo, argón y metano, es ionizada por el paso de una partícula cargada, por ejemplo, un electrón. A una serie de ánodos —finos hilos de tungsteno recubiertos de oro— llegará el chorro de electrones producidos por ionizaciones sucesivas.

Otros modernos sistemas de detección son los *calorímetros* —válidos para partículas tanto cargadas como neutras—, que, como su nombre indica, miden el calor producido en una colisión. En los calorímetros electromagnéticos, un cristal detecta la energía de los fotones, y dicho cristal ha de ser no higroscópico (absorbería agua de la atmósfera, perdiendo consistencia y propiedades); uno de los más utilizados actualmente es el BGO (Bismuto, Germanio, Oxígeno). En los calorímetros hadrónicos se intercala, por ejemplo, plomo y uranio, que distinguirán la materia hadrónica (π^0 , p , n , ...) de los electrones.

En la actual Física de Neutrinos se usa el detector llamado de Cherenkov, basado en el efecto del mismo nombre. Es sabido que si una partícula cargada (el compañero cargado del neutrino) se mueve en un medio transparente con una velocidad mayor que la de la luz en dicho medio, la partícula emitirá un haz luminoso visible, de intensidad relativamente débil; dicho haz forma un cono cuyo eje es la dirección de la partícula, y con una apertura angular que depende de su velocidad y del medio. Aparte del medio transparente en que se produce la radiación, un detector de Cherenkov contará con sistemas ópticos para recibir y concentrar la luz, y con tubos fotomultiplicadores (que detectan y analizan la luz). El detector permite distinguir entre las masas de las diversas partículas.



Unidades radiológicas y efectos biológicos de las radiaciones ionizantes

C. Sánchez del Río

0.1. UNIDADES

Las radiaciones ionizantes producidas por muestras radioactivas, tubos de rayos X, aceleradores de partículas, reactores nucleares, etc., producen diversos efectos al incidir sobre los seres vivos. Los efectos dependen de la cantidad de radiación, que se expresa en las unidades que se exponen a continuación.

Actividad. La actividad de una muestra es el número de desintegraciones por unidad de tiempo. Su unidad tradicional es el curie (Ci), que equivale a 3.7×10^{10} desintegraciones por segundo; la actividad de un gramo de radio es aproximadamente 1 Ci. La unidad SI de actividad es el becquerel (Bq), que equivale a una desintegración por segundo. La relación entre ambas unidades es $1 \text{ Bq} = 27 \text{ pCi}$.

Exposición. Mide la ionización producida por la radiación. Su unidad tradicional es el röntgen (R), que es la cantidad de rayos X o γ que, por ionización de los electrones secundarios, producen 1 u.e.s. de carga de cada signo en 1 cm^3 de aire; ello equivale a 2.58 C por kilogramo de aire. Para darse idea de lo que significa esta unidad, se puede señalar que 1 Ci de una muestra de rayos γ de 2 MeV produce a 1 m de distancia una exposición de 1 R por hora. La unidad SI de exposición es C/kg y no tiene nombre especial. La exposición se usa cada vez menos porque otras magnitudes, que se exponen a continuación, reflejan mejor los efectos biológicos.

Dosis absorbida. Mide la energía depositada por la radiación. Su unidad tradicional es el rad (rad), que equivale a 10^{-2} J/kg . En aire, un rad difiere poco de un röntgen. La unidad SI de dosis absorbida es el gray (Gy), que equivale a 1 J/kg . La relación entre ambas unidades es $1 \text{ Gy} = 100 \text{ rad}$.

Dosis equivalente. El efecto biológico de las radiaciones ionizantes depende de la dosis absorbida y del tipo de radiación. Por eso se introduce la dosis equivalente para el hombre de la siguiente forma

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{Dosis} \\ \text{equivalente} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \text{Dosis} \\ \text{absorbida} \end{array} \right\} \times \left\{ \begin{array}{c} \text{Eficacia biológica} \\ \text{relativa} \end{array} \right\}$$

La eficacia biológica relativa es 1 para rayos X o γ , 3 para neutrones térmicos, 10 para neutrones rápidos y 20 para núcleos pesados de retroceso. Si se mide con un aparato la dosis absorbida en rad, la dosis equivalente se expresa en rem, que es la unidad tradicio-

nal. Si se mide la dosis absorbida en gray, la dosis equivalente se expresa en sievert (Sv). La relación entre ambas unidades es $1 \text{ Sv} = 100 \text{ rem}$.

Para hacerse idea del significado de estas unidades señalaremos la dosis equivalente en milirem por año que todos recibimos: por efecto de la radioactividad natural, 50 mrem/a; por efecto de los rayos cósmicos, 40 mrem/a al nivel del mar y 1 mrem/a más por cada 30 m de altura, y por efecto de los rayos X de uso médico, entre 20 mrem/a y 200 mrem/a. En total, entre 100 mrem/a y 200 mrem/a. Esto es del orden de 10 rem a lo largo de toda la vida.

O.2. EFECTOS BIOLÓGICOS

En el hombre son de dos clases: somáticos (radiopatías y tumores) y genéticos (aparición de mutaciones). Antes de comentar brevemente ambos efectos conviene advertir que la radiación es sólo uno de los muchos agentes cancerígenos o mutágenos que se conocen.

El hombre puede recibir radiaciones ionizantes de dos maneras. Una es la irradiación que provenga de una fuente externa. La otra es la que produzca la ingestión de sustancias radioactivas presentes en el aire o en el agua; el efecto que produce esta segunda vía depende del período del elemento ingerido y del metabolismo, porque hay sustancias que el organismo humano elimina inmediatamente y otras quedan fijas durante años. Por eso la peligrosidad de las sustancias radioactivas que pueda haber en el agua o en los alimentos es muy variable. En relación con este punto conviene mencionar que el agua de los ríos tiene una actividad comprendida entre 10 pCi y 100 pCi por litro, y el agua del mar 350 pCi por litro. Por eso todos somos, naturalmente, algo radiactivos.

En cuanto a los efectos somáticos por irradiación externa, es preciso hacer notar que no es lo mismo recibir una cierta dosis de radiación de golpe que la misma dosis a lo largo de muchos años. En este último caso el organismo va reparando el daño de manera que los efectos nocivos son mucho menores. Tampoco es lo mismo recibir la irradiación en el tronco, donde se encuentran los órganos vitales, que en las extremidades, en donde sólo se producirán daños locales que podrán conducir, en casos graves, a la amputación, pero no a la muerte.

Teniendo en cuenta las advertencias precedentes, veamos lo que puede suceder en el peor de los casos: irradiación de todo el cuerpo con una dosis instantánea importante. Muy por debajo de 1 rem, el efecto, si lo hay, es inapreciable. Entre 1 rem y 25 rem tampoco se aprecia nada, pero pueden aparecer leucemias en el futuro, que se estiman comprendidas entre 100 y 1000 casos por cada millón de personas irradiadas. Una irradiación de 25 rem es detectable mediante análisis de sangre, pero no aparecen síntomas clínicos hasta los 50 rem. A los 100 rem se presenta una radiopatía benigna, y a los 250 rem una radiopatía aguda, que, aunque se cure, acorta la vida del paciente. La dosis de 450 rem es letal al 50%, es decir, la mitad de los individuos que reciban tal dosis morirán en un plazo inferior a 30 días.

Los efectos genéticos son difíciles de estimar porque los experimentos se han realizado con la mosca del vinagre (*drosophila melanogaster*) y la extrapolación al hombre de los resultados es incierta. Además, no son fácilmente evaluables los efectos de otros agentes

mutágenos. Por eso se acepta la hipótesis más pesimista, que consiste en suponer que los efectos genéticos son proporcionales a la dosis recibida por la población, por pequeña que aquella sea. Con este criterio se estima que si toda la población recibiese la dosis máxima permitida, que se mencionará después, la radiación produciría una de cada millón de mutaciones espontáneas.

O.3. DOSIS ADMISIBLES

Con objeto de impedir los efectos nocivos de las radiaciones ionizantes se han establecido dosis máximas que no deben sobrepasarse. Esto no significa que deba llegarse a dichas dosis. El criterio es que se procure que las dosis de radiación recibidas por los seres humanos sean las menores posibles, sin que se admita que superen la dosis máxima en ningún caso.

La dosis máxima de irradiación externa que se admite para la población en general es de 5 rem en 30 años. Para proteger a la población del riesgo radioactivo por ingestión se admite que se viertan en los ríos aguas que contengan hasta 10 pCi/litro de sustancias radioactivas, que se diluirán de manera que el agua quede inafectada; por su peligrosidad, la concentración admitida para el ^{226}Ra es diez veces inferior. En cuanto a la atmósfera, se admite que se expulse hasta 1 pCi/litro de elementos radioactivos, con excepción del ^{90}Sr (diez veces menos) y del ^{239}Pu (mil veces menos).

Las normas establecidas para quienes están profesionalmente expuestos a la radiación (trabajadores en la industria nuclear o en los servicios radiológicos de los hospitales) son lógicamente menos rigurosas. Se admite una dosis máxima de 5 rem por año a partir de los 18 años de edad, pero con la limitación de que nunca se sobrepasen 3 rem en 13 semanas consecutivas. Hay también normas, que no procede exponer aquí, para casos de irradiación de urgencia o accidental. En cuanto al riesgo radioactivo por ingestión, los criterios para los trabajadores profesionalmente expuestos son idénticos a los de la población en general.

Para el cumplimiento de las normas establecidas se controla a los trabajadores expuestos mediante dosímetros individuales. El vertido de efluentes líquidos y gaseosos producidos en la industria nuclear también está bajo la vigilancia de los gobiernos. Además, se realiza un control ecológico (animales y plantas) en el entorno de las instalaciones nucleares para detectar y evitar posibles efectos de concentración radioactiva.

P

Solución numérica de la ecuación de Schrödinger

Antonio Muñoz Sudupe

P.1. INTRODUCCIÓN

La mayor parte de las ecuaciones de Schrödinger que se pueden plantear no son resolubles de manera exacta. Existen, no obstante, múltiples técnicas que permiten conocer, en la mayor parte de los casos, las energías y funciones de onda con buena aproximación. En este sentido, los métodos descritos en el capítulo 14 son un ejemplo de técnicas analíticas aproximadas. En este apéndice vamos a describir de manera introductoria la resolución numérica, esto es, mediante un ordenador, de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para estados ligados en problemas unidimensionales y potenciales centrales en tres dimensiones. A lo largo del mismo se presentan programas escritos en FORTRAN y BASIC, en los que no se ha buscado la máxima eficiencia, sino mostrar de manera pedagógica las técnicas más sencillas. Por otra parte, se supone que el lector tiene unos conocimientos mínimos de ambos lenguajes.

Desde un punto de vista numérico, el problema que se plantea es el de resolver una ecuación diferencial lineal de segundo orden con dos condiciones de contorno. En el caso de la ecuación de Schrödinger, en una dimensión, las condiciones de contorno son: la función de onda debe anularse cuando $x \rightarrow \pm\infty$. Para la ecuación radial reducida, la función radial reducida se anula en $r = 0$ y en $r \rightarrow \infty$. El método que emplearemos, denominado «de disparo» (*shooting method*) (véase el libro *Numerical Recipes*), consiste en los siguientes pasos:

- Imponer que se satisfaga una de las condiciones de contorno.
- Elegir una energía E .
- Integrar numéricamente la función de onda con las dos condiciones anteriores y verificar si la otra condición de contorno se satisface. Como, en general, esto último no ocurre, modificamos convenientemente la energía E y volvemos a integrar.

Existen muchos métodos numéricos para la integración de ecuaciones diferenciales lineales de primer orden. Una posible opción podría ser reducir la ecuación de Schrödinger a un sistema de dos ecuaciones de primer orden acopladas mediante el cambio $y_1(x) = \phi(x)$, $y_2 = d\phi/dx$. Sin embargo, en este apéndice vamos a utilizar casi exclusivamente el método de diferencias segundas, para transformar la ecuación diferencial original en una ecuación en diferencias finitas.

P.2. INTEGRACIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER: FUNCIÓN DE ONDA

El primer paso, sencillo y a la vez fundamental, consiste en elegir un sistema de unidades adecuado al problema que estemos tratando. En el caso de, por ejemplo, un oscilador armónico unidimensional con potencial $V(x) = m\omega^2 x^2/2$, resulta conveniente hacer el cambio de escala $x \rightarrow x/\alpha$, donde $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$, con lo que la ecuación de Schrödinger resultante es

$$-\frac{d^2\phi_n(x)}{dx^2} + x^2\phi_n(x) = E_n\phi_n(x) \quad [\text{P.2.1}]$$

En el sistema de unidades empleado, los niveles de energía vienen dados por $E_n = 2n + 1$, con $n = 0, 1, 2, \dots$

Para el potencial coulombiano en el sistema de unidades de Gauss $V(r) = -e^2/r$ [$-e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ en el sistema SI] el cambio de escala $r \rightarrow ra_0/2$, donde $a_0 = \hbar/(mac)$ y α la constante (adimensional) de estructura fina es $\alpha = e^2/(\hbar c)$ (en el sistema de Gauss), permite escribir los autovalores de la ecuación de Schrödinger en dichas unidades como $E_n = -1/(4n^2)$ con $n = 1, 2, 3, \dots$

El siguiente paso recibe el nombre de «discretización». Proviene del hecho de que para el ordenador no existen variables continuas. La opción más frecuente es elegir un conjunto de puntos equiespaciados x_1, x_2, \dots, x_N con $x_{i+1} - x_i = s$. La función de onda sólo podrá tomar valores en este conjunto de puntos, es decir, nuestra solución será un conjunto de números $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$ donde $\phi_i = \phi(x_i)$. Las condiciones de contorno son, entonces, $\phi_1 = 0$ y $\phi_N = 0$. Obsérvese que, para un potencial unidimensional, el punto x_1 es una aproximación numérica de $-\infty$ y x_N lo es de $+\infty$. La bondad de estas aproximaciones depende en cada caso del potencial bajo estudio. Los ejemplos presentados más adelante aclaran este punto.

El principal problema que se plantea entonces es el de calcular derivadas con respecto de variables discretas. La opción más simple es transformar $(d^2\phi/dx^2)(x_i) = \phi_i^{(ii)}$ en la expresión

$$\phi_i^{(ii)} = \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{s^2} \quad (i \geq 2) \quad [\text{P.2.2}]$$

El error que cometemos al aproximar de esta manera la derivada segunda es de orden s^2 . Éste es también el error con el que calcularemos la energía. Una forma simple de deducir [P.2.2] se basa en escribir los desarrollos de Taylor en torno a x_i para ϕ_{i+1} y para ϕ_{i-1} . Al sumarlos y desprestigiar términos de orden superior a s^2 obtenemos [P.2.2]. Más adelante volveremos a utilizar este argumento para mejorar la precisión del cálculo.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo pasa, mediante la discretización, de ser una ecuación diferencial lineal de segundo orden a convertirse en una ecuación en diferencias finitas. Por supuesto, el espaciado s debe ser lo suficientemente pequeño, y el

número de puntos N lo suficientemente grande, como para que la ecuación en diferencias sea una buena aproximación de la ecuación diferencial original. Usando [P.2.2] en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, obtenemos

$$\phi_{i+1} = [(V_i - E)s^2 + 2]\phi_i - \phi_{i-1} \quad \text{[P.2.3]}$$

donde $V_i = V(x_i)$.

La ecuación anterior es fácilmente iterable en un ordenador. Para ello necesitamos una energía E y un par de valores iniciales para la función de onda ϕ_1 y ϕ_2 . En el caso de un potencial unidimensional, hacemos $\phi_1 = 0$ en un punto x_1 tal que, a su izquierda, el potencial $V(x)$ sea mucho mayor que la energía E . El valor que elijamos para ϕ_2 es irrelevante, pues [P.2.3] es lineal; dicho de otro modo: calcularemos la función de onda salvo una constante de normalización. La única precaución que debe tomarse es no sobrepasar el límite de cálculo del programa (10^{38} en BASIC). Obsérvese que suponer idénticamente nula la función de onda a la izquierda de x_1 equivale, en cierto modo, a sustituir el potencial que aparece en la ecuación de Schrödinger por una barrera infinita, puesto que, como vimos en el capítulo 8, la función de onda se anula idénticamente en las paredes del pozo unidimensional infinito. Por tanto, hemos introducido un error sistemático difícilmente evaluable. Una forma de estimarlo consiste en agrandar la región de integración y comprobar que los autovalores calculados no son fuertemente modificados.

Por supuesto, la energía que hayamos elegido E no será autovalor de [P.2.3]. Este hecho se reflejará en que la iteración no produce una función de onda con el buen comportamiento asintótico: no se anula a la derecha de un x_N , para N suficientemente grande, sino que diverge.

Retomando el ejemplo del oscilador armónico, presentamos un programa BASIC que realiza la iteración de [P.2.3] en tal caso:

```
10 PRINT "Introduzca la energia E y el paso s"  
20 INPUT E,s  
30 open "o",#1,"fdeo.dat"  
40 x=-4  
50 phi1=0  
60 phi2=1e-5  
70 x=x+s  
80 phi3=((x*x-E)*s*s+2)*phi2-phi1  
90 print #1,x,phi3  
100 phi1=phi2  
110 phi2=phi3  
120 if x>4.5 goto 140  
130 goto 70  
140 close  
150 stop  
160 end
```

Este programa guarda en el fichero **fdeo.dat** los valores de la función de onda para una energía dada. Los valores dados a $x_1 = -4$, $x_N = 4.5$ y $\phi_2 = 10^{-5}$ en el programa anterior son válidos para el cálculo de los cuatro primeros niveles del oscilador armónico. En la figura P.1 se representan las funciones de onda para $s = 0.1$, $E = 6.99$ y $E = 6.98$, respectivamente. Como puede verse, para $E = 6.99$ la función de onda tiene 4 nodos, por tanto, sabemos que el autovalor numérico E^* (calculado para $s = 0.1$) debe verificar $E^* < 6.99$. Además, para $E = 6.98$ la función de onda tiene 3 nodos, pero no tiende a cero cuando x se hace grande, por tanto, $E^* > 6.98$. De esta manera hemos acotado el autovalor buscado $6.98 < E^* < 6.99$. La comparación del valor obtenido numéricamente con la energía exacta $E_3 = 7$ deja bastante que desear. El error cometido se debe a un paso s demasiado grande. Con un paso s menor nuestra precisión habría aumentado, y el valor exacto para la energía habría quedado comprendido entre las energías para las que la función de onda tiene 3 y 4 nodos, respectivamente. Otra observación que puede hacerse a partir de la figura P.1 es que la función de onda diverge hacia $+\infty$ si la energía es mayor que el autovalor buscado, y hacia $-\infty$ si es menor.

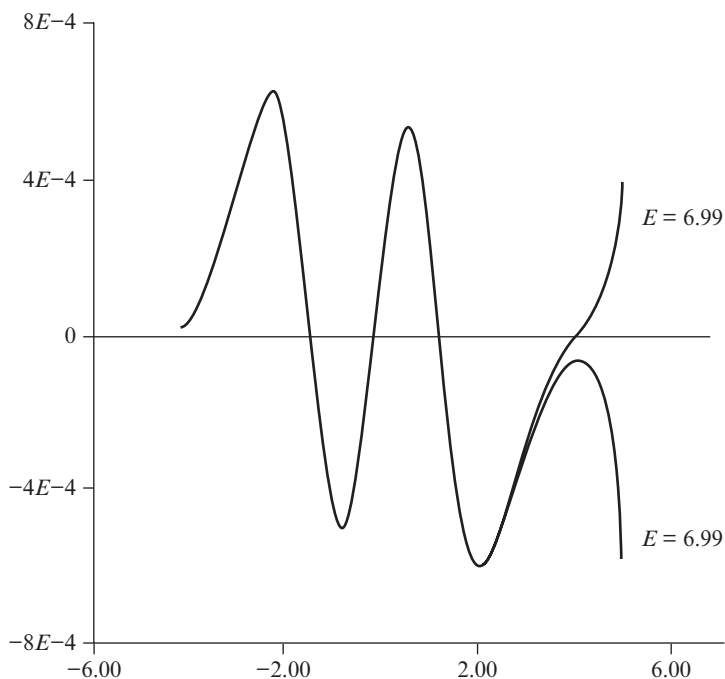


Figura P.1. Funciones de onda para el oscilador armónico calculadas con paso $s = 0.1$ y energías $E = 6.98$ y 6.99 .

Para resolver la ecuación radial reducida correspondiente a un potencial central $V(r)$ (véase el capítulo 12), la condición de contorno exacta es, evidentemente, $\phi_1 = 0$, siendo ahora $r_1 = 0$. La ecuación de Schrödinger discretizada, en unidades adecuadas, es

$$\phi_{i+1} = \{[V_i + l(l+1)/r_i^2 - E]s^2 + 2\}\phi_i - \phi_{i-1} \quad [\text{P.2.4}]$$

donde ϕ es la función de onda radial reducida. El número de nodos de la función de onda es ahora el número cuántico radial n_r , y será necesario ajustar la energía de tal forma que la función de onda tienda hacia cero en r_N para N suficientemente grande. En la figura P.2 se han representado las funciones de onda radiales con $l = 1$, que conseguimos mediante un programa BASIC obtenido a partir del anterior modificando la sentencia 80 de acuerdo con [P.2.4] y los valores de x_1 , x_N y ϕ_2 , para las energías $E = -0.027$ y $E = -0.028$ con paso $s = 0.03$, siendo la energía exacta $E_3 = -1/36$. Para $E = -0.027$ la función de onda tiene 3 nodos, mientras que para $E = -0.028$ tiene 2, por lo que la solución numérica está comprendida entre ambos valores.

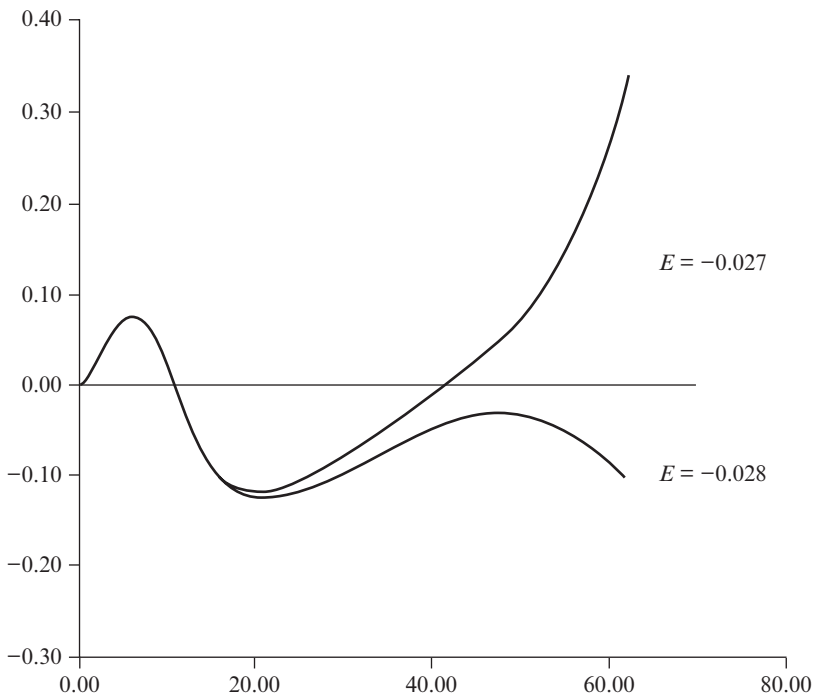


Figura P.2. Funciones de onda para el potencial coulombiano $V(r) = -1/r$ con $l = 1$ y paso $s = 0.03$.

P.3. CÁLCULO DE LA ENERGÍA

Pasamos ahora a ocuparnos del cálculo de la energía una vez que conocemos el comportamiento de la función de onda. El método empleado para el cálculo del autovalor correspondiente a una autofunción con m nodos se ha explicado brevemente al principio de este apéndice. Consiste en:

1. Contar el número de nodos que tiene la función de onda para una energía dada E .
2. Si este número es menor o igual (mayor) que m , aumentar (disminuir) la energía en DE y volver a contar el número de nodos. Este proceso se repite hasta que el número de nodos sea $m + 1$ (m).
3. Reducir el incremento a la mitad y cambiar su signo. Es decir, disminuir (aumentar) la energía en $DE/2$ y volver al punto 1.

El algoritmo anterior, conocido como bisección, termina cuando el incremento DE se ha hecho del orden de la precisión que tenemos (proporcional a s^2). De esta forma, determinamos dos valores de la energía separados entre sí DE , para los que la función de onda tiene m y $m + 1$ nodos, respectivamente.

Con el objeto de no calcular el potencial cada vez que modificamos la energía, memorizamos los valores del potencial en los puntos x_1, x_2, \dots, x_N en un vector de longitud N , $V(i)$, de tal forma que el paso es $s = (x_N - x_1)/(N - 1)$. El error cometido en la energía será, como poco, proporcional a s^2 , pues desconocemos la magnitud del error sistemático cometido al tomar el intervalo finito $[x_1, x_N]$ en lugar de $(-\infty, +\infty)$.

Como no vamos a representar la función de onda, modificamos la ecuación [P.2.3] dividiendo ambos miembros entre ϕ_i y llamando $y_{i+1} = \phi_{i+1}/\phi_i$, con lo que obtenemos

$$y_{i+1} = (V_i - E)s^2 + 2 - \frac{1}{y_i} \quad \text{[P.3.1]}$$

De esta manera no necesitamos fijar el valor arbitrario de ϕ_1 .

A continuación presentamos un programa escrito en FORTRAN que realiza el cálculo anterior para el oscilador armónico:

```
implicit double precision (a-h,o-z)
common/datos/V(10000),e,n,c
print *, 'Energia?'
read *, E
print *, 'Incremento de Energia?'
read *, DE
print *, 'X inicial?'
read *, X1
print *, 'X final?'
read *, XN
print *, 'Numero de nodos?'
read *, m
print *, 'Numero de puntos?'
read *, N
s=(XN-X1)/dble(N)
E=E*s*s
DE=DE*s*s
x=X1
```

Así, se evita multiplicar muchas veces por s^2

Solución numérica de la ecuación de Schrödinger

	do i=1,N	
	V(i)=s*s*x*x	Cálculo del potencial, sólo se
	x=x+s	hace una vez
	enddo	
30	call nodos	
	if (c.gt.dble(m)) then	
	E=E-DE	Disminuimos la energía hasta
	goto 30	que el número de nodos sea me-
	endif	nor o igual que el orden del
	DE=DE/2.d0	autovalor
40	E=E+DE	Avanzamos en sentido contrario
	call nodos	con la mitad de paso, hasta que
	if (c.le.dble(m)) goto 40	el número de nodos sea mayor
	DE=DE/2.d0	
	if(DE/s/s.lt.s*s*ie-3)goto 20	Así, se termina la iteración
	goto 30	
20	print 200,E/s/s	
200	format(3x,'Energia=',1x,f16.10)	
	stop	
	end	
	subroutine nodos	
	implicit double precision (a-h,o-z)	
	common/datos/v(10000),e,n,c	
	y1=0.d0	
	c=0.d0	
	do 40 i=1,n+1	
	y2=V(i)-E+2.d0-y1	De esta forma, contamos dos ve-
	if(y2*y1.lt.0) c=c+0.5	ces el número de cambios de sig-
	y1=1/y2	no (nodos); por ello sumamos 0.5
40	continue	en lugar de 1
	return	
	end	

Este programa consigue encontrar dos valores de la energía separados $10^{-3} \times s^2$, tales que el número de nodos en el menor es igual a m , el orden del autovalor, e igual a $m + 1$ para el mayor. La precisión en el resultado depende de s , que es a su vez función de la amplitud del intervalo $[x_1, x_N]$ y del número de puntos N considerado.

En la tabla P.1 se reproducen algunos de los resultados obtenidos con el programa anterior para $N = 50$ y $N = 100$ puntos en el intervalo $[-5, 5]$ (el número máximo de puntos está limitado a 10 000 en el programa). Una forma sencilla de mejorar la precisión a partir del cálculo realizado es la siguiente. Sea E_N la estimación de la energía con precisión proporcional a s^2 , $E_N = E^* + \alpha s^2 + O(s^3)$, y E_{2N} la estimación con precisión $(s/2)^2$, $E_{2N} = E^* + \alpha(s^2/4) + O(s^3)$, entonces la expresión

$$E_R = \frac{4 \times E_{2N} - E_N}{3} + O(s^3) \quad [P.3.2]$$

permite estimar la energía con precisión s^3 , pues la diferencia en el numerador cancela los términos de orden s^2 . Este método es la base de la extrapolación de Richardson, y los resultados están representados en la tabla P.1.

TABLA P.1
Energías de estados ligados del oscilador armónico

Orden (número de nodos)	Energía (N = 50)	Energía (N = 100)	Extrapolación
0	0.997 4	0.999 37	1.000 02
1	2.986 9	2.996 81	3.000 09
2	4.965 9	4.991 70	5.000 29
3	6.934 3	6.984 02	7.000 60
4	8.891 9	8.973 79	9.001 07
5	10.838 8	10.961 05	11.001 78
6	12.775 0	12.946 14	13.003 17
7	14.701 0	14.930 50	15.007 00

Como ejemplo de la aplicación del programa anterior a un potencial no resoluble de manera exacta, se ha elegido el oscilador puramente cuártico $V(x) = x^4$. Los resultados que obtenemos están representados en la tabla P.2. El intervalo de integración es $[-5, 5]$ y el número de puntos 50 y 100, respectivamente.

TABLA P.2
Energías de estados ligados del oscilador puramente cuártico

Orden (número de nodos)	Energía (N = 50)	Energía (N = 100)	Extrapolación	Otros*
0	1.055 4	1.059 16	1.060 393	1.060 362
1	3.764 3	3.791 01	3.799 924	3.799 673
2	7.335 7	7.426 39	7.456 628	7.455 697
3	11.362 4	11.575 92	11.647 110	11.644 745
4	15.718 6	16.129 70	16.266 736	16.261 826
5	20.316 8	21.014 7	21.247 392	21.238 372
6	25.092 9	26.181 01	26.543 720	
7	29.995 8	31.591 08	32.122 835	

* K. Banerjee, et al. (1987). *Proc. R. Soc., A360*: 575. Londres.

Obsérvense los buenos resultados que proporciona la extrapolación que reproduce cuatro dígitos de resultados obtenidos con otros métodos más precisos.

Solución numérica de la ecuación de Schrödinger

Para potenciales centrales en tres dimensiones elegiremos una coordenada radial máxima r_N , puesto que la coordenada inicial es fija, $r_1 = 0$. Será preciso, además, incluir en el programa FORTRAN anterior el término correspondiente a la barrera centrífuga: $l(l+1)\hbar^2/r^2$ (en las unidades apropiadas). Para el potencial coulombiano $V(r) = -1/r$, por ejemplo, tenemos el siguiente programa

```
        implicit double precision (a-h,o-z)
        common/datos/v(10000),e,n,c
        do 1=0,3
        e=0.1
        rN=100.
        n=800
        s=rN/dble(n)
        r=s
        do i=1,n
            v(i)=s*s*(-1/r+l*(l+1.)/r/r)
            r=r+s
        enddo
        open(unit=1,file='tabla')
        do m=0,4
            de=1.
30         call nodos
            if (c.gt.dble(rn)) then
                e=e-de
                goto 30
            endif
            de=de/2.d0
40         e=e+de
            call nodos
            if (c.le.dble(m)) goto 40
            de=de/2.d0
            if(de/s/s.lt.s*s*1e-3)goto 20
            e=e-de
            goto 30
20         write(1,200)m,l,e/s/s
        enddo
    enddo
20     format(3x,'orden=',I4,3x,'l=',I4,3x,'energia=',f16.3)
    close(1)
    stop
    end
    subroutine nodos
    implicit double precision (a-h,o-z)
    common/datos/v(10000),e,n,c
```

```

y1=0.d0
c=0.d0
do 40 i=1,n
  y2=(v(i)-e+2.d0)-y1
  if(y2*y1.lt.0) c=c+0.5
  y1=1/y2
40 continue
return
end

```

con el que calculamos las energías de los estados con un número de nodos $n_r = 0, 1, 2, 3$ y 4 y momento angular $l = 0, 1, 2$ y 3. Los resultados se almacenan en el fichero tabla y se muestran en la tabla P.3.

TABLA P.3
Estados ligados del potencial coulombiano con $r_N = 100$

n	(n_r, l)	$E(N = 1600)$	$E(N = 800)$	Extrapolación	Exacto
1	(0, 0)	-0.249 937	-0.249 750	-0.250 000	-0.250 000
2	(1, 0)	-0.062 490	-0.062 463	-0.062 500	-0.062 500
3	(2, 0)	-0.027 777	-0.027 765	-0.027 781	-0.027 778
4	(3, 0)	-0.015 600	-0.015 588	-0.015 604	-0.015 625
5	(4, 0)	-0.008 932	-0.008 935	-0.008 931	-0.010 000
2	(0, 1)	-0.062 498	-0.062 494	-0.062 500	
3	(1, 1)	-0.027 777	-0.027 765	-0.027 781	
4	(2, 1)	-0.015 608	-0.015 588	-0.015 614	
5	(3, 1)	-0.009 092	-0.009 088	-0.009 094	
6	(4, 1)	-0.001 669	-0.001 672	-0.001 668	-0.006 944
3	(0, 2)	-0.027 777	-0.027 765	-0.027 781	
4	(1, 2)	-0.015 615	-0.015 588	-0.015 625	
5	(2, 2)	-0.009 352	-0.009 332	-0.009 358	
6	(3, 2)	-0.002 615	-0.002 618	-0.002 614	
7	(4, 2)	0.006 495	0.006 476	0.006 501	-0.005 102
4	(0, 3)	-0.015 615	-0.015 619	-0.015 614	
5	(1, 3)	-0.009 649	-0.009 637	-0.009 653	
6	(2, 3)	-0.003 820	-0.003 808	-0.003 824	
7	(3, 3)	0.004 259	0.004 248	0.004 263	
8	(4, 3)	0.014 605	0.014 594	0.014 608	-0.003 086

A partir de la tabla anterior resulta evidente la existencia de degeneración accidental para el potencial coulombiano. Como puede verse, los resultados para estados ligados

Solución numérica de la ecuación de Schrödinger

con gran número cuántico principal n empeoran; por ejemplo, para $n = 6$, los resultados son francamente malos, y para $n = 7,8$ obtenemos el resultado absurdo de una energía positiva. La razón es que la longitud del intervalo que hemos fijado en el programa $r_m = 100$ es pequeña para estimar la energía de los estados con grandes números cuánticos, puesto que al estar débilmente ligados la función de onda se extiende sobre una región del espacio más amplia. Duplicando esta longitud hemos obtenido los resultados mostrados en la tabla P.4, que muestran un mejor comportamiento para los números cuánticos grandes.

TABLA P.4
Estados ligados del potencial coulombiano con $r_m = 200$

n	(n_r, l)	$E(N = 1600)$	$E(N = 800)$	Extrapolación
1	(0, 0)	-0.249 750	-0.248 999	-0.250 000
2	(1, 0)	-0.062 463	-0.062 353	-0.062 500
3	(2, 0)	-0.027 765	-0.027 686	-0.027 791
4	(3, 0)	-0.015 619	-0.015 601	-0.015 625
5	(4, 0)	-0.009 973	-0.009 985	-0.009 969
2	(0, 1)	-0.062 494	-0.062 476	-0.062 500
3	(1, 1)	-0.027 765	-0.027 686	-0.027 791
4	(2, 1)	-0.015 619	-0.015 601	-0.015 625
5	(3, 1)	-0.009 973	-0.009 985	-0.009 969
6	(4, 1)	-0.006 921	-0.006 934	-0.006 917
3	(0, 2)	-0.027 765	-0.027 686	-0.027 791
4	(1, 2)	-0.015 619	-0.015 601	-0.015 625
5	(2, 2)	-0.009 973	-0.009 985	-0.009 969
6	(3, 2)	-0.006 921	-0.006 934	-0.006 917
7	(4, 2)	-0.004 877	-0.004 858	-0.004 883
4	(0, 3)	-0.015 619	-0.015 601	-0.015 625
5	(1, 3)	-0.009 973	-0.009 985	-0.009 969
6	(2, 3)	-0.006 921	-0.006 934	-0.006 917
7	(3, 3)	-0.004 938	-0.004 858	-0.004 964
8	(4, 3)	-0.002 801	-0.002 783	-0.002 807

Como ejemplo de potencial central no resoluble de manera exacta, al que se puede aplicar el programa anterior, se ha elegido el potencial de Yukawa $V(r) = -10e^{-r}/r$, que describe la interacción fuerte entre partículas nucleares. Utilizando el programa anterior, convenientemente modificado para este caso con $N = 50$ y $r_m = 10$, ya que su alcance es mucho menor que en el caso coulombiano, hemos obtenido los estados ligados que figuran en la tabla P.5.

TABLA P.5
Estados ligados del potencial de Yukawa con $r_m = 10$

(n, l)	$E(N = 50)$
(0, 0)	-12.272
(1, 0)	-0.426
(0, 1)	-0.248

P.4. OTROS MÉTODOS

Veamos a continuación cómo se pueden disminuir los errores cometidos. Una de las formas más usuales de mejorar la precisión de los resultados hasta orden s^4 , conocido como método de Numerov, consiste en generalizar la discretización de la derivada segunda [P.2.2] para expresar la derivada de orden 4 de la función de onda, de la forma siguiente

$$\phi_i^{(iv)} = \frac{\phi_{i+1}^{(ii)} - 2\phi_i^{(ii)} + \phi_{i-1}^{(ii)}}{s^2} \quad [P.4.1]$$

Sumando ahora los desarrollos de Taylor de ϕ_{i+1} y de ϕ_{i-1} en potencias de s hasta orden s^4 , y expresando la derivada de cuarto orden mediante [P.2], tenemos

$$\phi_{i+1} + \phi_{i-1} = \frac{s^2}{12} (\phi_{i+1}^{(ii)} + 10\phi_i^{(ii)} + \phi_{i-1}^{(ii)}) \quad [P.4.2]$$

Utilizando por último la propia ecuación de Schrödinger para escribir la derivada segunda, tenemos la relación de recurrencia

$$\phi_{i+1} = \frac{[5s^2(V_n - E)/6 + 2]\phi_i - [1 - s^2(V_{n-1} - E)]\phi_{i-1}}{1 - s^2(V_{n+1} - E)/12} \quad [P.4.3]$$

Un programa FORTRAN que realiza el cálculo de la energía E para el potencial coulombiano mediante el método de Numerov se escribe a partir del anterior sin más que modificar la subrutina que calcula el número de nodos de la función de onda. Para $N = 800$ puntos y $r_N = 100$, el programa es el siguiente

```
implicit double precision (a-h,o-z)
common/datos/v(BOO),e,n,c,o
do 1=0,3
e=0.1
rm=100.
```

Solución numérica de la ecuación de Schrödinger

```
n=800
s=rm/dbble(n)
r=s
do i=1,n
  v(i)=s*s*(-1/r+l*(l+1.)/r/r)
  r=r+'s
enddo
open(unit=1,file='tabla')
do m=0,4
  de=1.
30  call nodos
  if (c.gt.dble(m))then
    e=e-de
    goto 30
  endif
  de=de/2.d0
40  e=e+de
  call nodos
  if (c.le.dble(m))goto 40
  de=de/2.d0
  if(de/s/s.lt.s*s*s*s*0.1)goto 20
  e=e-de
  goto 30
20  write(1,200)m,l,e/s/s
200  format(3x,'orden=',I4,3x,'l=',I4,3x,'energia=',f16.3)
enddo
enddo
close(1)
stop
end
subroutine nodos
implicit double precision (a-h,o-z)
common/datos/v(800),e,n,c,o
y1=0.d0
c=0.d0
y1=(1-(v(2)-e)/12)/(5*(v(1)-e)/6+2.d0)
do 40 i=2,n
  y2=(5*(v(i)-e)/6+2.d0-y1*(1-(v(i-1)-e)/12))
  &  /(1-(v(i+1)-e)/12)
  if(y2*y1.lt.0) c=c+0.5
  y1=1/y2
40  continue
return
end
```

Con el programa anterior se han obtenido los datos que figuran en la tabla P.6 para energías de estados ligados del potencial coulombiano. Obsérvese cómo mejoran los obtenidos con el método de diferencias segundas.

También ahora podemos utilizar el método de extrapolación de Richardson teniendo en cuenta el hecho de que las energías calculadas tienen un error proporcional a s^4 ; por tanto, habrá que modificar la fórmula [P.3.2], que ahora se escribe

$$E_R = \frac{16 \times E_{2N} - E_N}{15} \quad [P.4.4]$$

TABLA P.6
*Estados ligados del potencial coulombiano
 calculados con el método de Numerov,
 con $r_m = 100$*

n	(n, l)	$E(N = 1600)$	$E(N = 800)$
1	(0, 0)	-0.249 842	-0.249 391
2	(1, 0)	-0.062 479	-0.062 418
3	(2, 0)	-0.027 771	-0.027 750
4	(3, 0)	-0.015 598	-0.015 588
5	(4, 0)	-0.008 934	-0.008 928
2	(0, 1)	-0.062 500	-0.062 494
3	(1, 1)	-0.027 777	-0.027 772
4	(2, 1)	-0.015 608	-0.015 604
5	(3, 1)	-0.009 092	-0.009 096
6	(4, 1)	-0.001 675	-0.001 688
3	(0, 2)	-0.027 777	-0.027 772
4	(1, 2)	-0.015 615	-0.015 611
5	(2, 2)	-0.009 356	-0.009 355
6	(3, 2)	-0.002 619	-0.002 626
7	(4, 2)	0.006 489	0.006 468
4	(0, 3)	-0.015 621	-0.015 619
5	(1, 3)	-0.009 651	-0.009 653
6	(2, 3)	-0.003 820	-0.003 824
7	(3, 3)	0.004 253	0.004 233
8	(4, 3)	0.014 603	0.014 571

Una alternativa al esquema iterativo presentado en este apéndice consiste en escribir las N ecuaciones [P.2.3] en forma matricial, con las condiciones de contorno $\phi_1 = 0$ y $\phi_N = 0$. El cálculo de los niveles de energía se reduce en esta ocasión al cálculo de los autovalores de dicha matriz (véase A. Galindo y P. Pascual; también R. Guardiola y J. Ros).

En el método de Numerov se ha incluido el efecto de la derivada de orden cuatro en la discretización de la derivada segunda. Este procedimiento se puede generalizar para una derivada de orden arbitrario. El límite en el que se incluyen todas las derivadas en la ecuación de Schrödinger discretizada se llama «aproximación de ondas planas» (véase A. Galindo y P. Pascual; también R. Guardiola y J. Ros).

Otro tipo de métodos numéricos usan una base de autofunciones que permite transformar la ecuación de Schrödinger en un sistema de ecuaciones lineales a resolver numéricamente. Este método es conocido como el método espectral o de Rayleigh-Ritz-Garlekin. Por último, mencionemos que también es posible sustituir el potencial bajo estudio por otros potenciales que, en la región de interés, guarden un estrecho parecido con el que nos interesa.

No se puede decir que un método sea intrínsecamente mejor que otro, lo que sí puede afirmarse es que un método se adapta mejor al cálculo de ciertos tipos de potencial. El método de diferencias finitas que se ha presentado tiene la virtud de ser aplicable en la mayor parte de las ocasiones, proporcionando resultados aceptables.

P.5. DISPERSIÓN CUÁNTICA EN UNA DIMENSIÓN

El problema que se plantea es el de calcular la evolución de un paquete de ondas inicial $\psi(x, 0)$ con las condiciones de contorno $\psi(x, t) \rightarrow 0$ cuando $x \rightarrow \pm\infty$. Sea $\psi(j, n)$ el valor numérico (complejo) de la función de onda en el punto $x = j, t = n$. Al discretizar la ecuación de Schrödinger tenemos dos opciones:

- a) Si discretizamos la derivada temporal en el punto $x = j, t = n$ como $[\psi(j, n + 1) - \psi(j, n)]/\Delta t$, el esquema resultante es

$$\psi(j, n + 1) = \left(1 - i \frac{\Delta t}{\hbar} H\right) \psi(j, n) \quad [\text{P.5.1}]$$

- b) Si discretizamos la derivada temporal en el otro sentido, es decir, como $[\psi(j, n) - \psi(j, n - 1)]/\Delta t$, el esquema es

$$\left(1 + i \frac{\Delta t}{\hbar} H\right) \psi(j, n + 1) = \psi(j, n) \quad [\text{P.5.2}]$$

Comparándolos con la solución formal de $\psi(x, t) = \exp(-iHt/\hbar)\psi(x, 0)$, vemos que ambos son correctos en primer orden en Δt . El grave problema que plantean los dos esquemas anteriores es que ninguno de los dos operadores es unitario, con lo que no conservan la norma del paquete durante su evolución y, por tanto, no proporcionan resultados correctos.

Una solución a este problema consiste en sumar las dos opciones [P.5.1] y [P.5.2], con lo que se obtiene

$$\exp(-iHt/\hbar) \sim \frac{1 - \frac{1}{2}i \frac{\Delta t}{\hbar} H}{1 + \frac{1}{2}i \frac{\Delta t}{\hbar} H} \quad [\text{P.5.3}]$$

Obsérvese que esta aproximación es exacta hasta segundo orden.

Al utilizar una aproximación en diferencias finitas para H (véase [P.2.2 y P.2.3]), la ecuación anterior se convierte en un sistema de ecuaciones tridiagonal complejo para el que existen técnicas específicas de resolución (véase W. Press.).

BIBLIOGRAFÍA

- Banerjee, K. et al. (1987). *Proc. R. Soc.*, A360: 575. Londres.
- Galindo, A. y Pascua L. P. (1989). *Problemas de Mecánica Cuántica*. Madrid: Eudema Universidad: Manuales.
- Guardiola, R. y Ros, J. (1982). *J. Comput. Phys.*, 45: 374.
- Guardiola, R. y Ros, J. (1982). *J. Comput. Phys.*, 45: 390.
- Guardiola, R., Polls, A. y Ros, J. (1984). *Anales de Física*, A80: 15.
- Oset, E. y Sacedo, L. L. (1984). *Anales de Física*, A80: 109.
- Press, W. H. et al. (1986). *Numerical Recipes: the art of scientific computing*. Cambridge (Estados Unidos): Cambridge University Press.



La oscilación de los neutrinos

Marina Ramón Medrano

Q.1. FUENTES DE NEUTRINOS

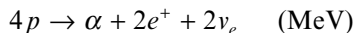
En el capítulo 42 (Estructura de las partículas: las familias) se ha visto que los neutrinos activos (y sus correspondientes antineutrinos) se presentan en tres «sabores» (ν_e , ν_μ y ν_τ), y que intervienen en interacciones débiles (en promedio, un neutrino podría viajar, a través de la materia, 1000 años luz antes de interactuar). Las fuentes de producción de neutrinos son:

- a) Los reactores nucleares.
- b) Los aceleradores.
- c) El Sol, que da lugar a los *neutrinos solares*.
- d) Las colisiones de rayos cósmicos con la atmósfera terrestre, origen de los llamados *neutrinos atmosféricos*.
- e) Las fuentes cósmicas, como la explosión de una supernova, que generarían *neutrinos cósmicos*.

Las dos primeras fuentes entran dentro del marco del laboratorio —es decir, donde se desarrollan fenómenos físicos en los que se puede intervenir—, mientras que para las otras tres sólo podemos detectar sus efectos. En general, la detección se lleva a cabo en el interior de minas profundas, a fin de que la corteza terrestre apantalle la radiación cósmica, evitando, en gran parte, que ocurran en los detectores procesos ajenos a los que nos interesan. En dicha mina se coloca un gran tanque lleno de un medio material con el que el neutrino pueda interactuar (por ejemplo, agua pesada, D_2O); en este proceso se producirá un leptón cargado, que será la partícula detectada mediante instrumentos colocados en el interior de la cavidad. Un ejemplo ilustrativo fue el SNO (Sudbury Neutrino Observatory, Canadá) para la detección de neutrinos solares, en el que se dispuso una cavidad a 2 km de profundidad, y en cuyo interior había 1000 toneladas de D_2O . En el proceso, $\nu_e + d \rightarrow p + p + e^-$ la partícula que se detecta es el electrón, e^- , mediante efecto Cherenkov, que permite, además, conocer el origen de los neutrinos, al estar correlacionada la dirección del neutrino incidente con la del electrón.

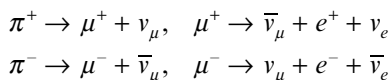
Q.2. NEUTRINOS SOLARES Y ATMOSFÉRICOS

Los *neutrinos solares* son producidos en el interior del Sol, y la cadena de reacciones sucesivas que tienen lugar puede resumirse como:



En este proceso hay emisión de neutrinos electrónicos ν_e , que, junto al conocimiento que se tiene de la dinámica solar, permite calcular el flujo esperado de dichos neutrinos sobre la superficie terrestre. A partir de la luminosidad solar observada, se determina que el flujo de neutrinos sobre la Tierra sería del orden de $6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ (del 2-3% de la energía total emitida por el Sol). Sin embargo, ya en 1969, Raymond Davies Jr. y sus colaboradores detectaron, en una mina de Dakota del Sur (Homestake, Estados Unidos), un flujo de neutrinos electrónicos *menor* que el esperado (reacción de detección: $\nu_e + {}^{37}\text{Cl} \rightarrow e^- + {}^{37}\text{Ar}$, y cálculos teóricos por J. N. Bahcall y colaboradores), dando lugar al entonces llamado *problema de los neutrinos solares*. Resultados similares fueron obtenidos por GALLEX (Gran Sasso, Italia), SAGE (Rusia), Kamiokande (Japón) y SNO. Dado que detectores diferentes son sensibles a rangos diferentes de energía de los neutrinos solares, se observó que la supresión del flujo dependía de la energía. La cuestión es, entonces: si el modelo solar teórico ha demostrado su validez confrontado a otros procesos solares, ¿qué le ha sucedido al flujo de los neutrinos electrónicos, ν_e , en su trayecto desde el Sol a la Tierra? Actualmente, la explicación aceptada es la de que un neutrino de un sabor dado puede *oscilar* a otro sabor (como sucede con los quarks al intervenir en interacciones débiles); por ejemplo, un neutrino electrónico (ν_e) podría oscilar a uno muónico (ν_μ), lo que explicaría el déficit de neutrinos electrónicos en el flujo detectado.

La oscilación de neutrinos se manifiesta también para los *neutrinos atmosféricos*. Los protones procedentes del espacio exterior (rayos cósmicos primarios), al colisionar con los protones de nuestra atmósfera (átomos de oxígeno o nitrógeno), dan lugar a una serie de procesos en cascada (a veces llamados rayos cósmicos secundarios) que conducen a desintegraciones débiles finales, por ejemplo:



Se esperaría, por tanto, el doble número de neutrinos muónicos (ν_μ) que de neutrinos electrónicos (ν_e). Sin embargo, no es así: el número detectado de ambos neutrinos es similar, como corroboró el Superkamiokande (ampliación por 10 del Kamiokande, Japón), gigantesco detector en el interior del monte Ikenoyama, con una cavidad llena de 50 000 toneladas de agua superpura ($\nu + e^- \rightarrow \nu + e^-$). Este hecho experimental abre, por ejemplo, la posibilidad de que el sabor ν_μ oscile al sabor ν_e .

Por otra parte, es obvio que no podemos controlar las fuentes de los neutrinos solares, atmosféricos y cósmicos (véase en este apéndice), de aquí el interés de llevar a

cabo experimentos controlables para el estudio de la oscilación de neutrinos; dichos neutrinos tendrían como fuentes los reactores nucleares y los aceleradores, a los que se añadirían los sistemas de detección. Entre los proyectos con reactores estaría el Kamland (Japón), constituido por una serie de plantas nucleares, con el Superkamiokande como detector. Y entre los proyectos con las segundas fuentes se encontrarían: el del CERN (Ginebra, Suiza), donde los neutrinos, a través de los Alpes, alcanzarían el Laboratorio Nacional del Gran Sasso (a 750 km de Roma, Italia); el de MINOS (Main Injector Neutrino Oscillation Research, Estados Unidos), donde desde el Femilab (Chicago, Estados Unidos) los neutrinos viajarían hasta un detector situado en la mina de Soudan (Minnesota, Estados Unidos) a unos 725 km de distancia, y el KEK (Japón), en el que un haz de ν_μ atravesaría la corteza terrestre hasta ser detectado por el Superkamiokande a unos 250 km. Fijar la distancia de *vuelo* es importante porque, como se verá a continuación, la probabilidad de que un sabor se transforme en otro dependerá también de ella.

Q.3. OSCILACIÓN DE NEUTRINOS

Hasta ahora las masas de los tres sabores de neutrinos (ν_e, ν_μ, ν_τ) se han considerado como nulas (modelo *estándar*: modelo de Weinberg-Salam, para interacciones electrodébiles, y Cromodinámica Cuántica, para interacciones fuertes). Pero para que cualquiera de los tres sabores del neutrino pueda oscilar a otro, tiene que haber, según la Mecánica Cuántica, tres estados con masas no nulas y distintas entre sí (aunque dos de ellas podrían tener valores próximos).

Supongamos, entonces, que cada uno de los estados de sabor es una superposición lineal, coherente, de los estados de masa $|v_1\rangle, |v_2\rangle$ y $|v_3\rangle$, lo que se expresaría como:

$$|v_s\rangle = a_{s1}|v_1\rangle + a_{s2}|v_2\rangle + a_{s3}|v_3\rangle$$

donde $s = e, \mu, \tau$, y a_{si} ($i = 1, 2, 3$) son las amplitudes de probabilidad (siendo $|a_{s1}|^2 + |a_{s2}|^2 + |a_{s3}|^2 = 1$).

Para simplificar, y a efectos de realizar un cálculo mecano-cuántico sencillo, consideremos sólo las dos primeras familias leptónicas, es decir, a nivel de neutrinos ν_e y ν_μ . En el instante inicial, $t_0 = 0$, parametrizamos los coeficientes de las correspondientes superposiciones lineales mediante un ángulo θ , llamado *ángulo de mezcla*

$$\begin{aligned} |v_\mu(0)\rangle &= \cos\theta|v_1\rangle + \text{sen}\theta|v_2\rangle \\ |v_e(0)\rangle &= -\text{sen}\theta|v_1\rangle + \cos\theta|v_2\rangle \end{aligned}$$

Obsérvese que las ecuaciones anteriores pueden expresarse como una ecuación matricial bidimensional en la que el vector \mathbf{v}_m ($|v_1\rangle, |v_2\rangle$) se transforma en el vector \mathbf{v}_s ($|v_\mu\rangle, |v_e\rangle$)

mediante una matriz ortogonal O (coeficientes reales) de rotación. Ésta es una transformación *unitaria* que conserva los productos escalares. Luego, partiendo de que $|v_1\rangle$ y $|v_2\rangle$ forman una base ortonormal:

$$\langle v_1 | v_1 \rangle = 1 = \langle v_2 | v_2 \rangle, \quad \langle v_1 | v_2 \rangle = 0$$

se sigue:

$$\langle v_e | v_e \rangle = 1 = \langle v_\mu | v_\mu \rangle, \quad \langle v_e | v_\mu \rangle = 0$$

(y a la inversa).

Consideremos ahora la evolución en el tiempo mediante un hamiltoniano H independiente del tiempo. Al cabo de un tiempo t ($t > t_0$) se tendría, para el estado del neutrino electrónico:

$$|v_e(t)\rangle = -\exp(-iE_1 t/\hbar) \text{sen } \theta |v_1\rangle + \exp(-iE_2 t/\hbar) \text{cos } \theta |v_2\rangle$$

donde E_1 y E_2 son los autovalores de la energía correspondientes a los autoestados del hamiltoniano $|v_1\rangle$ y $|v_2\rangle$.

Por tanto, la probabilidad de que un neutrino electrónico permanezca como tal, al cabo de un tiempo t , vendrá dada por:

$$P(v_e, v_e) = |\langle v_e(t) | v_e(0) \rangle|^2$$

donde la amplitud de transición es:

$$\langle v_e(t) | v_e(0) \rangle = \exp(iE_1 t/\hbar) \text{sen}^2 \theta + \exp(iE_2 t/\hbar) \text{cos}^2 \theta$$

y considerando $\langle v_e(t) | v_e(0) \rangle = R + iI$ (R e I reales), donde

$$R = \text{sen}^2 \theta \text{cos}(iE_1 t/\hbar) + \text{cos}^2 \theta \text{cos}(iE_2 t/\hbar)$$

$$I = \text{sen}^2 \theta \text{sen}(iE_1 t/\hbar) + \text{cos}^2 \theta \text{sen}(iE_2 t/\hbar)$$

la probabilidad $P(v_e, v_e) = (R^2 + I^2)$ vendrá dada por:

$$P(v_e, v_e) = 1 - \text{sen}^2 2\theta \text{sen}^2 \left[\frac{\Delta E}{2\hbar} t \right]$$

donde $\Delta E = E_1 - E_2$. Y, dado que la suma de probabilidades de que un neutrino electrónico permanezca como tal o se transforme en un neutrino muónico ha de ser igual a 1:

$$P(\nu_e, \nu_e) + P(\nu_e, \nu_\mu) = 1$$

se tiene que la probabilidad de que un neutrino electrónico se transforme en uno muónico, al cabo de un tiempo t , es igual a:

$$P(\nu_e, \nu_\mu) = \text{sen}^2 2\theta \text{sen}^2 \left[\frac{\Delta E}{2\hbar} t \right]$$

siendo el primer término de la derecha la amplitud de oscilación, que depende del ángulo de mezcla θ , y el segundo término, una función oscilatoria del tiempo.

Considerando los neutrinos como partículas altamente relativistas, $m_i \ll E_i$ ($i = 1, 2$), se tiene:

$$E_i = (m_i^2 c^4 + p^2 c^2)^{1/2} = pc \left(1 + \frac{m_i^2 c^2}{2p^2} + \dots \right)$$

donde \mathbf{p} es el momento lineal común de los neutrinos y $|\mathbf{p}| \equiv p$. Tomando sólo los dos primeros términos del desarrollo ($m_i c \ll p$), y aproximando $E_{\nu_e} = pc$, ΔE viene dado por:

$$\Delta E = \frac{\Delta m^2 c^4}{2E_{\nu_e}}$$

donde $\Delta m^2 = m_1^2 - m_2^2$.

Finalmente, la probabilidad de que un neutrino electrónico se transforme en uno muónico es:

$$P(\nu_e, \nu_\mu) = \text{sen}^2 2\theta \text{sen}^2 \left[\frac{\Delta m^2 c^4}{4E_{\nu_e} \hbar} t \right]$$

de aquí que la frecuencia de oscilación es del orden de $\Delta m^2 c^4 / E_{\nu_e} \hbar$. Obsérvese que la probabilidad es sólo sensible a la diferencia de masas al cuadrado, no a las masas individuales, lo que es de gran importancia al comparar con posibles valores experimentales.

Por otra parte, si L es la longitud recorrida en un tiempo t , y siendo los neutrinos partículas altamente relativistas, L puede igualarse al producto de c por t ; y la probabilidad de que un neutrino electrónico se transforme en uno muónico se expresa como:

$$P(\nu_e, \nu_\mu) = \text{sen}^2 2\theta \text{sen}^2 \left[\frac{\Delta m^2 c^3 L}{4E_\nu \hbar} \right]$$

Se ve, por tanto, que la probabilidad de oscilación entre un sabor y otro depende no sólo de la diferencia de masas al cuadrado, sino también de la distancia entre fuente y detector. Obsérvese que ambas dependencias aparecen dentro del argumento de una función sinusoidal: el neutrino oscila entre un sabor y otro, de aquí el nombre de *oscilación de neutrinos*. Las observaciones de dicho fenómeno proporcionarían los dos parámetros Δm^2 y θ .

Si se tuviesen en cuenta los tres sabores de neutrinos, y, por tanto, tres estados de masa, la matriz de mezcla sería la llamada matriz de Pontecorvo-Maki-Nakagawa-Sakata (en general, habría que considerar incluso los antineutrinos). Sin embargo, dado que dos de las masas correspondientes a los estados $|\nu_i\rangle$ ($i = 1, 2, 3$) podríamos considerarlas como próximas, el sencillo estudio anterior mantiene su validez física.

Q.4. NEUTRINOS CÓSMICOS

Un aspecto muy relevante de los neutrinos es su cualidad de *testigos* del Universo, dada su débil interacción. En esta categoría entran los *neutrinos cósmicos*: neutrinos de alta energía que pueden ser generados por fenómenos violentos en el Universo. Un ejemplo de ellos fue dado por los neutrinos generados por la explosión de la Supernova 1987A en la Gran Nube de Magallanes (galaxia satélite de la Vía Láctea). Para las supernovas (explosión al final de la evolución estelar), casi el 99% de la energía liberada lo hace en forma de neutrinos. En el caso de la 1987A, los neutrinos habrían tardado 16×10^4 años en llegar a la Tierra. El espectro de estos neutrinos proporciona información no sólo sobre las propiedades de ellos mismos, sino también sobre la naturaleza del colapso estelar. La detección fue llevada a cabo por Kamiokande II (Japón) y por IMB (Irime Michigan Brookhaven, Estados Unidos), situado este último en una mina de sal. Ambos experimentos habían sido concebidos en principio para detectar la desintegración del protón.

Uno de los más ambiciosos proyectos es el de Ice Cube, antes Amanda, en la base Amundsen-Scott, en la Antártida. Sensores suspendidos en agujeros perforados en el hielo (considerado aquí como el sólido más transparente de la Tierra), dispuestos en cables de fibra óptica, captarán la luz originada por el efecto Cherenkov de las partículas cargadas producidas tras la interacción de los neutrinos. La Tierra (con sus casi 13 000 km de diámetro) actuaría como un filtro para los neutrinos que inciden sobre el Polo Norte, al detener otras radiaciones. Por todo lo anterior, el Ice Cube podría calificarse como un telescopio de neutrinos. En la detección de neutrinos de alta energía también intervienen, entre otros, los mencionados Superkamiokande (Japón); SNO⁺ (continuación del SNO), y MINOS/MINOS⁺ (Estados Unidos); ANTARES y KM3NeT (mar Mediterráneo), y el LVD (Large Volumen Detector, Gran Sasso, Italia). Asimismo, se ha proyectado el ARIANNA (Antartic Ross Ice Shelf Antenna Neutrino Array, Antártida, Polo Sur).

En este contexto, el incremento en el número y calidad de datos cosmológicos (satélites y estación espacial) está permitiendo ligar a los neutrinos con la evolución del Universo (asimetría materia-antimateria, nucleosíntesis, formación de galaxias, halos galácticos y materia oscura) y, a su vez, ampliar el conocimiento sobre las propiedades de los neutrinos, tales como el número de especies diferentes y su estabilidad y los límites para sus masas.

Q.5. NEUTRINOS ESTÉRILES Y MATERIA OSCURA

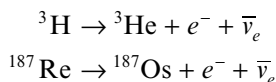
Las observaciones cosmológicas, a partir de datos de los satélites WMAP (NASA) y Planck (ESA, Agencia Espacial Europea), permiten más de tres familias de neutrinos. Esto supondría, en primer lugar, una extensión del modelo estándar de interacciones fundamentales, que sólo contaba con tres familias de neutrinos/antineutrinos (*activos*) que participaban en las interacciones débiles (y también en las gravitatorias por tener masa). Por ello, una de las modificaciones del modelo estándar, que ha sido propuesta, consiste en la introducción de los llamados *neutrinos estériles*. Dichos objetos, supuestos también elementales, no intervendrían en interacciones débiles, de ahí su nombre de estériles, pero sí lo harían en interacciones gravitatorias, al tener también masa (y quizá en unas hipotéticas interacciones superdébiles, mediadas por bosones mucho más pesados que W^+ , W^- y Z^0).

La existencia de los neutrinos estériles, y su detección indirecta, no sólo sería importante desde el punto de vista de las partículas elementales y de sus modelos teóricos, sino que podría ser fundamental en Cosmología si estos neutrinos fuesen candidatos posibles a la *materia oscura* del Universo, dado que la materia visible (lo es porque emite o absorbe radiación) constituye menos del 5% del contenido materia/energía del cosmos. En otras palabras, las discrepancias entre la materia luminosa y los efectos gravitacionales observados (velocidades rotacionales de las galaxias, lentes gravitacionales, anisotropías en la radiación de fondo) muestran que más del 80% de la materia *gravitacional* del Universo es materia oscura (según datos del satélite Planck, la distribución en el Universo sería del orden de: 4.9% de materia visible, 26.8% de materia oscura y 68.3% de energía oscura).

Los datos cósmicos para distancias inferiores a 10^2 kpc (1 parsec = 3.08×10^{13} km; 1 kpc = 10^3 pc) parecen inclinarse por un candidato para la materia oscura cuya masa fuese del orden de unos pocos keV/ c^2 . Se hablaría entonces de materia oscura templada, o WDM (Warm Dark Matter), en contraposición a la materia oscura caliente, o HDM (Hot Dark Matter; por ejemplo: neutrinos activos), y a la materia oscura fría, o CDM (Cold Dark Matter; partículas pesadas, al menos, en el orden de los GeV/ c^2 o TeV/ c^2 , ¿partículas supersimétricas?).

KATRIN (Karlsruhe Tritium Neutrino, Alemania) y MARE (Microcalorimeter Arrays for Rhenium, Milán, Italia) son experimentos en curso que podrían detectar en el futuro neutrinos estériles de unos pocos keV. Ambos experimentos fueron, en principio, diseñados para la medida de las masas *individuales* de los neutrinos activos, puesto que en la oscilación de neutrinos, como hemos visto, sólo se mide la diferencia de los cua-

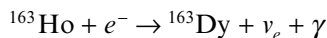
drados de las masas, y se basan en la desintegración β de los núcleos tritio (${}^3\text{H}$; $Z = 1$) y renio 187 (${}^{187}\text{Re}$; $Z = 75$), respectivamente:



donde ${}^3\text{He}$ ($Z = 2$) y ${}^{187}\text{Os}$ ($Z = 76$) son isótopos del helio y del osmio. Del balance de energías (del orden de los keV) y del espectro de energías del electrón, en ambas desintegraciones, se deduciría la masa individual del antineutrino. Y considerando, además, la oscilación de los neutrinos, se podría conocer la masa individual de los diferentes neutrinos (o establecer cotas superiores).

Si ahora se supone que el fenómeno de la oscilación de neutrinos afecta no sólo a los activos sino también a los estériles, podría ser posible deducir la masa de estos últimos (consideremos, por simplicidad, una superposición de dos estados de masas, uno ligero (meV – eV) y otro pesado (KeV); este último sería prácticamente el neutrino estéril, dada la pequeñez esperada del ángulo de mezcla, del orden de 10^{-3}).

Con el propósito anterior, MARE y el nuevo experimento ECHO (Heidelberg, Alemania) están considerando el proceso de captura electrónica del holmio 163 ($Z = 67$), dando el disprosio 163 ($Z = 66$):



Asimismo, siguiendo con la desintegración β del tritio, estaría el Project8 (Seattle, Estados Unidos).

La detección de un neutrino estéril, como un candidato posible para la materia oscura, no se limita a los experimentos dentro de la física nuclear, sino que satélites como el Chandra (NASA) y el XMM-Newton (ESA) para la detección de rayos X (procedentes, por ejemplo, de la galaxia Andrómeda o del cúmulo de Perseo) pueden contribuir a ello significativamente, dado que un neutrino estéril podría desintegrarse en un neutrino activo más un fotón (repartiéndose la energía entre ambos).

Otra cuestión, sin esclarecer, referente a los neutrinos (tanto activos como estériles) es si éstos son partículas de Dirac (partícula y antipartícula no coinciden) o de Majorana (partícula y antipartícula coinciden). Un nuevo experimento, Proyecto Majorana, tratará de dar una respuesta mediante los procesos de desintegración doble β .

La comprensión de la sorprendente, y compleja, física de los neutrinos no ha hecho más que comenzar.

BIBLIOGRAFÍA

Mohapatra, R. N. y Pal, P. B. (2004). *Massive neutrinos in Physics and Astrophysics*, World Scientific.

R

Información cuántica: una introducción elemental

Ramón F. Álvarez-Estrada
Antonio Muñoz Sudupe

La Información Cuántica, que es una rama de la Mecánica Cuántica, ha sido muy activa en las dos últimas décadas y continúa siéndolo. Es razonable ofrecer en un libro general sobre Física Cuántica como éste una introducción elemental a algunos aspectos de la Información Cuántica. En este apéndice nos concentraremos en:

1. Algunos conceptos generales, con un aparato matemático simple, en lo posible.
2. La descripción, esencialmente cualitativa, de algunos experimentos cruciales con fotones y con iones.
3. Una introducción sencilla a los algoritmos cuánticos, todo lo cual ha contribuido sustancialmente a afianzar el interés por la Información Cuántica.

Algunos aspectos tratados en este apéndice (como los del subapartado R.2.2) pueden ser considerados como ejercicios de Física Cuántica. Hay un buen número de introducciones a y tratamientos de la Información Cuántica, mucho más amplios y detallados, y con niveles superiores al del presente apéndice: véanse, por ejemplo, Nielsen y Chuang (2001), Galindo (2001), Galindo y Martín-Delgado (2002) y el número especial del volumen 14 de la *Revista Española de Física* (2000). En ellos se ofrece, además, una variada bibliografía, que amplía la dada aquí.

R.1. QUBITS

Recordemos en primer lugar que el *bit*, unidad elemental de información *clásica*, toma *exclusivamente* dos valores discretos: 0 o 1.

Consideremos un sistema cuántico y todos los estados posibles (funciones de onda, kets) asociados a él que puedan representar situaciones físicas. Supongamos que todos esos posibles estados pueden expresarse como combinaciones lineales de solamente dos estados, linealmente independientes entre sí, con dos coeficientes o amplitudes complejas. Es decir, supongamos que el espacio constituido por todos esos posibles estados es bidimensional. En tal caso, se dice que dicho sistema cuántico es un *qubit*.

El qubit es la unidad elemental de *información cuántica*. Es el análogo cuántico del bit de la información clásica, arriba considerado. Las posibles informaciones contenidas en el qubit están almacenadas en los posibles estados de un sistema cuántico de dos niveles ($|0\rangle$,

$|1\rangle\rangle$ ortonormales, como, por ejemplo, los estados de una partícula de espín $1/2$ o las polarizaciones (en direcciones ortogonales) de un fotón, así como en las superposiciones lineales y continuas de dichos estados. Lo que resulta más sorprendente, en comparación con el caso clásico, es que las diversas informaciones en el qubit están contenidas en las posibles combinaciones lineales, llamadas *superposiciones*, de estos dos estados $|\Psi\rangle = \alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle$, donde α_0 y α_1 son números complejos (amplitudes de probabilidad) tales que $|\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 = \langle\Psi|\Psi\rangle = 1$. Merece la pena insistir en que la información cuántica está codificada en α_0 y α_1 . Los ordenadores cuánticos, que son un proyecto muy ambicioso basado en la Información Cuántica, deberán ser capaces de manipular estos qubits utilizando para ello algoritmos apropiados.

Se pueden crear, además, estados de múltiples qubits. Por ejemplo, consideremos un sistema cuántico formado por dos qubits. En este caso, las situaciones físicas corresponden a la información que se tenga sobre los estados del sistema completo de dos qubits, pero no de cada uno por separado. Así, el estado de dos qubits más general será

$$|\Psi\rangle = \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle + \alpha_{10}|10\rangle + \alpha_{11}|11\rangle$$

En otros apartados de este apéndice también utilizaremos la notación de $|0\rangle|0\rangle$ y $|0\rangle|1\rangle$ en lugar de $|00\rangle$ y $|01\rangle$. Consideremos ahora un proceso de medición conjunto sobre ese estado general con objeto de determinar en qué estados pueden encontrarse los dos qubits. Los resultados posibles de la medición conjunta podrían interpretarse como 00, 01, 10 y 11, que a su vez podríamos reinterpretar como los resultados decimales 0, 1, 2 y 3, con las probabilidades respectivas $|\alpha_{ij}|^2$ con $i, j = 0, 1$. Más tarde veremos estados de este tipo que tienen especial relevancia en Información Cuántica.

Tomemos dos partículas de espín $1/2$ (omitiendo el resto de sus variables dinámicas y números cuánticos). El conjunto de todos los posibles estados de espín de cada una de esas dos partículas puede ser asemejado a un simple qubit. El sistema compuesto formado por los dos espines es un sistema de dos qubits. Otro ejemplo, que discutiremos en el apartado R.2, es el proporcionado por los estados de polarización de dos fotones según dos direcciones ortogonales.

Generalizando, es posible construir estados de n -qubits como superposiciones de estados $|x_1 \dots x_n\rangle$, donde x_i ($i = 1, \dots, n$) son 0 o 1, como en los ejemplos anteriores de uno o dos qubits. El número de términos en la superposición crece con n como 2^n . Este aumento exponencial de la información contenida en una superposición de qubits nos da idea de la posible potencia de cálculo de un ordenador cuántico, de una máquina capaz de operar con qubits. Nótese que para un número «modesto» de qubits, $n = 100$, resulta $2^{100} \approx 10^{30}$ coeficientes o amplitudes de probabilidad donde está codificada la información. El punto importante es que el ordenador cuántico manipularía dichas amplitudes de probabilidad y éstas podrían interferir, produciéndose en el cálculo máximos y mínimos de probabilidad. La computación cuántica sería probabilista en un sentido distinto de los cálculos clásicos tipo Montecarlo, donde se introducen números aleatorios que son reales. A diferencia de estos últimos, todos los pasos en la Computación Cuántica serían deterministas, pero el resultado sería probabilista, como no puede ser de otra forma en Mecá-

nica Cuántica. El sentido de esta afirmación es el siguiente: la ecuación de Schrödinger es determinista, por dar la solución en un instante de tiempo t a partir de un dato inicial, pero su solución tiene una interpretación probabilista.

R.2. ESTADOS ENTRELAZADOS O ENREDADOS (*ENTANGLED STATES*)

R.2.1. Estados EPR (Einstein, Podolsky y Rosen) o de Bell

El entrelazamiento (*entanglement*) de estados, también conocido como enredo cuántico, es una propiedad genérica de los estados que representan sistemas compuestos en Mecánica Cuántica. Su importancia crucial ya fue puesta de manifiesto por Schrödinger (1935) y Einstein, Podolsky y Rosen (1935). Ampliaremos aquí la discusión de esta importante propiedad, que ya fue introducida en la sección 13.5. Utilizaremos los qubits para explicar dicho concepto. Si un qubit representa un sistema cuántico simple (es decir, no constituido por otros subsistemas más simples), es natural que un sistema de dos qubits, como el considerado en el apartado anterior, represente un sistema compuesto. Consideremos un cierto ket $|a\rangle$, que representa un estado del sistema compuesto, es decir, de los dos qubits. Supongamos que, por hipótesis, sea imposible que dicho ket se pueda factorizar como producto de otros dos kets $|1\rangle$ y $|2\rangle$, donde $|1\rangle$ representa un estado del primer qubit (sin ninguna referencia al segundo qubit) y $|2\rangle$ un estado del segundo qubit (sin ninguna referencia al primero). En tal caso, se dice que el estado $|a\rangle$ en cuestión está *entrelazado* o *enredado*. Véase el ejemplo del estado singlete en la sección 13.5.

Los dos qubits que contribuyen al estado entrelazado pueden ser, en principio, distinguibles o idénticos (indistinguibles) entre sí, en el sentido del capítulo 15 (sección 15.1). En los experimentos relacionados con el entrelazamiento, que trataremos en este apéndice, los dos qubits serán idénticos entre sí.

Ejemplos muy útiles e interesantes de estados entrelazados son los llamados estados EPR (de Einstein, Podolsky y Rosen), también conocidos como estados de Bell. Con objeto de introducirlos, continuamos considerando el sistema compuesto de los dos qubits tratados en el apartado R.1 de este apéndice. Los cuatro estados

$$\begin{aligned} |\Phi^+\rangle &= N(|00\rangle + |11\rangle), & |\Psi^+\rangle &= N(|01\rangle + |10\rangle), \\ |\Phi^-\rangle &= N(|00\rangle - |11\rangle), & |\Psi^-\rangle &= N(|01\rangle - |10\rangle), \end{aligned}$$

se denominan estados EPR o de Bell. N es el factor de normalización ($N^2 = 1/2$), de modo que todos los estados EPR están normalizados. Todos ellos son estados entrelazados. Ninguno de ellos puede reescribirse justamente como un producto de dos estados, uno para cada qubit. Ello es consecuencia del hecho de que cada uno es una suma de tales productos.

El entrelazamiento crea ciertas correlaciones (cuánticas) entre los estados de un qubit y los del otro: por ejemplo, entre $|0\rangle$ y $|1\rangle$ en $|01\rangle$ y entre $|1\rangle$ y $|0\rangle$ en $|10\rangle$. Discutiremos

más en detalle estas correlaciones en el subapartado R.4.1. Estas correlaciones cuánticas no sólo existen a distancias microscópicas, sino también en determinadas condiciones, a distancias macroscópicas. Por ejemplo, la persistencia del entrelazamiento cuántico ya estaba establecida experimentalmente en distancias del orden de 10 kilómetros en el año 1997.

R.2.2. Fotones entrelazados: estados de polarización y modos espaciales

Para su utilización en este apéndice, discutiremos brevemente los estados de polarización lineal para un fotón. En la sección 15.7 y en el ejercicio 15.6 se han estudiado los vectores complejos $\chi(\mathbf{q}\sigma)$, que representan estados con helicidad σ . Dichos estados $\chi(\mathbf{q}\sigma)$ con $\sigma = +1$ y -1 , se conocen en Óptica Electromagnética como estados de polarización circular dextrógira (a derechas) y levógira (a izquierdas). Pues bien, los dos estados de polarización lineal (l) para un fotón con \mathbf{q} dado se representan mediante los vectores reales $\chi_l(1) = -N(\chi(\mathbf{q} + 1) - \chi(\mathbf{q} - 1))$ y $\chi_l(2) = iN(\chi(\mathbf{q} + 1) + \chi(\mathbf{q} - 1))$: sus direcciones de polarización lineal son ortogonales entre sí.

Como un caso particular de la sección 15.8, un sistema de dos fotones, por ser éstos bosones, ha de representarse por funciones de onda simétricas en el intercambio simultáneo de todos los números cuánticos (momentos y helicidades o polarizaciones lineales) de ambos cuantos de luz.

Veamos otra descripción alternativa, más simple y que conecta con los contenidos de este apéndice. Supongamos que un fotón, al propagarse por el espacio, no lo hace libremente (como en la sección 15.7), sino constreñido parcialmente a una cierta región o dominio espacial de tamaño macroscópico (por ejemplo, propagándose a lo largo de una guía de ondas) o, al menos, suficientemente grande como para que haya compatibilidad con la imposibilidad de una localización exacta del fotón. En tal caso, sin emplear las funciones de onda dadas en [15.7.13] o [15.7.14], el fotón se representará por ciertas funciones (que no será necesario especificar) denominadas modos espaciales, multiplicadas por estados de polarización circular o lineal. Los modos espaciales representan la propagación del fotón en (y limitada a) un cierto dominio espacial. En tal caso, un sistema de dos fotones constreñidos espacialmente ha de representarse por funciones de onda simétricas en el intercambio simultáneo de los números cuánticos de los modos espaciales y de las helicidades (o polarizaciones lineales) de ambos. Para fijar las ideas, supongamos que un fotón constreñido espacialmente sólo puede tener dos modos espaciales, que representamos por: $|a\rangle_M$ y $|b\rangle_M$. En tal caso, al incluir los estados de polarización lineal, las posibles funciones de onda completas de ese fotón son:

$$|a\rangle_M \chi_l(1), \quad |a\rangle_M \chi_l(2), \quad |b\rangle_M \chi_l(1) \quad \text{y} \quad |b\rangle_M \chi_l(2)$$

Trataremos a continuación un sistema de dos fotones en el que cada fotón, por hipótesis, estará constreñido espacialmente como anteriormente, teniendo, por tanto, sólo los

dos modos espaciales: $|a\rangle_M$ y $|b\rangle_M$. El propósito es construir, en este caso sencillo, todas las posibles funciones de onda completas (incluyendo modos espaciales y estados de polarización lineal) y físicamente admisibles, es decir, simétricas. En los estados EPR emplearemos también M , para los estados de modos espaciales, y L , para los estados de polarización lineal.

Los posibles estados EPR para los modos espaciales de los dos fotones son:

$$\begin{aligned} |\Phi^+\rangle_M &= N(|a\rangle_M |a\rangle_M + |b\rangle_M |b\rangle_M), & |\Psi^+\rangle_M &= N(|a\rangle_M |b\rangle_M + |b\rangle_M |a\rangle_M), \\ |\Phi^-\rangle_M &= N(|a\rangle_M |a\rangle_M - |b\rangle_M |b\rangle_M), & |\Psi^-\rangle_M &= N(|a\rangle_M |b\rangle_M - |b\rangle_M |a\rangle_M) \end{aligned}$$

Los posibles estados EPR de polarización lineal de los dos fotones son:

$$\begin{aligned} |\Phi^+\rangle_L &= N(\chi_l(1)\chi_l(1) + \chi_l(2)\chi_l(2)), & |\Psi^+\rangle_L &= N(\chi_l(1)\chi_l(2) + \chi_l(2)\chi_l(1)), \\ |\Phi^-\rangle_L &= N(\chi_l(1)\chi_l(1) - \chi_l(2)\chi_l(2)), & |\Psi^-\rangle_L &= N(\chi_l(1)\chi_l(2) - \chi_l(2)\chi_l(1)). \end{aligned}$$

Nótese que, en la contribución $\chi_l(1)\chi_l(1)$ a $|\Phi^+\rangle_L$, $\chi_l(1)\chi_l(1)$ no están multiplicados escalarmente entre sí, sino yuxtapuestos, de modo que $|\Phi^+\rangle_L$ no es un número complejo, sino un estado. Y, análogamente, para todos los demás.

Efectuemos ahora intercambios de los correspondientes números cuánticos de los dos fotones en cada uno de los ocho estados EPR que acabamos de construir. Se tiene:

- i) $|\Phi^+\rangle_M$, $|\Psi^+\rangle_M$ y $|\Phi^-\rangle_M$ son simétricos en el intercambio de los números cuánticos de los modos espaciales.
- ii) $|\Phi^+\rangle_L$, $|\Psi^+\rangle_L$ y $|\Phi^-\rangle_L$ son simétricos en el intercambio de los números cuánticos de polarización lineal.
- iii) $|\Psi^-\rangle_M$ cambia de signo (es antisimétrico) en el intercambio de los números cuánticos de los modos espaciales.
- iv) $|\Psi^-\rangle_L$ cambia de signo (es antisimétrico) en el intercambio de los números cuánticos de polarización lineal.

Todas las posibles funciones de onda completas (incluyendo modos espaciales y estados de polarización lineal), que son simétricas en el intercambio simultáneo de los números cuánticos de los modos espaciales y de las polarizaciones lineales de los dos fotones, son los productos:

$$\begin{aligned} &|\Phi^+\rangle_M |\Phi^+\rangle_L, & |\Phi^+\rangle_M |\Psi^+\rangle_L, & |\Phi^+\rangle_M |\Phi^-\rangle_L, & |\Psi^+\rangle_M |\Phi^+\rangle_L, \\ &|\Psi^+\rangle_M |\Psi^+\rangle_L, & |\Psi^+\rangle_M |\Phi^-\rangle_L, & |\Phi^-\rangle_M |\Phi^+\rangle_L, & |\Phi^-\rangle_M |\Psi^+\rangle_L, \\ & & & & |\Phi^-\rangle_M |\Phi^-\rangle_L \quad \text{y} \quad |\Psi^-\rangle_M |\Psi^-\rangle_L \end{aligned}$$

Estos diez estados físicamente admisibles coinciden con los diez construidos esquemáticamente en Zeilinger et al. (1994).

A partir de aquí, en este apéndice, cuando tratemos uno y dos fotones ya no daremos las correspondientes funciones de onda completas (es decir, los modos espaciales multiplicados por los estados de polarización, como hemos hecho en este subapartado), sino que consideraremos solamente partes de esas funciones de onda completas, a saber, o bien sus modos espaciales, o bien sus estados de polarización. Procederemos así por simplicidad y porque será suficiente para ilustrar los aspectos más esenciales.

R.2.3. Fotones en un divisor de haces (*beam splitter*)

Recordemos primero que en un haz de luz clásica (por estar dentro del límite de validez de la descripción dada por la Óptica Clásica) no se pone de manifiesto el contenido en fotones.

Un resumen breve de lo que es y permite realizar un divisor o separador de haces (*beam splitter*) es el siguiente: es un dispositivo óptico que divide un haz de luz clásica que incide sobre él en dos haces, uno es el reflejado y otro el transmitido. Un *beam splitter* es un dispositivo óptico lineal pasivo, en el sentido de que actúa linealmente y siempre de la misma forma (que no depende de lo que incide). Matemáticamente, su actuación sobre el haz incidente puede describirse mediante una matriz unitaria. Un divisor de haces actúa sobre la parte de la onda que lleva la dependencia espacial (figura R.1). Estos dispositivos también se emplean frecuentemente para combinar dos haces incidentes en uno solo saliente, con tal de que en una de las caras de salida los dos haces interfieran destructivamente y en la otra cara constructivamente. Una lámina delgada de vidrio puede utilizarse como *beam splitter*. A menudo, los divisores de haces se construyen depositando, sobre un sustrato de vidrio, una capa delgada semitransparente de un material dieléctrico o metálico.

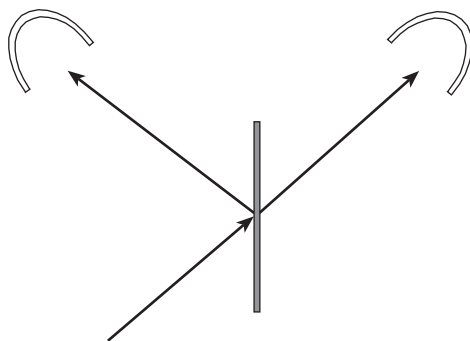


Figura R.1. *Beam splitter*. Un haz de luz clásica da lugar a un haz reflejado y, a la vez, a otro transmitido.

Asimismo, los divisores de haces tienen un papel importante en diversos experimentos de Física Cuántica que utilizan fotones. Ciertos fotones inciden sobre un *beam splitter*, emergen de él tras sufrir reflexiones y transmisiones y, a continuación, son detectados en detectores colocados adecuadamente. Un divisor de haces está caracterizado por una *reflectancia* (o coeficiente de reflexión) R y por una *transmitancia* (o coeficiente de transmisión) T , con $R + T = 1$. Para fotones en un divisor de haces, R y T constituyen, con los cambios adecuados, generalizaciones de los coeficientes estudiados en el capítulo 9 para partículas materiales microscópicas no-relativistas. Supondremos, por otra parte, que la probabilidad de que los fotones sean absorbidos por los *beam splitters* es despreciable. Se dice que un divisor de haces opera en el régimen 50%:50% si $R = T = 0.5$. Una discusión breve de diversos casos de detecciones de fotones en un divisor de haces será necesaria para entender los experimentos que han puesto de manifiesto la teleportación cuántica.

Supongamos que un fotón incide sobre una de las caras (denominadas también *puertos*) de un divisor de haces. Coloquemos sendos detectores a ambos lados (en ambos puertos) del divisor, con objeto de poner de manifiesto experimentalmente la posibilidad de que el fotón pueda ser reflejado o transmitido. En este caso, genuinamente cuántico, se observa experimentalmente un comportamiento cualitativamente diferente del observado con luz clásica, arriba comentado. Ahora, en cada repetición del experimento, sólo uno de los dos detectores señala la llegada a él de un fotón (es decir, hay reflexión o bien transmisión), pero la probabilidad conjunta de detectar fotones simultáneamente en ambos detectores (es decir, la probabilidad conjunta de reflexión y transmisión) es nula (figura R.2).

Supongamos que dos fotones (denotados por 1 y 2) inciden sobre un divisor de haces con las condiciones siguientes:

- i) Los dos fotones inciden sobre caras distintas (o sobre los dos puertos) del *beam splitter*: el fotón 1 sobre una cara o puerto y el 2 sobre la otra cara o puerto.
- ii) El fotón reflejado correspondiente al fotón incidente 1 se superpone al fotón transmitido originado por el fotón incidente 2, y recíprocamente.
- iii) El divisor de haces opera en el régimen 50%-50%.
- iv) La parte de la función de onda completa de los dos fotones incidentes afectada por el *beam splitter*, y sobre la que éste actúa, es simétrica.

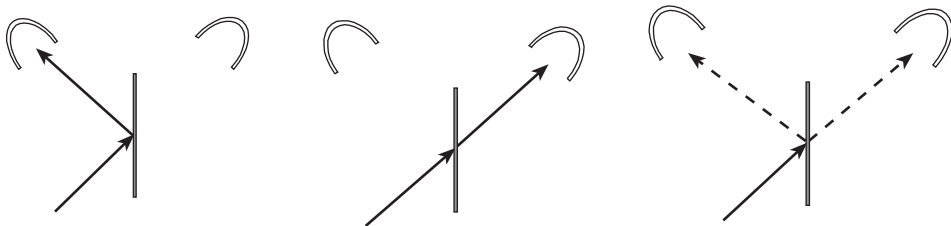


Figura R.2. *Beam splitter* en el caso cuántico. El fotón incidente se refleja, o bien se transmite. Es imposible que ambos detectores indiquen simultáneamente reflexión y transmisión (líneas punteadas).

Coloquemos sendos detectores en ambos puertos del divisor, con objeto de detectar experimentalmente fotones reflejados o transmitidos. En tal caso, la probabilidad conjunta de detectar fotones en ambos detectores simultáneamente o en coincidencia (es decir, la probabilidad conjunta de reflexión y transmisión) es nula. Lo que se detecta experimentalmente es que, en cada repetición del experimento, sólo uno de los dos detectores recibe la superposición de ambos fotones: unas veces lo hace el detector en un puerto y otras veces el del otro puerto (figura R.3). Para una discusión detallada, puede consultarse Hong et al. (1987) y las referencias citadas allí.

Como veremos en el subapartado R.4.2 de este apéndice, en el experimento que ha puesto de manifiesto la teleportación cuántica habrá también dos fotones incidiendo sobre un divisor de haces, pero la parte de su función de onda completa afectada por el *beam splitter* y sobre la que éste actúa será antisimétrica, así, habrá interferencia constructiva. La probabilidad conjunta de detectar fotones en ambos detectores en coincidencia será distinta de cero, y el resultado para la detección será cualitativamente distinto.

Hay una clase de divisores de haces que actúan directamente sobre los estados de polarización de los fotones. Supongamos un fotón linealmente polarizado: para fijar las ideas, puede estarlo según la horizontal o según la vertical. Un divisor de haces polarizante (*polarizing beam splitter*) es un dispositivo óptico que:

- a) Refleja un fotón incidente sobre él, si dicho fotón está polarizado según la horizontal, en tanto que
- b) Lo transmite si el fotón está polarizado según la vertical.

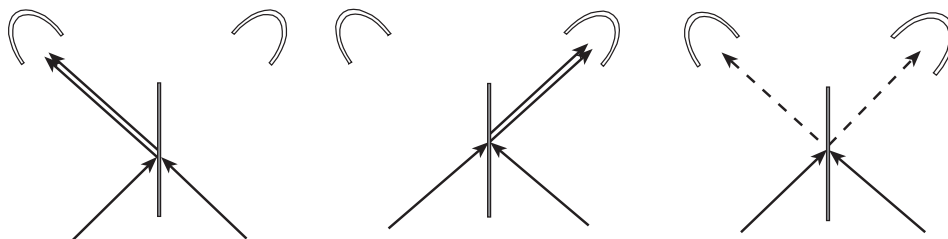


Figura R.3. *Beam splitter* en el caso cuántico. Hay dos fotones incidentes.

R.2.4. Generación experimental de estados entrelazados de dos fotones

Consideremos un cristal no-lineal (con una susceptibilidad no-lineal de tipo cuadrático, en el sentido de la Óptica No-Lineal, Agulló-López et al. (1994)), sobre el que incide un haz intenso y pulsado de radiación electromagnética (haz de bombeo) con frecuencias en el rango ultravioleta. Si se verifican ciertas condiciones (una orientación adecuada del cristal, acoplamiento adecuado de la polarización del haz incidente con la susceptibilidad no-lineal...), tiene lugar un fenómeno importante en el cristal no-lineal

para una pequeña fracción del conjunto de fotones contenidos en el haz de bombeo incidente. Dicho fenómeno, conocido como *conversión paramétrica*, consiste en que cada fotón, con frecuencia ω , de dicha fracción del haz de bombeo desaparece en el cristal no-lineal y genera dos fotones (debido a la susceptibilidad no-lineal cuadrática) con frecuencias ω_1 y ω_2 (véase, por ejemplo, Agulló-López et al., 1994). Para una frecuencia ω determinada, las frecuencias ω_1 y ω_2 toman un conjunto continuo de valores, con la restricción $\omega = \omega_1 + \omega_2$ (figura R.4).

La probabilidad de la conversión paramétrica es baja: para un cristal no-lineal suficientemente delgado, con unos pocos milímetros de espesor, dicha probabilidad es del orden de 10^{-6} , y el intervalo de tiempo requerido para que el fotón incidente genere un par de fotones está en el rango de los femtosegundos (fs, siendo $1 \text{ fs} = 10^{-12}$ segundos). Para un cristal no-lineal delgado, con el espesor indicado arriba, el número de pares de fotones generados mediante la conversión paramétrica puede ser del orden de 10^4 o 10^5 por segundo, en tanto que la atenuación en la intensidad del haz incidente, tras haber atravesado el cristal, es muy baja.

Para una frecuencia ω determinada, las parejas de fotones generados están entrelazadas en frecuencias (dado que $\omega = \omega_1 + \omega_2$) y, además, pueden estarlo en otros grados de libertad (momento o dirección de propagación, polarización). A partir del número total N , de pares de fotones generados mediante la conversión paramétrica, y mediante procedimientos ópticos adecuados, se realiza una selección de los *buenos* pares de fotones generados, con el entrelazamiento de interés, cuyo número es siempre bastante menor que N .

Una aplicación importante de la conversión paramétrica, realizada experimentalmente por Kwiat et al. (1995), ha permitido producir estados de dos fotones entrelazados en polarización. Resumiremos a continuación algunos aspectos específicos de su trabajo.

Por facilitar la comprensión del experimento, denominaremos *superficie cónica con espesor* a la figura geométrica contenida entre dos superficies cónicas con el mismo vértice y el mismo eje, y ángulos distintos en el vértice común.

Kwiat et al. (1995) utilizaron un cristal de BBO (beta-barium borate) de 3 mm de espesor y un láser de argón (de 150 mW) para producir el haz de bombeo. El cristal de BBO es birrefringente (es decir, tiene índices de refracción distintos para direcciones de propagación diferentes dentro del cristal). En la conversión paramétrica del experimento de Kwiat et al. (1995), y mediante lo que técnicamente se conoce como *ajuste de fases* (*phase matching*) de tipo II, la mitad de los fotones producidos se emiten formando una superfi-

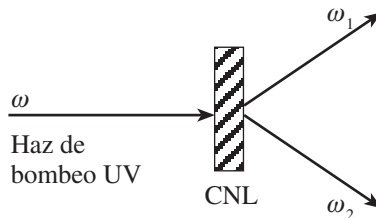


Figura R.4. Conversión paramétrica de un haz ultravioleta (UV) por un cristal no-lineal (CNL).

cie cónica con espesor, y la otra mitad lo hacen formando otra superficie cónica con espesor. Ambas superficies tienen, aproximadamente, el mismo vértice y ejes distintos y se cortan según dos *pinceles*, que forman un cierto ángulo entre sí (figura R.5). En cada proceso de conversión paramétrica, uno de los fotones generados está en una de esas superficies cónicas con espesor, y el segundo fotón generado, asociado al anterior, está en la otra superficie cónica con espesor, y se propaga en el cristal con una velocidad distinta a la del primero, debido a la birrefringencia del cristal.

Todos los fotones generados en una misma superficie cónica con espesor están en el mismo estado de polarización lineal (llamémosla la *horizontal* o extraordinaria). Todos los fotones generados en la otra superficie cónica con espesor están polarizados linealmente en la dirección ortogonal a la horizontal (es decir, en la vertical u ordinaria). Para más detalles, véase discusión en Kwiat et al. Los dos *pinceles* a lo largo de los cuales se cortan las dos superficies cónicas con espesor proporcionan las dos direcciones de propagación privilegiadas (o los momentos) de los «buenos» pares de fotones generados de interés, que son así seleccionados. Si la dirección de propagación de uno de los fotones generados es la de uno de esos dos *pinceles*, la del otro fotón generado, asociado al anterior, es la del otro *pincel*: la polarización lineal de cada uno de esos dos fotones (pudiendo provenir de cualquiera de las dos superficies) puede ser horizontal o vertical. Por esa razón, ambos fotones están en un estado entrelazado por lo que a sus polarizaciones se refiere. Para dichos fotones, ω_1 es, en principio, distinto de ω_2 . El conjunto de todos los posibles estados de polarización lineal de cada uno de esos dos fotones puede ser asemejado a un simple qubit. El conjunto de todos los posibles estados de polarización lineal para los dos fotones es, por tanto, un sistema de dos qubits.

Utilizando filtros adecuados (y también, cuando ello es posible, la geometría del cristal no-lineal), se seleccionan parejas de fotones generados por la conversión paramétrica de tipo II y entrelazados en polarización, siendo, además, $\omega_1 = \omega_2 = \omega/2$. Se dice entonces que los pares de fotones entrelazados están degenerados. Por ejemplo, la longitud de onda correspondiente a $\omega/2$ puede estar entre 700 nanómetros y 800 nanómetros. Esta degeneración se da habitualmente para los estados de dos fotones entrelazados empleados en la teleportación cuántica.

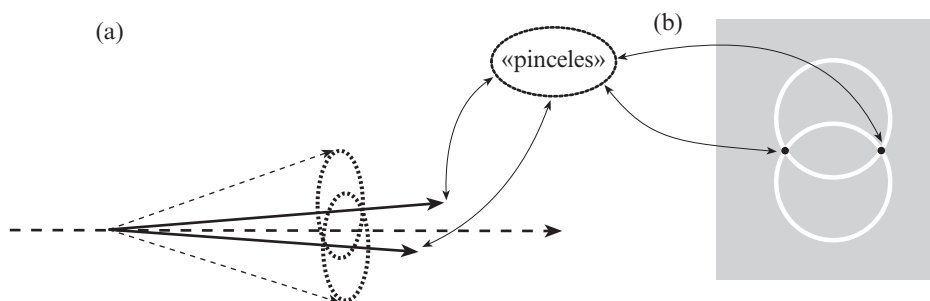


Figura R.5. (a) Fotones generados mediante *phase matching* tipo II. (b) Vista frontal. No se representan los ejes de las dos superficies cónicas con espesor. La intersección de dichas superficies, dando lugar a los dos *pinceles*, sí se representa.

Mediante un dispositivo óptico adecuado, se consigue que el estado entrelazado formado por los estados de polarización lineal de los dos fotones con $\omega/2$ (que resultan tras una conversión paramétrica degenerada y se propagan según los dos pinceles de intersección de las dos superficies cónicas con espesor) sea siempre de tipo $|\Psi^+\rangle_L$, o bien siempre de tipo $|\Psi^-\rangle_L$, que son dos de los estados EPR. Conectando con lo comentado en otras partes de este libro (sección 6.9 y apartado F.7, en el apéndice F), si se dan las condiciones para que el dispositivo óptico adecuado dé lugar a $|\Psi^-\rangle_L$, lo que ocurre es que todos los pares de fotones generados y entrelazados, que han sido seleccionados según se indicó arriba, constituyen copias idénticas de dicho estado cuántico $|\Psi^-\rangle_L$.

Como indican Kwiat et al., si se coloca algún dispositivo óptico adecuado en el camino de uno de los dos fotones, es posible transformar uno de los estados de polarización lineal en otro polarizado linealmente en la dirección ortogonal, con lo que ambos fotones en el par entrelazado pasarán a estar en estados de polarización lineal según la misma dirección («horizontal» o «vertical»). Así, es posible producir los otros dos estados EPR, es decir, de tipo $|\Phi^+\rangle_L$ o de tipo $|\Phi^-\rangle_L$.

R.3. PUERTAS LÓGICAS CUÁNTICAS

Un ordenador clásico está formado por conductores, que transportan los bits, y puertas lógicas, que están formadas a partir de semiconductores. Las puertas lógicas son dispositivos que permiten, dados unos datos iniciales (*input*), realizar con ellos las operaciones apropiadas encaminadas a obtener unos resultados (*output*). Utilizando las puertas lógicas, se implementan los algoritmos que permiten llevar a cabo el cálculo deseado. Los semiconductores proporcionan los dispositivos físicos llamados *transistores*, que permiten construir las puertas lógicas *clásicas*.

R.3.1. Puertas lógicas clásicas

La puerta lógica clásica de un solo bit más sencilla es la NO (*NOT-gate*). Si llamamos a_i al bit entrante (*input*) en la puerta y b_f al bit saliente (*output*), la correspondencia que da el *output* para cada *input* (*tabla de verdad* de la puerta NO) es

a_i	b_f
0	1
1	0

La actuación de la puerta NO también se suele representar así: $b_f = \bar{a}_i$. De esta notación se hará uso en lo que sigue.

Otras puertas actúan sobre dos bits de input, a_i y b_i . Las puertas lógicas más importantes de dos bits son: AND ($c_f = a_i \cdot b_i$), OR ($c_f = a_i + b_i$), XOR ($c_f = a_i \oplus b_i$), NAND ($c_f = \overline{a_i \cdot b_i}$) y NOR ($c_f = \overline{a_i + b_i}$). Sus tablas de verdad son, respectivamente:

a_i	b_i	$a_i \cdot b_i$	$a_i + b_i$	$a_i \oplus b_i$	$\overline{a_i \cdot b_i}$	$\overline{a_i + b_i}$
0	0	0	0	0	1	1
1	0	0	1	1	1	0
0	1	0	1	1	1	0
1	1	1	1	0	0	0

La puerta clásica NAND es también conocida como la *puerta universal*, porque se puede demostrar que es posible expresar cualquier función de bits en términos de combinaciones de dicha puerta (Nielsen y Chuang, 2001).

R.3.2. Puertas lógicas cuánticas

Las puertas lógicas cuánticas deben actuar, en analogía con las clásicas, sobre los qubits. Así, por ejemplo, la puerta cuántica NO deberá intercambiar los qubits $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$ y de manera general su actuación sobre una superposición será $\alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle \rightarrow \alpha_0|1\rangle + \alpha_1|0\rangle$. Una forma conveniente de representar esta puerta es la matriz unitaria $X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, que actúa sobre los qubits representados como vectores columna

de dos componentes $\alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix}$. La matriz unitaria X que, como se ha dicho, representa la puerta cuántica NO, es, de hecho, la matriz σ_x de Pauli.

Todas las puertas lógicas cuánticas se representan por matrices unitarias para preservar la norma del qubit. Puede comprobarse, como ejercicio, que las matrices que se dan a continuación representando puertas lógicas cuánticas también lo son.

Otras puertas de un qubit de utilidad en Información Cuántica son la puerta Hadamard (H), la puerta fase (S) y la puerta $\pi/8$ (T), que se representan así:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad ; \quad S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \quad ; \quad T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i\pi/4) \end{pmatrix}$$

Pasemos a continuación a discutir las puertas lógicas cuánticas de más de un qubit. La puerta lógica cuántica de dos qubits más importante es la CNOT (*controlled-NOT*). Es una puerta que tiene como *input* dos qubits llamados *control* y *target*, respectivamente,

y como *output*, otros dos qubits (que se denotan por la misma notación que para el *input*). Su acción, muy brevemente, es la siguiente: i) el qubit *control* no cambia bajo la acción de esta puerta, y ii) el qubit *target* cambia en función del valor que tome el qubit *control*. Si éste es $|0\rangle$, entonces el qubit *target* permanece inalterado; por el contrario, si el qubit *control* es $|1\rangle$, entonces el qubit *target* se transforma mediante la acción de la puerta cuántica NO.

En ecuaciones:

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle, |01\rangle \rightarrow |01\rangle, |10\rangle \rightarrow |11\rangle, |11\rangle \rightarrow |10\rangle$$

En forma matricial, la puerta CNOT se representa mediante:

$$CN = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Su actuación, trasladando al caso cuántico la notación previamente introducida para las puertas lógicas clásicas, puede escribirse así: $|a_i b_i\rangle \rightarrow |a_i a_i \oplus b_i\rangle$. Como en el caso de las puertas cuánticas de un solo qubit, las de múltiples qubits también están representadas por matrices unitarias, como puede verse fácilmente: $(CN)^+ CN = I$.

Una diferencia sustancial entre las puertas cuánticas y las clásicas es la *irreversibilidad*. Por ejemplo, la puerta clásica XOR es irreversible, pues, conocido el *output* $a_i \oplus b_i$, no es posible determinar los *inputs*. Por el contrario, las puertas cuánticas son siempre reversibles, como es fácil comprender a partir de la unitariedad de la matriz que las representa.

Existen, por supuesto, otras puertas cuánticas de dos y más qubits, pero la puerta CNOT es particularmente interesante porque puede demostrarse (Nielsen y Chuang, 2001) que cualquier puerta cuántica de múltiples qubits puede reproducirse como la composición de puertas CNOT y de puertas de un solo qubit.

R.3.3. El teorema de no-clonación

Otra propiedad fundamental de la Información Cuántica que puede ilustrarse con la puerta CNOT es el llamado teorema de *no-clonación* (Wootters y Zurek, 1982): es imposible realizar una copia idéntica de un estado cuántico desconocido.

Veamos que es ciertamente posible realizar una copia clásica idéntica de un bit desconocido, x . Una forma de hacerlo es utilizar lo que podríamos llamar una puerta CNOT clásica, que actúa sobre dos bits: uno es el que se quiere copiar, x , y el otro es un bit auxiliar que inicialmente se toma como cero, $y = 0$. El *output* de la puerta está formado por el bit x y por el bit $y \oplus x = x$. De este modo, hemos conseguido duplicar trivialmente el bit arbitrario x .

Intentemos reproducir el resultado anterior en el caso cuántico. Supongamos que pretendemos copiar, mediante un procedimiento similar y usando una puerta CNOT cuántica, el estado $|\Psi\rangle = \alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle$, en el que las amplitudes α_0 y α_1 son desconocidas. $|\Psi\rangle$ actuará como qubit *control*. El qubit *target* se toma inicialmente como $|0\rangle$. El estado *input* de los dos qubits mencionados será

$$|\Psi\rangle|0\rangle = (\alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle)|0\rangle = \alpha_0|00\rangle + \alpha_1|10\rangle$$

La acción de la puerta cuántica CNOT consiste en negar el qubit *target* cuando el qubit *control* sea 1. Por tanto, la transformación es

$$|\Psi\rangle|0\rangle \rightarrow \alpha_0|00\rangle + \alpha_1|11\rangle$$

Evidentemente, éste no puede coincidir nunca con el estado

$$|\Psi\rangle|\Psi\rangle = \alpha_0^2|00\rangle + \alpha_0\alpha_1|01\rangle + \alpha_1\alpha_0|10\rangle + \alpha_1^2|11\rangle$$

Este ejemplo ilustra la imposibilidad de hacer una copia idéntica de un estado cuántico desconocido, lo que constituye el teorema de no-clonación.

R.3.4. Puertas lógicas cuánticas experimentales

Existen varias propuestas de realización experimental de ordenadores cuánticos. Las características principales que éstos deben cumplir son:

- i) Emplear estados cuánticos que representen la información de manera robusta, lo que lleva a tiempos de coherencia grandes comparados con los tiempos de cálculo.
- ii) Factibilidad de puertas lógicas cuánticas, en particular de la puerta CNOT.
- iii) Fiabilidad en la preparación del estado inicial *input* y en la medida del resultado *output*.

El primer sistema propuesto (Cirac y Zoller, 1994) para construir una puerta lógica cuántica es el de iones fríos en una *trampa para iones*. En este tipo de dispositivos (denominados de Paul), un campo eléctrico cuadrupolar no estacionario ejerce, sobre un único ión, una fuerza restauradora en cualquier dirección de movimiento, confinándolo. Además, es posible, utilizando campos electrostáticos adicionales, atrapar varios iones en una *trampa lineal*. Más aún, mediante un haz de luz láser de frecuencia ligeramente menor que las correspondientes a las transiciones ópticas del ión, es posible enfriarlo reduciendo su energía cinética. Dichas técnicas fueron empleadas por primera vez por Monroe et al. (1995) siguiendo la propuesta de Cirac y Zoller (1994) para realizar experimentalmente

una puerta CNOT con un único ión atrapado ${}^9\text{Be}^+$. Los dos qubits (*control* y *target*) del *input* son los siguientes. El qubit *target* estaba formado por los dos niveles hiperfinos $|\uparrow\rangle = |F=2, m_F=2\rangle$ y $|\downarrow\rangle = |F=1, m_F=1\rangle$ del estado fundamental electrónico ${}^2S_{1/2}$. El símbolo F representa el espín total (composición de los espines electrónico y nuclear) y m_F es la componente de dicho espín total en la dirección de un campo magnético externo aplicado. La separación entre los dos niveles es $\omega_0/2\pi \approx 1.250$ GHz. Por otra parte, el qubit *control* está formado por los dos primeros estados vibracionales del ión atrapado ($|0\rangle$ y $|1\rangle$), separados (en frecuencia) por $\omega_x/2\pi \approx 11$ MHz. Los estados de los dos qubits y los correspondientes niveles de energía relevantes se muestran en la figura R.6.

La manipulación de las transiciones entre los cuatro estados de los dos qubits se realiza mediante un par de haces de láser no-resonantes con el ión, que provocan transiciones Raman estimuladas entre los niveles. Recuerdese que el efecto Raman ha sido descrito en las secciones 24.2 y 28.3. Cuando la diferencia de frecuencias δ de los haces láser se sitúa cerca de $\delta \approx \omega_0$, se estimulan transiciones entre los niveles hiperfinos ($|\uparrow\rangle \leftrightarrow |\downarrow\rangle$) sin modificarse los niveles vibracionales. Cuando $\delta \approx \omega_0 - \omega_x$, la transición estimulada es $|0\rangle|\uparrow\rangle \leftrightarrow |1\rangle|\downarrow\rangle$, y cuando $\delta \approx \omega_0 + \omega_x$, resulta $|1\rangle|\uparrow\rangle \leftrightarrow |0\rangle|\downarrow\rangle$.

La aplicación de los haces láser por medio de una serie de pulsos adecuados (véase Monroe et al., 1995) permite realizar la puerta cuántica CNOT.

Para la transición $|0\rangle|\uparrow\rangle \leftrightarrow |0\rangle|\downarrow\rangle$, los efectos de los pulsos se cancelan y el estado final del ión es el mismo que el inicial, sea éste $|0\rangle|\uparrow\rangle$ o $|0\rangle|\downarrow\rangle$. Por el contrario, para la transición $|1\rangle|\uparrow\rangle \leftrightarrow |1\rangle|\downarrow\rangle$, los efectos de los pulsos aplicados producen las transformaciones $|1\rangle|\uparrow\rangle \rightarrow |1\rangle|\downarrow\rangle$ y $|1\rangle|\downarrow\rangle \rightarrow |1\rangle|\uparrow\rangle$.

Por tanto, la tabla de verdad es

<i>Input</i>	\rightarrow	<i>Output</i>
$ 0\rangle \downarrow\rangle$	\rightarrow	$ 0\rangle \downarrow\rangle$
$ 0\rangle \uparrow\rangle$	\rightarrow	$ 0\rangle \uparrow\rangle$
$ 1\rangle \downarrow\rangle$	\rightarrow	$ 1\rangle \uparrow\rangle$
$ 1\rangle \uparrow\rangle$	\rightarrow	$ 1\rangle \downarrow\rangle$

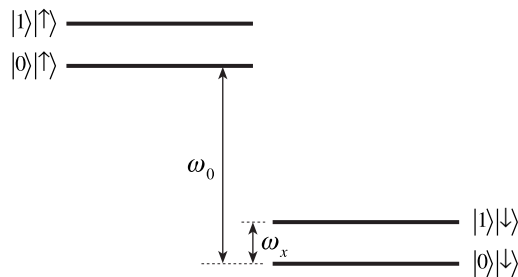


Figura R.6. Esquema de niveles de energía del ${}^9\text{Be}^+$.

Una realización experimental de la puerta lógica cuántica CNOT, utilizando fotones, puede verse en Okamoto et al. (2005).

R.4. TELEPORTACIÓN CUÁNTICA

En el apartado anterior hemos visto que las leyes de la Mecánica Cuántica no permiten la clonación de un estado cuántico desconocido. Sin embargo, y como veremos en el presente apartado, las correlaciones cuánticas (concretamente el entrelazamiento cuántico) permiten transmitir un estado cuántico desconocido desde un emisor hasta un receptor. Esa transferencia de información no puede ser instantánea y tiene lugar sin que el emisor conozca el contenido del mensaje, es decir, el estado transmitido. La transmisión tendrá una parte no-clásica (por medio del entrelazamiento cuántico) y otra clásica.

R.4.1. La propuesta teórica de la teleportación

La posibilidad de este curioso fenómeno fue propuesta por Bennett et al. (1993).

Consideremos dos observadores A («Alice») y B («Bob»). Supondremos que es posible crear un sistema compuesto formado por dos qubits, denominados 2 y 3, con las condiciones siguientes:

- i) A puede actuar sobre el qubit 2, cuyos estados son superposiciones lineales de dos estados $|0_2\rangle$ y $|1_2\rangle$, ortonormales entre sí.
- ii) B puede actuar sobre el qubit 3, cuyos estados son superposiciones lineales de dos estados $|0_3\rangle$ y $|1_3\rangle$, también ortonormales entre sí.
- iii) A no puede actuar sobre el qubit 3 (el de B) y, recíprocamente, B no puede actuar sobre el qubit 2 (el de A).

Aceptaremos que es posible crear uno o varios estados entrelazados EPR del sistema de los dos qubits 2 y 3. Por ello, decimos que dichos estados entrelazados EPR están «compartidos» entre A y B .

Para fijar las ideas, supondremos que A y B «comparten» el estado EPR

$$N(|0_2\rangle|1_3\rangle - |1_2\rangle|0_3\rangle) = |\Psi_{23}^-\rangle$$

donde hemos empleado la notación $|0_2\rangle|1_3\rangle$ en vez de $|0_21_3\rangle$ (empleada en otros apartados de este apéndice). Así, A puede actuar sobre el estado $|0_2\rangle$ (del qubit 2) en el estado global $|0_2\rangle|1_3\rangle$ y sobre el estado $|1_2\rangle$ (también del qubit 2) en el segundo estado global $|1_2\rangle|0_3\rangle$, y análogamente para la acción de B .

Por otra parte, A tiene la posibilidad de enviar mensajes *clásicos* a B . Dichos mensajes clásicos pueden ser transmitidos, copiados y almacenados por medio de diversos fenóme-

nos y dispositivos bien conocidos y controlados en Física Clásica. En particular, la transmisión de los mensajes clásicos satisface una restricción fundamental: no puede realizarse a velocidades superiores a la de la luz.

Supondremos que, en la actualidad, A y B están separados entre sí por una distancia macroscópica, y que A quiere enviar a B un estado cuántico $|\varphi_1\rangle = a|0_1\rangle + b|1_1\rangle$ correspondiente a un tercer qubit (denominado 1). a y b son amplitudes (de probabilidad) complejas, de modo que $|\varphi_1\rangle$ está normalizado. Este nuevo qubit 1 es distinto de los qubits 2 y 3 asociados a A y B . Así, $|\varphi_1\rangle$ no debe confundirse con ninguno de los estados individuales contenidos en el estado EPR $|\Psi_{23}^-\rangle$. Supondremos que A también puede actuar sobre el qubit 1, efectuando medidas en $|\varphi_1\rangle$, pero si lo hiciera, alteraría este último, pues tras la medida 1 pasaría a estar representado por otro estado (apartado G.1 del apéndice G). Dicho de otro modo, A no tiene medio de conocer el estado $|\varphi_1\rangle$ sin destruirlo: la medida destruiría el estado. Por tanto, A desconoce ambas amplitudes complejas a y b . A no conocerá el estado $|\varphi_1\rangle$ en ningún momento del proceso que se describe a continuación.

Con objeto de que el estado $|\varphi_1\rangle$ pueda ser transmitido desde A hasta B , se lleva a cabo el conjunto de las operaciones sucesivas siguientes:

- i) A combina el estado $|\varphi_1\rangle$ con el estado EPR «compartido» $|\Psi_{23}^-\rangle$, donde $|\Psi_{23}^-\rangle$ no contiene ninguna información acerca del estado $|\varphi_1\rangle$. No hay ninguna correlación, ni clásica ni cuántica, entre $|\Psi_{23}^-\rangle$ y $|\varphi_1\rangle$, pues ambos estados los representan sistemas independientes entre sí. Por todo ello el sistema total, constituido por el qubit 1 y los dos qubits (el 2 y el 3) asociados a A y a B , solamente puede estar representado por el estado global producto:

$$|G\rangle = |\varphi_1\rangle N(|0_2\rangle|1_3\rangle - |1_2\rangle|0_3\rangle)$$

Dicho estado se puede reescribir así:

$$|G\rangle = aN|0_1\rangle(|0_2\rangle|1_3\rangle - |1_2\rangle|0_3\rangle) + bN|1_1\rangle(|0_2\rangle|1_3\rangle - |1_2\rangle|0_3\rangle)$$

Dejemos aparte, por un momento, los dos estados $|0_3\rangle$ y $|1_3\rangle$. Consideremos los dos qubits asociados a 1 y a 2 (asociado a A) y formemos los cuatro estados entrelazados EPR correspondientes

$$\begin{aligned} |\Phi_{12}^+\rangle &= N(|0_1\rangle|0_2\rangle + |1_1\rangle|1_2\rangle), & |\Psi_{12}^+\rangle &= N(|0_1\rangle|1_2\rangle + |1_1\rangle|0_2\rangle), \\ |\Phi_{12}^-\rangle &= N(|0_1\rangle|0_2\rangle - |1_1\rangle|1_2\rangle), & |\Psi_{12}^-\rangle &= N(|0_1\rangle|1_2\rangle - |1_1\rangle|0_2\rangle) \end{aligned}$$

Estos cuatro estados constituyen una base ortonormal completa para el sub-sistema formado por 1 y 2.

A continuación, expresamos cada uno de los cuatro estados producto (no entrelazados) $|0_1\rangle|0_2\rangle$, $|0_1\rangle|1_2\rangle$, $|1_1\rangle|0_2\rangle$ y $|1_1\rangle|1_2\rangle$, que aparecen en $|G\rangle$, en términos de los cuatro estados entrelazados $|\Psi_{12}^+\rangle$, $|\Phi_{12}^+\rangle$, $|\Phi_{12}^-\rangle$ y $|\Psi_{12}^-\rangle$. Tras sustituir y operar, se obtiene:

$$|G\rangle = \frac{1}{2} [|\Phi_{12}^+\rangle(a|1_3\rangle - b|0_3\rangle) + |\Phi_{12}^-\rangle(a|1_3\rangle + b|0_3\rangle) + |\Psi_{12}^+\rangle(-a|0_3\rangle + b|1_3\rangle) + |\Psi_{12}^-\rangle(-a|0_3\rangle - b|1_3\rangle)] \quad [\text{R.1}]$$

- ii) *A* realiza una medición, en dicho estado producto $|G\rangle$, del subsistema conjunto formado por 1 y 2. Tras esa medición, $|\varphi_1\rangle$ desaparece y, según sea el resultado de aquélla, el subsistema conjunto pasa a estar representado necesariamente por uno de los cuatro estados anteriores. Como consecuencia, para cada posible resultado de esa medición, el estado que representa al qubit 3 de *B* está necesariamente determinado, como resultado de la reducción de la función de onda (véase el apartado G.1, en el apéndice G). En detalle, si como resultado de la medición conjunta en 1 y 2, este subsistema pasa al estado $|\Phi_{12}^+\rangle$, entonces el qubit de *B* está representado por $a|1_3\rangle - b|0_3\rangle$. Si, tras la medición, 1 y 2 quedan en el estado $|\Phi_{12}^-\rangle$, entonces a *B* le corresponde $a|1_3\rangle + b|0_3\rangle$. Y, análogamente, si 1 y 2 quedan representados al final de la medición por $|\Psi_{12}^+\rangle$ o $|\Psi_{12}^-\rangle$, entonces el qubit de *B* queda representado por $-a|0_3\rangle + b|1_3\rangle$ o $-a|0_3\rangle - b|1_3\rangle$, respectivamente. Nótese que los cuatro estados representando qubits para *B* (y, por tanto, los resultados de las cuatro mediciones conjuntas posibles) tienen la misma probabilidad, es decir, 1/4.

Puede decirse que en cada posible estado y, sobre todo, después de esa medición conjunta, el qubit 1 queda «acoplado» a los qubits 2 y 3.

Es muy importante darse cuenta de que cualquiera de los cuatro posibles estados resultantes para el qubit de *B*, es decir, $a|1_3\rangle - b|0_3\rangle$, $a|1_3\rangle + b|0_3\rangle$, $-a|0_3\rangle + b|1_3\rangle$ y $-a|0_3\rangle - b|1_3\rangle$ está relacionado de una manera muy simple con $|\varphi_1\rangle$. En efecto, $-a|0_3\rangle - b|1_3\rangle \equiv |\varphi_3^T\rangle$ contiene las mismas amplitudes (de probabilidad) que $|\varphi_1\rangle$, salvo por un cambio de signo global. Los estados $a|1_3\rangle - b|0_3\rangle$, $a|1_3\rangle + b|0_3\rangle$ y $-a|0_3\rangle - b|1_3\rangle$ se obtienen a partir de $a|0_3\rangle + b|1_3\rangle$ (que tiene los mismos coeficientes que $|\varphi_1\rangle$) mediante determinadas operaciones. Un nivel de conocimientos que excede el proporcionado por el presente libro de Física Cuántica (es decir, que requiere la Mecánica Cuántica) muestra que esas transformaciones son rotaciones de 180° en torno a los ejes *y*, *x* y *z*, respectivamente. Por tanto, los cuatro posibles estados resultantes para *B* contienen la misma información que $|\varphi_1\rangle$.

- iii) *A*, tras conocer cuál de los cuatro estados representa su qubit (el 2) y el asociado a 1 como resultado de su medición conjunta, envía un mensaje clásico (codificado por dos bits) a *B*, comunicándoselo.
- iv) *B*, tras recibir ese mensaje de *A*, sabe qué operaciones puede efectuar sobre su estado para obtener una copia de $|\varphi_1\rangle$. Si el estado del qubit de *B* es $-a|0_3\rangle -$

$-b|1_3\rangle \equiv |\varphi_3^T\rangle$, éste contiene los mismos coeficientes que $|\varphi_1\rangle$, salvo por un cambio de signo global. Si los estados del qubit de B son $a|1_3\rangle - b|0_3\rangle$ o $a|1_3\rangle + b|0_3\rangle$ o $-a|0_3\rangle + b|1_3\rangle$, B puede reconstruir $a|0_3\rangle + b|1_3\rangle$ (que tiene los mismos coeficientes que $|\varphi_1\rangle$ y que representamos también por $|\varphi_3^T\rangle$) mediante rotaciones de 180° en torno a los ejes y , x o z , respectivamente (figura R.7).

El resultado neto de esta transmisión (idealizada) es que el estado $|\varphi_1\rangle$ del qubit 1, que A tenía, ha sido destruido y B , al cabo de un cierto tiempo, tiene (o reconstruye, tras una rotación adecuada) una copia $|\varphi_3^T\rangle$ de $|\varphi_1\rangle$ en su propio qubit 3.

Este procedimiento posible de transmisión se conoce como *teleportación cuántica*, la cual ha empleado las correlaciones cuánticas a larga distancia, implicadas por el entrelazamiento cuántico, y un mensaje clásico.

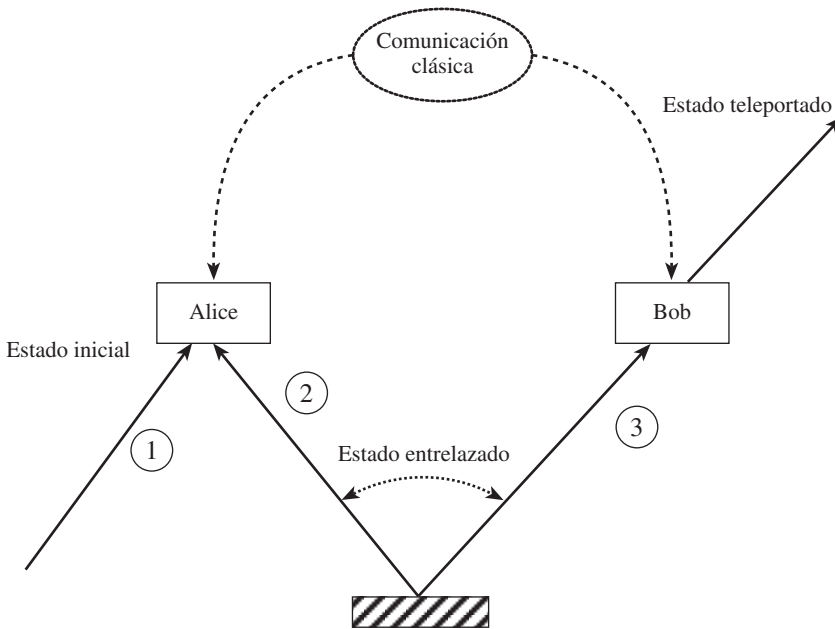


Figura R.7. Teleportación cuántica: propuesta teórica.

R.4.2. Realización experimental de la teleportación cuántica

La propuesta teórica de la teleportación fue realizada experimentalmente, al menos de forma parcial, por Bouwmeester et al. (1997) utilizando pares de fotones entrelazados en polarización. Dicho experimento, que discutiremos en este subapartado, llevó a cabo la teleportación del estado $|\varphi_1\rangle$.

Tal como se describió en el subapartado R.2.4 de este apéndice, cada vez que un haz de bombeo de radiación ultravioleta de elevada intensidad incide sobre un medio (cristal) no-lineal y lo atraviesa, y bajo ciertas condiciones mencionadas allí, una pequeña fracción de los fotones de dicho haz genera, mediante conversión paramétrica, pares de fotones entrelazados. Imponiendo condiciones adicionales y utilizando dispositivos ópticos adecuados, se seleccionan pares de fotones generados. Éstos tienen direcciones de propagación concretas y netamente diferenciadas entre sí (por ejemplo, asociadas a los dos pinceles que resultan de las intersecciones de las dos superficies cónicas con espesor, discutidas en dicho subapartado), iguales frecuencias y entrelazados en estados de polarización lineal. Estos fotones generados y seleccionados así son aquellos a los que nos referiremos en este subapartado.

En el experimento de Bouwmeester et al. (1997), el cristal es suficientemente delgado (con un espesor de unos pocos milímetros), de modo que la atenuación en la intensidad del haz pulsado de bombeo, tras haber atravesado el cristal, es muy baja. Dicho haz atraviesa dos veces, en condiciones distintas que se describen a continuación, el mismo cristal no-lineal delgado, produciéndose dos procesos sucesivos de conversión paramétrica.

Primera conversión paramétrica. Al ser atravesado el medio no-lineal por el pulso de bombeo la primera vez (primera conversión paramétrica) los pares de fotones generados y seleccionados constituyen, experimentalmente, copias aproximadamente idénticas de estados entrelazados en polarizaciones lineales. Como se comentó al final del subapartado R.2.2, nos referiremos en cada caso no a las funciones de onda completas de los pares de fotones, sino sólo a la parte adecuada (modos espaciales o de polarización lineal) de aquéllas. En el experimento de Bouwmeester et al. (1997) se produjo un estado entrelazado en polarizaciones lineales que fue una aproximación adecuada a un estado EPR $|\Psi^-\rangle$. Éste desempeñará el papel del estado $|\Psi_{23}^-\rangle$ que comparten A y B en la propuesta teórica de Bennett et al. (1993). El fotón de cada par generado y seleccionado que sale en una dirección concreta, de las dos seleccionadas experimentalmente, está asociado al qubit 2, por convenio. El otro fotón del mismo par generado y seleccionado, propagándose en la otra dirección concreta, está asociado al qubit 3. A su vez, los dos qubits 2 y 3 están asociados por convenio a A y a B , respectivamente.

Segunda conversión paramétrica. Supondremos a continuación que el mismo haz de bombeo, tras haber salido del cristal no-lineal, es reflejado hacia atrás por un espejo retroreflector (ERR) y vuelve a atravesar el mismo cristal no-lineal una segunda vez. Tiene lugar entonces una segunda conversión paramétrica que, como en la primera, genera y lleva a seleccionar nuevos pares de fotones. Estos últimos se propagan en otras direcciones concretas (diferentes de las de los pares seleccionados en la primera conversión paramétrica) y son, por su parte, copias aproximadamente idénticas de otro estado EPR aproximado, entrelazado también en polarizaciones lineales. El estado EPR producido en la segunda conversión paramétrica es distinto e independiente del generado en la primera. El fotón de cada par en la segunda conversión paramétrica, que se propaga en una cierta dirección, está asociado al qubit 1: dicho fotón se prepara experimentalmente en el estado $|\varphi_1\rangle = a|0_1\rangle + b|1_1\rangle$ y representa el estado a teleportar cuánticamente. Esta preparación se

lleva a cabo mediante un polarizador, que selecciona un cierto estado de polarización lineal (figura R.8). El otro fotón (denotado como 4) de cada par generado en esta segunda conversión paramétrica no tiene ningún papel directo en la teleportación cuántica, pero, por estar entrelazado con el asociado al qubit 1, su detección proporciona información adicional muy útil. El papel desempeñado por el fotón 4 se conoce como *trigger*. En efecto, si el fotón 4 se detecta (en el detector p), entonces el otro fotón, asociado al qubit 1, ha sido emitido necesariamente y está en camino para llevar a cabo la teleportación. Comentaremos más adelante otro interés específico del fotón 4 y de su detección en p (figura R.8).

Es importante que los fotones asociados al qubit 2 (es decir, a A) sean indistinguibles de los asociados a 1. A tal fin, los fotones correspondientes a ambos qubits 1 y 2, al propagarse, inciden sobre un mismo divisor de haces. Los fotones asociados a 2 inciden sobre una cara (un *puerto*) del *beam splitter* BS, y los asociados a 1 sobre la otra cara (el otro puerto). Así pues, los fotones correspondientes a ambos qubits 1 y 2 se superponen en el divisor de haces BS.

Con objeto de conseguir esa indistinguibilidad, han de cumplirse también las condiciones que se discuten a continuación. El haz pulsado de bombeo tiene una cierta duración temporal. Cada uno de los dos procesos sucesivos de conversión paramétrica dura un cierto tiempo, lo cual se traduce en que los paquetes que representan los fotones asociados

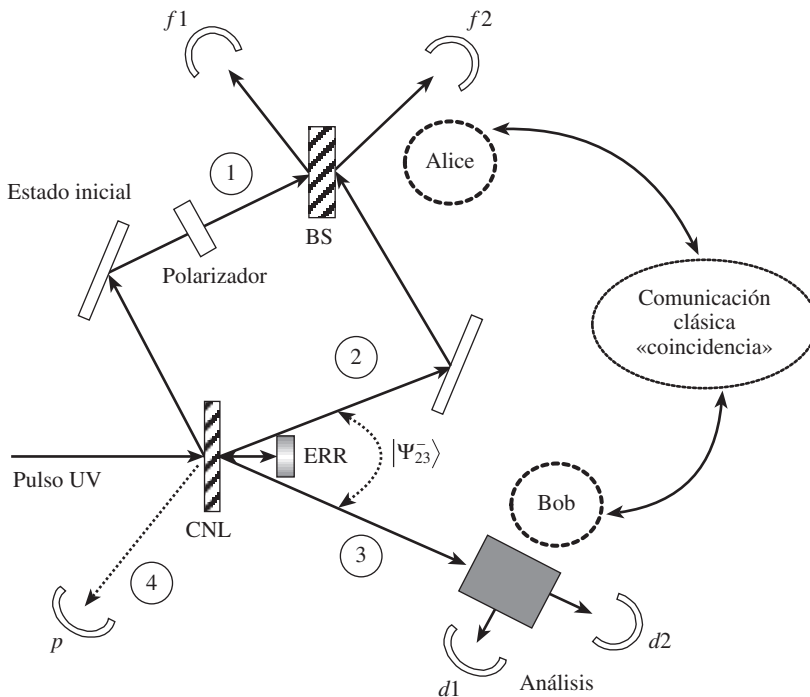


Figura R.8. Experimento de teleportación cuántica. ERR es un espejo retroreflector.

a 2, producidos en la primera conversión paramétrica, y los correspondientes a 1 tienen ciertas *duraciones temporales* o *tiempos de coherencia*. Véase capítulo 15. Es necesario que los dos tiempos de coherencia de los fotones asociados a 2 y a 1 sean mucho mayores que la duración del haz pulsado de bombeo: en el experimento de Bouwmeester et al. (1997) los pulsos de bombeo tenían una duración de 200 fs (con un ritmo de repetición de 76 MHz), en tanto que los tiempos de coherencia de los fotones resultantes de la conversión paramétrica eran 520 fs. Esto se puede reforzar a posteriori haciendo que los fotones asociados a 2 y a 1 pasen, una vez producidos, a través de filtros con pequeña anchura de banda. Así se consigue que, en cada par de fotones que llegan al divisor de haces, el fotón asociado a 2 no pueda distinguirse del asociado a 1 por sus tiempos de llegada ni al *beam splitter* ni a los detectores $f1$ y $f2$, que describimos más abajo. Con ese mismo fin, se puede reducir a cero o minimizar el retraso entre la primera y la segunda conversión paramétrica, trasladando el espejo ERR en el que se produce la retroreflexión: así, se puede eliminar o minimizar el retraso entre las llegadas del fotón correspondiente al qubit 1 y del asociado a 2 al *beam splitter*.

Se colocan sendos detectores, $f1$ y $f2$, uno en un puerto del *beam splitter* y el otro en el otro puerto. El propósito es poder realizar mediciones conjuntas en el qubit 2 y en el qubit 1 después de que los fotones emergen del *beam splitter*. En el subapartado R.2.3 de este apéndice se han discutido diversas posibilidades que pueden darse en el divisor de haces y, por tanto, detectarse. Se programan $f1$ y $f2$ de modo que puedan detectar ambos sincronizadamente solamente en ciertas ventanas temporales (de unos pocos nanosegundos). Para que ambos, $f1$ y $f2$, puedan detectar en coincidencia, es necesario, además, que los dos fotones que emerjan del *beam splitter* hayan sido ambos reflejados, o bien ambos transmitidos.

A diferencia del caso considerado en el subapartado R.2.3 de este apéndice, en el experimento de Bouwmeester et al. (1997) la parte de la función de onda completa de los dos fotones incidentes 1 y 2 que es afectada por el *beam splitter* y sobre la que éste actúa no es necesariamente simétrica, sino que puede ser antisimétrica. Recuértese la discusión sobre las funciones de onda de dos fotones en el subapartado R.2.2 de este apéndice. El punto esencial es que si $f1$ y $f2$ detectan en coincidencia, lo cual ocurre en efecto experimentalmente, entonces como resultado de esa medición los dos qubits asociados a 2 (a A) y a 1 están necesariamente en el estado $|\Psi_{12}^-\rangle$, entrelazado en polarizaciones lineales y antisimétrico en el intercambio de éstas. Recuértese que los otros tres estados EPR ($|\Psi_{12}^+\rangle$, $|\Phi_{12}^-\rangle$, $|\Phi_{12}^+\rangle$) son simétricos en el intercambio de polarizaciones. El carácter antisimétrico de $|\Psi_{12}^-\rangle$ tiene un papel importante en la identificación experimental de dicho estado. En consecuencia, en el experimento de Bouwmeester et al. (1997) se genera una interferencia constructiva: la probabilidad conjunta de detectar fotones en ambos detectores $f1$ y $f2$ en los dos puertos (es decir, la probabilidad conjunta de reflexión y transmisión) es experimentalmente diferente de cero.

Nótese, además, que al detectar en ambos $f1$ y $f2$ en coincidencia, y de acuerdo con la ecuación (R.1), el otro fotón del par EPR producido en la primera conversión paramétrica (correspondiente al qubit 3, asociado a B) está necesariamente en el estado $-a|0_3\rangle - b|1_3\rangle$. Ello constituye otro ejemplo de la reducción de la función de onda en el proceso de medición en coincidencia en $f1$ y $f2$ (véase el apartado G.1, en el apéndice G).

Dicha reducción tiene lugar de la forma indicada, aunque B no efectúe ninguna detección. Y eso puede, efectivamente, comprobarse experimentalmente al colocar en el camino de los fotones asociados a B un divisor de haces polarizante y dos nuevos detectores $d1$ y $d2$. El detector $d2$ está preparado de forma que selecciona estados de polarización lineal en la misma dirección que el polarizador que preparó $|\varphi_1\rangle$; $d1$ selecciona estados de polarización lineal en la dirección ortogonal a $d2$. Si el qubit 3 asociado a B está en el estado $-a|0_3\rangle - b|1_3\rangle$, sólo $d2$ debería detectar un fotón una vez que $f1$ y $f2$ lo han hecho en coincidencia, en tanto que $d1$ no debería señalar detecciones (o bien, desde un punto de vista no idealizado, al tener en cuenta ruidos y errores experimentales, el número de detecciones en $d1$ debería ser muy pequeño).

La detección en coincidencia triple de los tres detectores $f1$, $f2$ y $d2$ (junto con la inexistencia o reducción muy apreciable de detecciones en coincidencia triple de $f1$, $f2$ y $d1$) constituye la demostración experimental de la teleportación cuántica del estado $|\varphi_1\rangle = a|0_1\rangle + b|1_1\rangle$ de polarización lineal del qubit 1 al estado $-a|0_3\rangle - b|1_3\rangle \equiv |\varphi_3^T\rangle$ del qubit 3 asociado a B . Resultados experimentales típicos, obtenidos por Bouwmeester et al. (1997), que confirman la teleportación, son los siguientes. En un intervalo en el que los retrasos entre las llegadas del fotón correspondiente al qubit 1 y del asociado a 2 al *beam splitter* de BS son muy pequeños, siendo cada intervalo de duración 2000 segundos:

- i) El número de detecciones en coincidencia triple en $f1$, $f2$ y $d2$ se mantiene constante aproximadamente entre 400 y 500, en tanto que,
- ii) El número de detecciones en coincidencia triple en $f1$, $f2$ y $d1$ cae desde un valor promedio medio entre 400 y 500 hasta un mínimo en torno a 100.

Es conveniente interpretar las diversas detecciones en coincidencia triple (en $f1$, $f2$ y $d2$) o la ausencia de ellas (en $f1$, $f2$ y $d1$) más detalladamente, en conexión con «el mensaje clásico que A envía a B », y que tiene un papel esencial en la teleportación cuántica. La programación y sincronización adecuadas de los detectores de A y B para que puedan detectar en coincidencia y, en particular, efectuar detecciones en coincidencia triple, esconden e implementan el mecanismo de transmisión clásica de mensajes de Alice a Bob. La sincronización está limitada por las velocidades de respuesta de los dispositivos, las cuales no exceden, en ningún caso, la velocidad de la luz. Expresémoslo de otra forma. Los detectores de $f1$, $f2$ de A miden dobles coincidencias en una cierta secuencia de tiempos. Por otra parte, en los detectores de B , $d2$ detecta efectivamente, en tanto que $d1$ no lo hace (o lo hace con mucha menor frecuencia) en otra secuencia de tiempos. La comparación sincronizada de ambas secuencias de tiempos (la obtenida por A y la registrada por B) es lo que selecciona las detecciones en coincidencia triple en $f1$, $f2$ y $d2$, y la ausencia (o disminución) de detecciones en coincidencia triple en $f1$, $f2$ y $d1$. Esa comparación y esa selección implican y emplean procesos físicos de transmisión a velocidades que nunca superan la de la luz (en vacío). Cabe interpretar que justamente la comparación sincronizada de ambas secuencias y la subsiguiente selección implementan «el mensaje clásico que A envía a B ».

Existe, en particular, un efecto que puede enmascarar la teleportación cuántica y debe ser sustraído. Hay una probabilidad no despreciable de generación, también mediante

conversión paramétrica, de dos parejas de fotones *espurios*. Ninguno de ellos tiene nada que ver con el mensaje $|\varphi_1\rangle$. Estas parejas de fotones espurios son físicamente distintas de las formadas por la pareja de fotones 2 y 3 y (tras la retrorreflexión) por la pareja 1 y 4. Los fotones espurios pueden dar una contribución apreciable a las detecciones en coincidencia triple en $f1, f2$ y $d2$: dicha contribución no tiene nada que ver con las debidas a la teleportación cuántica, y constituye un fondo que debe ser excluido experimentalmente. Ello se consigue mediante la detección del fotón 4 en el detector p , en coincidencia cuádruple con las detecciones en $f1, f2$ y $d2$. Las detecciones en coincidencia triple en $f1, f2$ y $d2$, condicionadas a la del fotón 4 (el *trigger*) en el detector p constituyen demostraciones experimentales de la teleportación cuántica del estado $|\varphi_1\rangle$, libres de los fotones espurios.

Para aspectos más cuantitativos del experimento, véase el artículo original de Bouwmeester et al. (1997). Algunos aspectos adicionales acerca de él se han discutido en Braunstein y Kimble (1998) y en Bouwmeester et al. (1998).

Otros experimentos que han puesto de manifiesto la teleportación cuántica han sido realizados por:

- i) Boschi et al. (1998), con fotones.
- ii) Riebe et al. (2004), con iones de calcio.
- iii) Barreto et al. (2004), con iones de berilio.
- iv) Sherson et al. (2006), con un pulso de luz y átomos de cesio.

R.5. ALGORITMOS CUÁNTICOS

Resulta relativamente fácil diseñar un algoritmo cuántico que realice simultáneamente varias operaciones. Esto es lo que se conoce como paralelismo cuántico. Lo más difícil es extraer la información de un estado cuántico. Para más detalles, consúltense Nielsen y Chuang (2001), Galindo y Martín-Delgado (2002), Galindo (2003) y Bergman et al. (2003).

R.5.1. Un ejemplo sencillo

Veamos un ejemplo que ilustra la potencia de la computación cuántica. Sea $f(x)$ una función cuyo dominio y recorrido sea 1 bit, es decir, que toma valores en el conjunto $\{0, 1\}$ y sus resultados están también en $\{0, 1\}$. Veamos un algoritmo cuántico que es capaz de obtener una propiedad global de la función $f(x)$ en una sola operación, algo imposible para un algoritmo clásico.

Definamos la transformación U_f , que actúa sobre estados de dos qubits $|x, y\rangle$ de la siguiente forma $U_f|x, y\rangle = |x, y \oplus f(x)\rangle$, donde aparece la función XOR definida previamente en el subapartado R.3.1. Consideremos el estado inicial $|\Psi\rangle = |01\rangle$. El algoritmo actúa en tres fases:

1. Usando sendas puertas Hadamard H (subapartado R.3.2) sobre cada uno de los dos qubits que forman $|\Psi\rangle$, se obtiene

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

2. Actuando con U_f sobre $|\Psi_1\rangle$, el resultado es,

$$|\Psi_2\rangle = \begin{cases} \pm \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) & \text{si } f(0) = f(1) \\ \pm \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) & \text{si } f(0) \neq f(1) \end{cases}$$

3. Y, por último, si actuamos con una puerta H sobre el primer qubit, resulta que el *output* final puede escribirse como

$$|\Psi_3\rangle = \begin{cases} \pm |0\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) & \text{si } f(0) = f(1) \\ \pm |1\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) & \text{si } f(0) \neq f(1) \end{cases}$$

Si se tiene en cuenta que $f(0) \oplus f(1)$ es 0 si $f(0) = f(1)$ y 1 si no, podemos escribir

$$|\Psi_3\rangle = \pm |f(0) \oplus f(1)\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

Es decir, midiendo el primer qubit obtenemos un resultado global de la función $f(x)$, en este caso $f(0) \oplus f(1)$, lo que clásicamente necesitaría al menos dos medidas.

R.5.2. Algoritmo cuántico (Shor)

Veamos un ejemplo de un algoritmo cuántico más complejo y de gran utilidad, pues puede verse (Nielsen y Chuang, 2001) que permite factorizar números enteros. Sea $f(x)$ una función periódica que sólo toma valores en enteros $x = 0, 1, 2, \dots$. El algoritmo de Shor permite calcular el período de $f(x)$.

Para fijar ideas supongamos que x toma $D = 8$ valores $x = 0, 1, \dots, D - 1 = 7$. Consideremos el sistema cuántico formado por los estados $|n\rangle|f(m)\rangle \equiv |n, f(m)\rangle$, con $n, m = 0, 1, \dots, 7$, y sus superposiciones lineales $\sum \alpha_{nm}|n, f(m)\rangle$, con amplitudes de probabilidad α_{nm} .

El sistema cuántico formado por los estados $|n\rangle$, con $n = 0, 1, \dots, 7$, es equivalente a un sistema de tres qubits que contiene un total de ocho estados ($|0\rangle|0\rangle|0\rangle, \dots, |1\rangle|1\rangle|1\rangle$).

Nos concentraremos en el siguiente estado, en el que todas las amplitudes de probabilidad α_{nm} son iguales (superposición uniforme de los ocho estados de la forma $|n, f(m)\rangle$)

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{n=0}^7 |n, f(n)\rangle \quad [\text{R.2}]$$

A continuación, de acuerdo con el algoritmo de Shor, realizamos la siguiente transformación sobre los estados $|n\rangle \rightarrow |k\rangle$, donde

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{k=0}^7 e^{2\pi i kn/8} |k\rangle \quad [\text{R.3}]$$

que puede verse como una transformación de Fourier. Como resultado de [R.3], el estado [R.2] se transforma en

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{8} \sum_{n=0}^7 \sum_{k=0}^7 e^{2\pi i kn/8} |k, f(n)\rangle \quad [\text{R.4}]$$

Supongamos que la función $f(x)$ tiene período 2, es decir, $f(0) = f(2) = f(4) = f(6)$ y $f(1) = f(3) = f(5) = f(7)$. Entonces el estado $|\Psi\rangle$, dado en [R.4], es una superposición de la siguiente forma

$$\sum_{j=0}^1 \sum_{k=0}^7 c_{kj} |k, f(j)\rangle$$

Un cálculo, que se propone como ejercicio, muestra que los coeficientes c_{kj} verifican las igualdades $c_{k0} = c_{k1} e^{-i\pi k/4} = 1 + i^k + (-1)^k + (-i)^k = 4\delta_{k4}$, donde hemos utilizado la función delta de Kronecker. Por tanto, el estado $|\Psi\rangle$ se escribe, finalmente

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} [|0, f(0)\rangle + |0, f(1)\rangle + |4, f(0)\rangle + e^{i\pi} |4, f(1)\rangle] \quad [\text{R.5}]$$

Como resultado de la transformación de Fourier, y de que el período de la función $f(x)$ es igual a 2, se han producido fuertes cancelaciones entre las amplitudes de probabilidad, de tal forma que la medida del primer qubit del estado $|\Psi\rangle$ solamente toma los valores 0 o 4, ambos con idéntica probabilidad 1/2.

El algoritmo de Schor asegura que si $f(x)$, en general, tiene período T , los valores posibles de la medida de k con probabilidad no nula son

$$k = 0, D/T, 2D/T, \dots, (T - 1)D/T \quad [\text{R.6}]$$

donde D es el número de valores posibles de la variable.

En particular, en el ejemplo anterior, $D = 2^3 = 8$. Por tanto, teniendo en cuenta [R.6], el período es $T = 2$. Es decir, según dicho algoritmo, en un caso más general en el que se obtengan más de dos valores posibles para la variable k , éstos son $k = m(D/T)$, con $m = 0, 1, \dots, T - 1$, y se puede ver, a partir de los cocientes $D/k = T/m$, el valor del período como el numerador de la fracción que aparece con probabilidad suficientemente alta.

No se describe en este apéndice cómo se implementa mediante operadores cuánticos la transformada de Fourier cuántica, utilizada en la ecuación [R.3]. El lector interesado puede consultar Nielsen y Chuang (2001).

R.6. OTROS DESARROLLOS

Una de las aplicaciones más recientes de la Información Cuántica es la llamada Criptografía Cuántica. Éste es un procedimiento que utiliza los principios de la Mecánica Cuántica para garantizar la distribución de información reservada de manera segura. Existen en la actualidad compañías que comercializan sistemas cuánticos de encriptación.

La distancia más larga alcanzada en 2006 en la transmisión de información mediante Criptografía Cuántica usando fibra óptica es de 148.7 km, en una experiencia realizada en Los Alamos/NIST (P. A. Hiskettl et al., 2006).

Para la transmisión libre, se ha conseguido realizarla en una distancia de 144 km entre dos de las islas del archipiélago de Las Canarias (R. Ursin et al., 2007, y T. Schmitt-Manderbach et al., 2007). En 2013 se ha demostrado la comunicación cuántica de una variable a lo largo de 83 km de fibra óptica (Jouget et al., 2013).

Respecto al estado actual de los ordenadores cuánticos, se han utilizado diferentes sistemas, entre los que cabe mencionar como más prometedores: iones atrapados (Leibfried et al., 2003), puntos cuánticos (Spiller et al., 2007), circuitos ópticos (Lu et al., 2007) y anillos superconductores. Con esta última técnica se ha presentado un modelo de 28-qubits, realizado por una compañía privada, en la Supercomputing Conference 2007.

Agradecimientos

Agradecemos al doctor Gabriel F. Calvo sus informaciones útiles, sugerencias constructivas, una lectura y discusiones críticas de los apartados R.2 y R.4 de este apéndice. Asimismo, agradecemos a la profesora Marina Ramón Medrano la lectura crítica y detallada de este apéndice.

BIBLIOGRAFÍA

- Agulló-López, F., Cabrera, J. M. y Agulló-Rueda, F. (1994). *Electrooptics: Phenomena, Materials and Applications*. Londres: Academic Press.
- Barrett, M. D., Chiaverini, J., Schaetz, T., Britton, J., Itano, W. M., Jost, J. D., Knill, E., Langer, C., Leibfried, D., Ozeri, R. y Wineland, D. J. (2004). *Nature*, 429: 737.
- Bennett, C. H., Brassard, G., Crépeau, C., Jozsa, R., Peres, A. y Wootters, W. (1993). *Phys. Rev. Lett.*, 70: 1895.
- Berman, G. P., Doolen, G. D., Mainieri, R. y Tsifrinovich, V. I. (2003). *Introduction to Quantum Computers*. Singapur: World Scientific.
- Boschi, D., Branca S., De Martini, F., Hardy, L. y Popescu, S. (1998). *Phys. Rev. Lett.*, 80: 1121.
- Bouwmeester, D., Pan, J.-W., Daniell, M., Weinfurter, H., Zukowski, M. y Zeilinger, A. (1998): *Nature*, 394: 841.
- Bouwmeester, D., Pan, J.-W., Mattle, K., Eibl, M., Weinfurter, H. y Zeilinger, A. (1997). *Nature*, 390: 575.
- Braunstein, S. L. y Kimble, H. J. (1998). *Nature*, 394: 840.
- Cirac, J. I. y Zoller, P. (1995). *Phys. Rev. Lett.*, 74: 4091.
- Einstein, A., Podolsky, B. y Rosen, N. (1935). *Phys. Rev.*, 47: 777.
- Galindo, A. (2001). *Del bit al qubit*, Lección inaugural del curso académico, 2001-2002. Madrid: Universidad Complutense.
- Galindo, A. (2003). Entre el cero y el uno: el arte de calcular, *Revista de la Real Acad. Cienc. Exact. Fis. Nat. (España)*, 97: 359.
- Galindo, A. y Martín-Delgado, M. A. (2002). *Rev. Mod. Phys.*, 74: 347.
- Hiskettl, P. A. et al. (2006). *New J. Phys.*, 8: 193.
- Hong, C. K., Ou, Z. Y. y Mandel, L. (1987). *Phys. Rev. Lett.*, 59: 2044.
- Jouget, P. et al. (2013). *Nat. Phot.* 7, 378-381.
- Kwiat, P. G., Mattle, K., Weinfurter, H., Zeilinger, A., Sergienko, A. V. y Shih, Y. (1995). *Phys. Rev. Lett.*, 75: 4337.
- Leibfried, D. R. et al. (2003). *Rev. of Mod. Phys.*, 75: 281.
- Lu, C. Y. et al. (2007). *Nature*, 3: 91.
- Monroe, C., Meekhof, D. M., King, B. E., Itano, W. M. y Wineland, D. J. (1995). *Phys. Rev. Lett.*, 75: 4714.
- Nielsen, M. A. y Chuang, I. L. (2001). *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Okamoto, R., Hofmann, H. F., Takeuchi, S. y Sasaki, K. (2005). *Phys. Rev. Lett.*, 95: 210506. *Revista Española de Física*, vol. 14, núm. 1, número especial: *Cien años de Quanta*, 2000.
- Riebe, M., Haffner, H., Roos, C. F., Hansel, W., Benhelm, J., Lancaster, G. P. T., Korber, T. W., Becher, C., Schmidt-Kaler, F., James, D. F. V. y Blatt, R. (2004). *Nature*, 429: 734.
- Schmitt-Manderbach, T. et al. (2007). *Phys. Rev. Lett.*, 98.1 010504.
- Schrödinger, E. (1935). *Naturwissenschaften*, 23: 807, 823 y 844.
- Sherson, J. F., Krauter, H., Olsson, R. K., Julsgaard, B., Hammerer, K., Cirac, I. y Polzik, E. S. (2006). *Nature*, 443: 557.
- Spiller, T. P. et al. (2007). *New J. Phys.*, 9: 20.
- Ursin, R. et al. (2007). *Nature Physics*, 3: 481.
- Wootters, W. y Zurek, W. H. (1982). *Nature*, 299: 802.
- Zeilinger, A., Bernstein, H. J. y Horne, M. A. (1994). *Journal of Modern Optics*, 41: 2375.

S

Nanoestructuras y física cuántica

J. L. Vicent

En una conferencia reproducida en múltiples ocasiones, que ha servido como introducción a numerosos textos y conferencias sobre la Física de nanoestructuras, R. P. Feynman se preguntaba en 1956 por qué no se había abordado el tema de las propiedades físicas de conjuntos de átomos a escala mesoscópica, es decir, la escala intermedia entre el átomo y el sólido. Feynman predecía que este campo de investigación iba a producir un número ingente de aplicaciones, y se preguntaba de forma retórica por qué nadie había intentado todavía explorar este campo. Como bien señalaba Feynman, nada en las leyes de la Física impide manipular y controlar conjuntos de átomos a escala nanométrica. Feynman se lamentaba de la falta de interés en este campo de los físicos de su tiempo. Literalmente, decía: «En el año 2000, cuando vuelvan los ojos a esta época, se preguntarán por qué nadie hasta 1960 empezó a considerar seriamente esta posibilidad». La clarividencia de Feynman hace que, sólo citando las secciones en las que dividió su discurso, podamos tener una clasificación de los temas que hoy en día constituyen el núcleo de la nanociencia. Feynman plantea la necesidad de tener mejores microscopios que permitan acceder a nuevos campos de investigación, habla de miniaturización de los ordenadores, de los maravillosos sistemas biológicos como un nuevo campo a explorar, de la miniaturización por evaporación atómica, del problema de la tribología a escala mesoscópica, de la posibilidad de reordenar a voluntad conjuntos de átomos, etc. Varios años antes del cambio de siglo ya existía un desarrollo suficiente de todos estos temas, que han convertido a la sociedad en la que Feynman vivía en la sociedad actual de la miniaturización y la información en la que nos movemos actualmente.

Dos avances fundamentales han constituido la base donde se asientan la nanociencia y la nanotecnología. Uno de ellos es la posibilidad de fabricar con perfección atómica nuevos materiales; el otro es la posibilidad de caracterizar y manipular los materiales a escala atómica. Como paradigma del primero, podemos señalar las técnicas de fabricación basadas en evaporación controlada de materiales en muy altos vacíos y con precisión atómica; como ejemplo, se pueden señalar la técnica de fabricación de Epitaxia por Haces Moleculares (MBE, en sus siglas en inglés). Como paradigma del segundo, podemos indicar los nuevos microscopios de sonda local, como son el microscopio túnel de barrido (STM en sus siglas en inglés) o de fuerzas atómicas o magnéticas (AFM y MFM, en sus siglas en inglés, respectivamente). Curiosamente, estos dos avances cruciales en el desarrollo de la nanotecnología se pusieron en marcha en los laboratorios de IBM, el primero de ellos en 1970, en los laboratorios de Nueva York, por L. Esaki, con la fabricación de su-

perredes semiconductoras, donde se alternan dos materiales distintos con intercaras perfectas a nivel atómico, y el segundo, en 1979, en los laboratorios IBM de Zurich, por Rohrer y Binnig, donde obtuvieron resolución atómica en el espacio real mediante un microscopio basado en corriente túnel entre un átomo y una superficie. Estos dos hitos abrieron la puerta a la fabricación, la caracterización, el control y la manipulación de la materia a escala atómica.

No es el objeto de este apéndice el desarrollo de estos dos temas. El objetivo principal es, siguiendo el objetivo principal del libro, poner de manifiesto la enorme interrelación y el impacto de la Física Cuántica en el mundo mesoscópico, para lo que utilizaremos unos pocos ejemplos.

La interacción de la Física a escala nanométrica con la Física Cuántica es completa. La posibilidad de fabricar materiales en la escala donde la Física Cuántica gobierna las leyes físicas es uno de los mayores avances en la investigación actual. En esta escala, problemas teóricos y experimentales se pueden estudiar simultáneamente en el mismo material. Actualmente se fabrican materiales cuyas dimensiones son del orden de las longitudes que gobiernan fenómenos físicos cuánticos, de forma que se puede hablar de materiales en dos dimensiones, en una dimensión y en cero dimensiones, y si existe una dimensión, dos dimensiones o tres dimensiones menores que la longitud característica que representa el efecto estudiado. Un buen ejemplo es la conducción eléctrica. En este caso, una longitud característica sería el recorrido libre medio inelástico, que es la distancia que recorre un electrón de conducción entre dos interacciones con las vibraciones de la red (fonones). Este recorrido libre medio se puede modificar con la temperatura, y si esta longitud física es del orden o menor que alguna o varias de las dimensiones del conductor, el transporte eléctrico puede cambiar de forma drástica, como señalaremos unas líneas más abajo. Otro ejemplo relevante sería el estudio de la conducción eléctrica entre dos electrodos que están conectados por una única molécula, lo que constituye la base de la llamada electrónica molecular, o bien dos electrodos unidos por una cadena de átomos; en este caso se tiene conducción eléctrica por canales discretos. En resumen, los efectos de confinamiento del material a escala nanométrica inducen modificaciones drásticas en el comportamiento conocido de ese mismo material en escala macroscópica, incluyendo las propiedades de origen cuántico. Es decir, la escala mesoscópica influye y modifica el comportamiento del material gobernado por las leyes de la Física Cuántica. Por ejemplo, un parámetro crucial para muchos fenómenos es la densidad de estados en el nivel de Fermi $N(E_f)$, definida como el número de estados por unidad de energía y unidad de «espacio». En tres dimensiones, es decir, en el mundo habitual, si L es la dimensión del «lado» del material, la unidad de «espacio», es decir, el volumen, será L^3 ; en el caso de tener dos dimensiones, es decir, el «espacio», será ahora la superficie L^2 , y, finalmente, en una dimensión, la unidad de espacio será la longitud L . Por tanto, se tiene una marcada dependencia de la densidad de estados con la dimensión. En el caso de tener una banda de conducción típica parabólica de relación de dispersión

$$E(K) = \frac{h^2 k^2}{8\pi^2 m}$$

La densidad de estados en el nivel de Fermi, $N(E_F) = (1/L^d) (dN/dE)$, resulta que depende de la dimensión de una manera muy importante, se tiene que para $d = 3$ la densidad de estados en el nivel de Fermi $N(E_F)$ varía como $E^{1/2}$, mientras que para $d = 2$, $N(E_F)$ no depende de la energía (es constante). Finalmente, para $d = 1$ la densidad de estados en el nivel de Fermi $N(E_F)$ varía como $E^{-1/2}$. Otro ejemplo, donde el confinamiento a escala mesoscópica del material modifica el comportamiento físico, es en las estructuras anteriormente citadas, superredes, donde la nueva periodicidad de la superred, que es mayor que la periodicidad de la red cristalina de los materiales que forman la superred, produce la aparición de sub-bandas dentro de la banda original, con zanjas prohibidas de energía entre ellas. Otra situación donde los efectos debidos a la nanoestructuración son evidentes es la de las propiedades ópticas. Un punto cuántico de tamaño suficientemente pequeño influye en la zanja entre la banda de valencia y la de conducción, de tal forma que a menor tamaño del punto, mayor zanja de energía, y puede obtenerse un corrimiento de la frecuencia de absorción o emisión de fotones, por ejemplo, hacia el azul, comparado con el mismo material en forma masiva o por un punto de mayor tamaño.

Otro de los aspectos relevantes de la nanoestructuración del sólido es la aparición de los llamados cristales fotónicos, que son nanoestructuras periódicas formadas por materiales con distinto índice de refracción. La combinación de zanjas de energía modificadas por la nanoestructuración y los diferentes índices de refracción hacen posible que se tengan sistemas donde se pueden manipular y confinar fotones, exactamente igual a como se hace con los electrones en nanoestructuras semiconductoras mediante la transformación de las zanjas de energía entre las bandas de conducción y de valencia mediante la combinación de los semiconductores adecuados y su apropiada nanoestructuración.

Volviendo a otro de los campos anteriormente citados, como es el transporte eléctrico, se encuentra todo un abanico de nuevos y muy interesantes efectos, alguno ya tratado en apéndices anteriores, como es el efecto Hall cuántico (véase apéndice J). Entre ellos, se pueden citar el bloqueo de Coulomb y el transistor de un único electrón, y el efecto Bohm-Aharonov, entre otros. Como se ha escrito unas líneas antes, el transporte de corriente eléctrica en una nanoestructura permite poner en juego la competencia entre las dimensiones de la nanoestructura y las longitudes típicas de efectos de transporte. Así se tiene que, experimentalmente, se puede conseguir que el recorrido libre medio inelástico sea superior a las dimensiones del material nanoestructurado, con lo que el transporte de corriente es balístico, es decir, en la nanoestructura se tiene transporte de carga sin que el portador de carga sea dispersado en el interior de la nanoestructura. El interés y el problema se trasladan a los contactos y a la barrera que tiene que vencer el portador de corriente para «entrar» en la nanoestructura. Cuando el material es un punto cuántico y las uniones con el mundo exterior son débiles, y tenemos, por tanto, efectos túnel, desempeña un papel principal el valor de la capacitancia C del punto cuántico, que puede ser tan pequeña que la competencia entre las energías de carga ($e^2/2C$) y la térmica ($k_B T$) sea el balance que gobierna el efecto túnel. Puede ocurrir que añadir al punto cuántico un nuevo electrón o extraer un único electrón suponga que se excede la energía térmica, pudiéndose, mediante efecto túnel, controlar el paso de un único electrón, es decir, una situación *on-off* (abierto-cerrado) debido a un sólo electrón. Este efecto de bloqueo de Coulomb y transistores de un solo electrón se puede medir experimentalmente. Otro efecto muy lla-

mativo es el efecto Bhom-Aharonov. A mediados del siglo pasado estos dos investigadores predicen la interferencia de las funciones de onda de electrones cuya fase se puede cambiar mediante un campo magnético aplicado a través del potencial vector A . Como se ha indicado al principio de este apéndice, hoy en día se puede fabricar el dispositivo que permite comprobar experimentalmente este efecto. Es crucial que el electrón conserve su fase, para lo cual hay que fabricar un conductor del tamaño adecuado, de tal forma que su longitud sea menor que el recorrido libre medio de fase del electrón de conducción. Es decir, la longitud de la circunferencia debe ser menor que la longitud donde el electrón conserva la coherencia de fase. El experimento consiste en construir un anillo conductor del tamaño requerido para que a lo largo del anillo la fase de la onda se conserve, esto es, necesitamos dimensiones nanométricas y muy bajas temperaturas, algo factible hoy en día. El siguiente paso es aplicar un campo magnético perpendicular al anillo. Se tiene, entonces, que el potencial vector tendrá justo signo opuesto en la rama superior que en la rama inferior del anillo; por tanto, la fase de los electrones en las dos semicircunferencias se puede fácilmente calcular y ver que depende del campo aplicado. Al volver a juntarse la semicircunferencia inferior con la superior del anillo, se produce interferencia entre las funciones de onda, que se puede modular con el campo aplicado. Se mide exactamente lo predicho por Bohm-Aharonov. La transmisión por el anillo oscila con un período que viene dado por el valor elemental del flujo magnético a través del anillo, que es *hcle*. Es interesante subrayar que este efecto de interferencia cuántica mesoscópica no tiene nada que ver con el efecto cuántico macroscópico de cuantización del flujo magnético en un superconductor (véase capítulo 33).

Existen muchos otros efectos ligados a la Física Cuántica en baja dimensionalidad. En el libro *Introducción a la Física del Estado*, de C. Kittel, se puede encontrar un capítulo íntegro dedicado a este campo de máxima actualidad. Como muestra el enorme interés desarrollado en los últimos años en las nuevas formas alotrópicas del carbono, como son los fulerenos descubiertos por Kroto, Curl y Smalley en 1985, los nanotubos de carbono por Iijima en 1991 y, finalmente, el grafeno por Geim y Novoselov en 2007.

BIBLIOGRAFÍA

1. La conferencia de R. P. Feynman se puede encontrar reproducido en *Journal of Microelectromechanical Systems*, vol. 1, p. 60 (1992).
2. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8.^a ed., cap. 18, John Wiley & Sons, Inc.

T

Atrapamiento y manipulación de iones, átomos y fotones individuales

R. F. Álvarez-Estrada
A. Muñoz Sudupe

En éste apéndice introduciremos y resumiremos diversos avances, muy importantes en Física Cuántica, sobre el control y la manipulación de iones, átomos y fotones que han tenido lugar en las últimas décadas. Diversos resultados han sido galardonados sucesivamente con el Premio Nobel de Física, según iremos indicando.

Así, se desarrollaron procedimientos experimentales para atrapar y mantener confinados iones y átomos individuales en regiones espaciales adecuadas («trampas») y para reducir las energías («enfriar») de aquéllos mediante haces de luz láser. En la actualidad, y mediante aquellas técnicas, es posible observar *in situ* y manipular iones individuales en condiciones de influencia y perturbación debidas al medio circundante, controlables y muy pequeñas. Véanse las secciones T.1 y T.2.

Por otra parte, se han desarrollado otros métodos, complementarios de los anteriores, para atrapar y manipular fotones individuales (sin que éstos sean absorbidos o destruidos durante un cierto tiempo) en el interior de cavidades adecuadas.

Para una mejor comprensión, también será adecuado resumir aquí algunos hechos importantes (sección T.3) y aspectos conceptuales (que complementan la interpretación probabilística estándar utilizada a lo largo de este libro). En particular, introduciremos la decoherencia y el llamado «gato de Schrödinger»: véanse las secciones T.4 y T.5. Tras ello, se tratarán las manipulaciones de entidades individuales (iones y fotones, subsecciones T.6.1 y T.6.2) y, basados en ellas, los tests experimentales de la decoherencia (subsecciones T.7.1 y T.7.2). Estudios en mucha mayor amplitud y profundidad pueden verse en Haroche y Raymond (2007).

T.1. TRAMPAS DE IONES Y PARTÍCULAS NEUTRAS

El objetivo de estos dispositivos es confinar, mediante campos electromagnéticos, una o varias partículas cargadas o neutras con momento dipolar en una región delimitada del espacio durante largos períodos de tiempo.

Durante los años cincuenta se consiguió focalizar en dos dimensiones haces de partículas neutras usando campos eléctricos y magnéticos estáticos (multipolares) que interactuaban con los correspondientes momentos dipolares magnéticos y eléctricos de dichas partículas. Extendiendo estas ideas al ámbito tridimensional, se construyeron trampas para partículas cargadas y neutras con momento dipolar.

Un potencial de tipo armónico $V(x, y, z) = ax^2 + by^2 + cz^2$ es, en principio, un candidato ideal para conseguir el confinamiento, pero al tratarse de interacción electromagnética, la ecuación de Laplace, $\Delta V(x, y, z) = 0$, impone la condición $a + b + c = 0$. Si, como parece razonable, deseamos mantener la simetría axial, una solución adecuada puede ser el potencial cuadrupolar $V = V_0(x^2 + y^2 - 2z^2)/r_0^2$. Resulta obvio que este potencial no puede confinar una partícula debido al signo negativo del potencial en la dirección z . Se han propuesto dos soluciones a este problema:

1. Trampa de Paul. Resuelve el problema dinámicamente mediante la aplicación adicional de un potencial de radiofrecuencia. Véase Paul (1989).
2. Trampa de Penning. Se utiliza un campo electrostático en la dirección axial y un campo magnético estático muy intenso ($B > 1\text{T}$) en la dirección axial. Véase Dehmelt (1989).

En ambos casos, la configuración confinante puede generarse mediante tres electrodos: un anillo hiperbólico y dos casquetes hiperbólicos (*endcaps*) con simetría axial, como se muestra en la figura T.1.

Casquete superior (carga negativa)

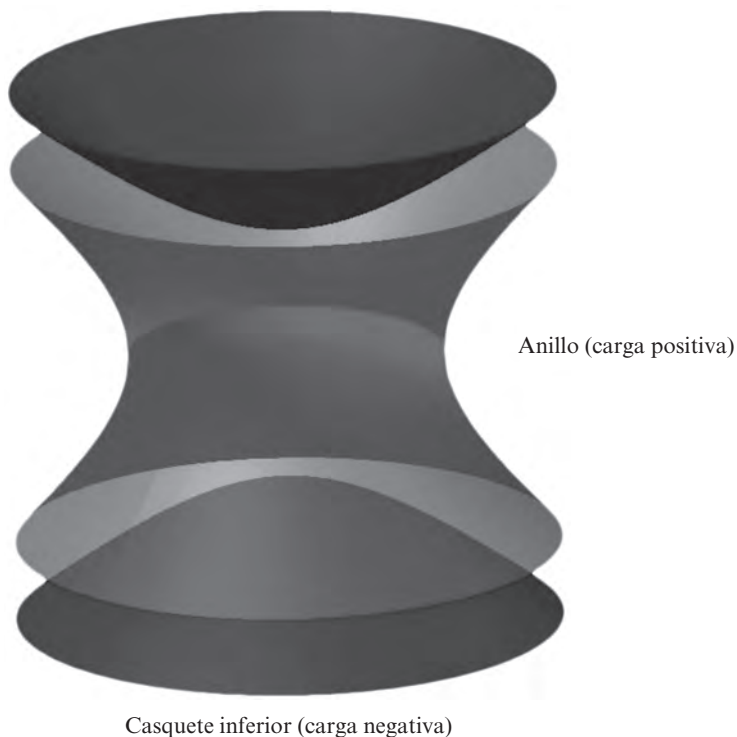


Figura T.1. Esquema del potencial en una trampa de iones.

En el caso de la trampa de Paul, el potencial es $V_0 = U + V \cos(\omega t)$, donde U es un potencial electrostático y V es un potencial de radiofrecuencia con frecuencia ω . Para valores fijos de estos parámetros, la estabilidad de las partículas confinadas depende fuertemente de sus masas, por ello, estos dispositivos también son empleados como espectrómetros de masas.

Las dimensiones geométricas de las trampas utilizadas son del orden de un centímetro y las profundidades de los potenciales del orden de unos pocos voltios. Resulta, por tanto, necesario idear un sistema de enfriamiento para atrapar iones, pues un sencillo cálculo muestra que las velocidades térmicas de éstos a temperaturas de incluso unos pocos grados Kelvin son todavía del orden de 100 m/s. La técnica más efectiva es el enfriamiento láser, del que hablaremos más adelante.

La trampa de Penning resulta conveniente cuando se miden propiedades magnéticas de las partículas. Utilizando técnicas de enfriamiento láser, es posible confinar un electrón durante meses en una trampa de este tipo. Uno de los resultados más espectaculares de estos dispositivos experimentales es la medida del momento magnético del electrón (concretamente, el factor giromagnético de espín del electrón; véanse [13.4.3] y Wineland (2013)). Cabe mencionar que el resultado teórico que proporciona la QED (electrodinámica cuántica) coincide en once cifras con la medida experimental. Este tipo de trampas se utiliza en experimentos recientes (Alpha CERN) para almacenar antipartículas: positrones y antiprotones. Una variación de la trampa de Penning se utiliza para formar átomos de antihidrógeno.

También es posible confinar partículas neutras con momento dipolar mediante trampas magnéticas que usan campos multipolares. Véanse Pritchard, (1983) y Dubin (2001).

T.2. ENFRIAMIENTO LÁSER

La posibilidad de enfriar átomos o iones permite realizar medidas de muy alta precisión. Los dispositivos láser han desempeñado un papel primordial en la consecución de temperaturas suficientemente bajas.

Describimos a continuación el enfriamiento Doppler, el método más usado para enfriar átomos o iones. Fue sugerido en 1976 por Hänsch y Schwalow para átomos, e independientemente por Wineland y Dehmelt para iones. Véase Wineland (2013).

Cuando un átomo se mueve en una dirección determinada con velocidad v y es irradiado con un haz láser de longitud de onda apropiada λ en dirección opuesta, se puede producir la absorción de un fotón por un átomo, con lo que su velocidad se reduce y pasa a ser $v' = v - hk/m$, donde $k = 2\pi/\lambda$ y m es la masa atómica. A pesar de que el átomo se desexcita emitiendo un fotón, lo que modifica de nuevo su velocidad, en promedio, ésta sigue siendo v' , puesto que el fotón es emitido en una dirección aleatoria, de manera que su contribución a la velocidad del átomo es nula en promedio.

El átomo así excitado vuelve a su estado fundamental emitiendo un fotón; como lo hace en una dirección aleatoria, su contribución al momento medio del átomo es nula, y el efecto promedio resultante es que el átomo reduce su velocidad.

Muchos de los experimentos de enfriamiento láser utilizan haces de átomos de sodio; en este caso es preciso ajustar la frecuencia de la radiación láser para que sea resonante con la línea D_2 del sodio y se produzca con alta probabilidad la absorción de fotones. Como el haz atómico se desplaza con velocidad v , es necesario tener en cuenta el desplazamiento Doppler para conseguir la absorción de la radiación. La velocidad de retroceso del átomo tras absorber un fotón es de, aproximadamente, 3 cm/s, mientras que la velocidad típica de un haz puede ser 10^5 cm/s, con lo que se necesitan 3×10^4 procesos de absorción-emisión para detener al átomo de sodio. La vida media de la transición correspondiente es 16 ns, es decir, el átomo puede detenerse en 1 ms, tiempo en el que recorre 0,5 m y es, por tanto, factible en un laboratorio.

Veamos los dos problemas principales que dificultan el enfriamiento de los átomos: el bombeo óptico y el desplazamiento Doppler.

El estado fundamental del sodio $^3S_{1/2}$ tiene una estructura hiperfina con dos niveles $F = 1$ y $F = 2$ (figura T.2). La regla de selección para la transición es $\Delta F = \pm 1, 0$.

Supóngase que el láser está sintonizado para ser resonante con la transición $^3S_{1/2}(F = 2) \rightarrow ^3P_{3/2}(F = 2)$; los átomos excitados decaerán con la misma probabilidad a los niveles $F = 1$ y $F = 2$ de $^3S_{1/2}$. En el caso de que el átomo decaiga en el $F = 1$, no se producirán nuevas excitaciones, porque el láser ha dejado de ser resonante.

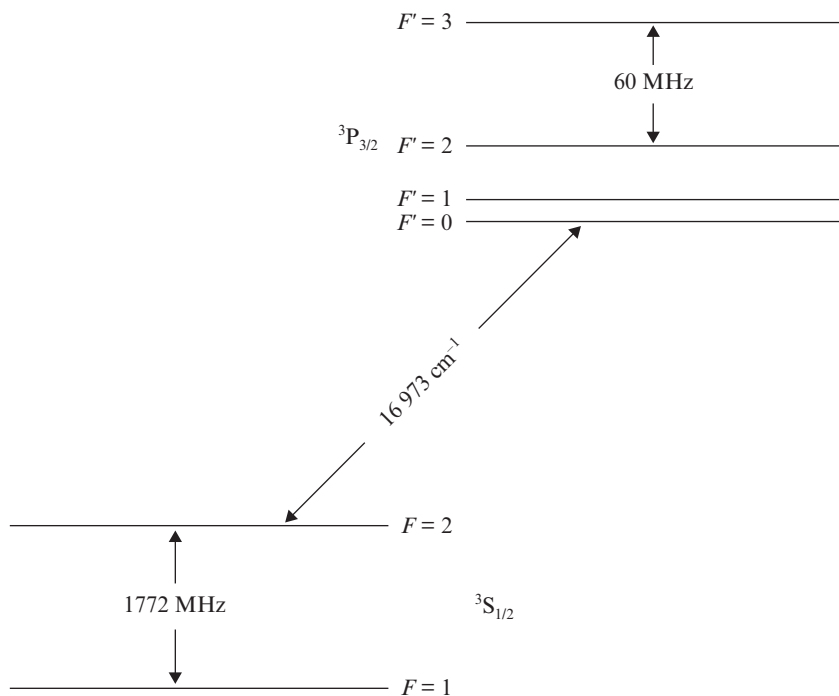


Figura T.2. Niveles de energía del Na (no representados a la misma escala); se muestran las separaciones entre los distintos niveles para su comparación.

Incluso si el láser está sintonizado para ser resonante con la transición ${}^3S_{1/2}(F=2) \rightarrow {}^3P_{3/2}(F'=3)$ en el que la regla de selección prohíbe el decaimiento no deseado en $F=1$, el nivel ${}^3P_{3/2}(F'=2)$ dista tan sólo 60 MHz del ${}^3P_{3/2}(F'=3)$, de tal forma que pueden ocurrir transiciones no resonantes aunque con menor probabilidad, aproximadamente una excitación no resonante por cada pocos centenares de transiciones resonantes. Una vez que se produce la desexcitación al nivel ${}^3S_{1/2}(F=1)$ se termina el proceso de absorción de los fotones, de modo que, después de unos pocos centenares de absorciones, el proceso se detiene.

Uno de los métodos empleados para evitar el problema del bombeo óptico es usar un láser adicional. Si el láser inicial es resonante con la transición ${}^3S_{1/2}(F=2) \rightarrow {}^3P_{3/2}(F'=2)$, el adicional lo es con ${}^3S_{1/2}(F=1) \rightarrow {}^3P_{3/2}(F'=2)$, de forma que los átomos que decaen al estado $F=1$ puedan ser excitados de nuevo e incluso bombeados de vuelta al estado $F=2$.

El segundo problema mencionado es el desplazamiento Doppler. Cuando un átomo absorbe del orden de 100 fotones, su velocidad cambia en, aproximadamente, 3 m/s. Este cambio en velocidades hace que la radiación laser deje de ser resonante con el haz atómico y, por tanto, se reduce considerablemente la tasa de absorción, con lo que no se consigue detener-enfriar los átomos. Se han encontrado diversas soluciones para resolver esta dificultad; mencionaremos aquí las dos que pueden ser consideradas como más importantes. La primera que se sugirió fue el *chirping*, que consiste básicamente en adaptar la frecuencia del láser para mantener la resonancia; el segundo método que se propuso modifica la frecuencia de los átomos, en lugar de la del láser, utilizando el desplazamiento Zeeman producido por un campo magnético inhomogéneo.

La temperatura más baja alcanzable con este método se llama límite Doppler, y para los átomos de sodio es de 240 mK.

Para conseguir temperaturas por debajo del límite Doppler existen diferentes técnicas. Presentamos aquí la *resolved sideband cooling*.

Un átomo o ión atrapado tiene grados de libertad atómicos y vibracionales, y estos últimos pueden tratarse como un oscilador armónico cuántico; véase también T.6.1. En la interacción con radiación láser, el átomo puede excitarse, en una transición dipolar, desde el estado atómico fundamental $|f\rangle$ al estado atómico excitado $|e\rangle$. Si la frecuencia del oscilador ν verifica $\nu < \Gamma$, siendo Γ la probabilidad de desexcitación del átomo por unidad de tiempo, el espectro de energías se denomina *sideband spectrum*, y los niveles internos del átomo $|f\rangle$, $|e\rangle$ presentan una subestructura de niveles vibracionales $|f, n\rangle$, $|e, n'\rangle$ con $n, n' = 0, 1, 2, \dots$. Cuando la frecuencia del láser se ajusta a $\omega = \omega_0 - \nu$, donde ω_0 es la frecuencia de la transición atómica interna entre $|e\rangle$ y $|f\rangle$ y ν es la frecuencia de la oscilación armónica, se produce la transición $|f, n\rangle \rightarrow |e, n-1\rangle$, seguida de la emisión espontánea $|e, n-1\rangle \rightarrow |f, n-1\rangle$. Si este proceso se repite un número suficiente de veces, se alcanzará con alta probabilidad el estado $|f, 0\rangle$.

Un efecto no contemplado inicialmente en el enfriamiento Doppler es el hecho de que el movimiento espacial de los átomos es difusivo. El recorrido libre medio de un átomo de sodio es de 20 mm, mientras que el tamaño del haz láser es del orden de 1 cm; véase Phillips (1997). Esto provoca que el átomo tarde un tiempo más grande del esperado en abandonar la región donde está siendo enfriado. Este efecto se observó al utilizar un con-

junto de seis haces láser propagándose según las direcciones $\pm x, y, z$. El término «melazas ópticas» hace referencia a la semejanza con el movimiento de una partícula en un fluido muy viscoso. Este dispositivo permite, además, un nuevo método de determinar la temperatura mediante la medida del tiempo de vuelo; véanse Phillips (1997) y Chu (1997). Sorprendentemente, la temperatura de los átomos de sodio encontrada fue de, aproximadamente, 40 mK, muy por debajo del límite Doppler mencionado previamente, lo que sugiere la existencia de otro mecanismo de enfriamiento distinto del Doppler. Las melazas ópticas no son una trampa de átomos; sin embargo, mediante la adición de un campo magnético inhomogéneo (J. Dalibard (1986), véase Cohen-Tannoudji) dan lugar a las trampas magneto-ópticas (MOT).

Este mecanismo es el responsable del enfriamiento por debajo del límite Doppler. También se conoce como enfriamiento «Sísifo» o «gradiente de polarización». Cuando dos haces láser se propagan en sentidos opuestos con polarizaciones ortogonales y las mismas frecuencia e intensidad, se produce una modulación espacial de la polarización en la región de interferencia. Esta modulación produce un desdoblamiento Zeeman de los niveles atómicos y un fenómeno de bombeo óptico entre los subniveles. Este bombeo está correlacionado con los desdoblamientos, de tal manera que los átomos absorben los fotones cuando se encuentran en el subnivel Zeeman superior y la separación entre ellos es máxima. Tras esta excitación, el átomo es ópticamente bombeado con alta probabilidad al otro subnivel Zeeman, de menor energía, de manera que su energía total disminuye en una cantidad igual a la separación entre los subniveles Zeeman. La variación espacial de la separación entre los subniveles, ocasionada por la variación espacial de la polarización, se asemeja a un potencial, de manera que en cada ciclo Sísifo el átomo pasa del máximo al mínimo del potencial, de aquí el nombre de Sísifo: los átomos suben por las colinas de potencial con mayor frecuencia que bajan por las colinas de potencial. Su energía cinética disminuye a medida que ascienden y, por tanto, se enfrían. En la discusión del enfriamiento Sísifo no se tiene en cuenta el efecto de la emisión de un fotón por el átomo. Ésta comunica al átomo una energía cinética de retroceso, $E_R = \hbar^2 k^2 / 2M$, siendo $\hbar k$ el momento del fotón emitido y M la masa del átomo. A esta energía de retroceso se le asocia una temperatura llamada de «retroceso». El límite del enfriamiento Sísifo viene dado por ella y en los experimentos se alcanzan temperaturas del orden de unos pocos $E_R/k_B \approx 0,2\mu\text{K}$, donde k_B es la constante de Boltzmann.

Existen métodos de enfriamiento por debajo de la temperatura de retroceso tales como: *Velocity Selective Coherent Population Trapping* (VSCPT), véase Cohen-Tannoudji (1997), enfriamiento Raman y enfriamiento por evaporación (*evaporative cooling*).

Estas técnicas de enfriamiento y atrapamiento de iones y partículas neutras tiene grandes aplicaciones: además de la manipulación de iones, átomos y fotones individuales, objeto de este apéndice, mencionaremos el condensado de Bose-Einstein y los relojes atómicos (N. Ramsey, 1989). Estos últimos constituyen una parte fundamental del sistema de posicionamiento global (GPS).

H. Dehmelt, W. Paul y N. Ramsey recibieron el premio Nobel de Física de 1989.

S. Chu, C. N. Cohen-Tannoudji y W. D. Phillips recibieron el premio Nobel de Física de 1997.

T.3. CAVIDADES, ÁTOMOS DE RYDBERG E INTERACCIÓN FOTÓN-ÁTOMO APROXIMADA

T.3.1. Átomos y radiación en cavidades

En el espacio libre, un átomo en un estado excitado pasa espontáneamente al estado fundamental o a un estado excitado de menor energía emitiendo un fotón (emisión espontánea en vacío); véase capítulo 21. Pero si un átomo excitado se encuentra en el interior de una cavidad con dimensiones adecuadas (cavidad óptica o de microondas), el proceso de emisión espontánea puede ser influido muy notoriamente. Así, cuanto más se aproximen las dimensiones de la cavidad a las de la longitud de onda del fotón que se emitiría espontáneamente en vacío, mayor es la supresión de la emisión espontánea que se observa experimentalmente. Por otra parte, la luz se amplifica en una cavidad cuyas dimensiones se aproximen suficientemente a la longitud de onda de aquélla.

En el capítulo 2 se describieron de forma esquemática recetas prácticas indicando en qué condiciones se describe la radiación electromagnética clásicamente (para frecuencias bajas) y cuándo se ponen de manifiesto los aspectos corpusculares (para frecuencias altas); véase la tabla 2.2. Dichas recetas son muy útiles por su carácter global, si bien deben ser matizadas en algunos casos (excepciones a esas recetas) muy importantes. Así, aunque la descripción clásica es ciertamente válida para las microondas, el espectro de frecuencias de la denominada radiación de fondo cósmico de microondas (detectada experimentalmente en una gran antena) constituye un importantísimo ejemplo de la ley (cuántica) de Planck, como se discute en el ejercicio 1.10. Ha sido posible confinar y manipular fotones individuales con frecuencias en el rango de las microondas, como veremos en este apéndice. En la interacción de átomos con campos electromagnéticos clásicos en el rango de las radiofrecuencias (con números enormemente elevados de fotones, cada uno con energía muy pequeña) hay efectos cuánticos en principio muy débiles que pasan inadvertidos habitualmente..., pero que pueden ponerse de manifiesto en experimentos muy sensibles. Así, sometido a dichos campos de radiofrecuencias, no hay transiciones entre los estados de un átomo (las energías de los fotones son demasiado pequeñas para producirlas)..., pero los niveles de energía atómicos sufren unos desplazamientos muy pequeños (Haroche, 2013). Estos últimos, pese a su pequeñez, son importantes y se ponen de manifiesto en los experimentos que describiremos en la subsección T.6.2.

T.3.2. Átomos en estados de Rydberg

El ejemplo más simple de un átomo de hidrógeno en un estado de Rydberg corresponde a un estado excitado con valores muy grandes del número cuántico principal, n .

Supongamos que en un átomo genérico (en general, no de hidrógeno) se cumplen las condiciones siguientes:

1. Hay un electrón que es, en promedio, el más alejado del núcleo, así que los demás electrones menos alejados de éste apantallan considerablemente el potencial coulombiano del núcleo sobre aquel electrón (denominado electrón de valencia).

2. El apantallamiento es lo suficientemente intenso como para que el potencial coulombiano «visto» por el electrón de valencia pueda aproximarse por [5.2.5] con $Z = 1$ (similar al de un átomo de hidrógeno), así que los estados estacionarios aproximados de dicho electrón son los estudiados en la subsección 12.3 (con números cuánticos (n, l)).
3. El electrón de valencia está en un estado con número cuántico principal n muy grande. En tal caso, se dice que dicho átomo está en un estado de Rydberg A^* . Hay generalizaciones de este concepto para átomos con más de un electrón de valencia, pero no se tratarán aquí. Compárese con la sección 23.4. Los estados de Rydberg desempeñaron un papel clave en los argumentos que condujeron al modelo de Bohr; véase la sección 5.2.

Los átomos en estados de Rydberg A^* pueden producirse por medio de haces colimados de electrones rápidos que inciden sobre los átomos en sus estados fundamentales A (con los correspondientes electrones de valencia en sus estados de energías más bajas). La reacción es $e + A \rightarrow e^* + A^*$, donde e^* denota un electrón saliente con energía cinética menor que la del incidente. La diferencia de energía cinética se ha empleado en excitar el átomo desde el estado A hasta el estado de Rydberg A^* .

Los átomos en estados de Rydberg A^* tienen las propiedades siguientes:

- a) Una vez formados, y en ausencia de perturbaciones exteriores, pueden existir durante tiempos largos en dichos estados (o, al menos, suficientemente largos para participar como «átomos de Rydberg» en diversos fenómenos) antes de volver al estado fundamental A , es decir, antes de que el correspondiente electrón de valencia pase a su estado de energía más baja.
- b) Las energías de los correspondientes electrones de valencia (siendo negativas) son pequeñas en valor absoluto, así que los estados A^* son fácilmente ionizables.
- c) Son muy sensibles (teniendo respuestas muy apreciables) si se les aplican campos eléctricos o magnéticos externos.
- d) Son muy sensibles a la radiación de microondas (cuya longitud de onda está comprendida entre 1 m y 1 mm).
- e) De acuerdo con las propiedades 2 y 3 anteriores, la función de onda aproximada del electrón de valencia en el estado A^* describe una distribución de probabilidad con un máximo muy pronunciado a lo largo de una órbita circular clásica de la teoría de Bohr, con número cuántico principal n muy grande (véase la sección 5.2 y la [5.2.25]).
- f) En la longitud de dicha órbita circular clásica caben exactamente n longitudes de onda de de Broglie.

Un átomo en un estado de Rydberg A^* es muy grande o gigantesco (a escala atómica). En efecto, basándonos en las condiciones/aproximaciones 1, 2 y 3 en esta subsección, podemos estimar el valor esperado $\langle r \rangle_{n,l}$ de la coordenada radial r del electrón más alejado del núcleo utilizando la ecuación [12.3.19] con $Z = 1$, tomando, además, $l = n - 1$. Así:

$$\langle r \rangle_{n,n-1} = n(n + 1/2)a_0$$

Si $n = 50$ (para átomos de Rydberg de experimentos tratados en este apéndice):

$$\langle r \rangle_{50,49} = 2500a_0$$

T.3.3. Un modelo aproximado para la interacción fotón-átomo

La interacción fotón-átomo puede aproximarse, en ciertas condiciones, por otra que formalmente es la de un oscilador armónico cuántico con un espín 1/2, como veremos en esta subsección.

Aunque la interacción de fotones con átomos, tratada en general en el capítulo 21, no es simple, en ciertas condiciones puede aproximarse por una teoría mucho más sencilla, denominada modelo de Jaynes-Cummings. En éste se consideran:

- i) Un espacio limitado (por ejemplo, el interior de una cavidad).
- ii) Fotones con un único momento, energía ($\hbar\omega$) y polarización (cabiendo en la longitud de la cavidad exactamente un número entero de longitudes de onda).
- iii) Un átomo con solamente dos estados (el de energía más baja $|f\rangle$ y otro de energía superior $|e\rangle$, denominados «fundamental» y «excitado», respectivamente) interactuando con los fotones, no siendo afectados ninguno de los demás estados atómicos. Puede incluirse o no el movimiento traslacional de todo el átomo en la cavidad.

Los dos estados relevantes $|e\rangle$ y $|f\rangle$ del átomo en las transiciones se representan formalmente como si fuesen los dos estados de un operador de espín cuántico 1/2 (sección 13.4). No se utilizan variables de posición o momento para electrones, pero sí las matrices de Pauli σ_x , σ_y y σ_z (véase [13.4.4]). Las variables dinámicas atómicas se representan formalmente mediante las matrices siguientes:

$$\sigma_3 = \sigma_z, \quad \sigma = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y), \quad \sigma^\dagger = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) \quad [\text{T.3.1}]$$

Los fotones se representan mediante los kets de un oscilador armónico cuántico (véase sección 8.4, Método algebraico). Las variables dinámicas de los fotones son el operador de destrucción a y el de creación a^\dagger .

El hamiltoniano total del modelo de Jaynes-Cummings, extendido de modo que incluya no solamente las transiciones entre los estados «fundamental» y «excitado», sino también el movimiento traslacional de todo el átomo, es:

$$H_{JC} = H_0 + H_1 \quad [\text{T.3.2}]$$

$$H_0 = \hbar\omega a^\dagger a + \frac{\hbar}{2} \Omega \sigma_3 + \frac{P_{at}^2}{2M_{at}} \quad [\text{T.3.3}]$$

$$H_1 = g\sigma a^\dagger + g^* \sigma^\dagger a \quad [\text{T.3.4}]$$

P_{at} y M_{at} son el operador momento y la masa de todo el átomo.

$\Omega = [\text{Energía}(|e\rangle) - \text{Energía}(|f\rangle)]/\hbar$, que es positiva, no coincide necesariamente con ω . Si el átomo se considera muy masivo, al ser M_{at} muy grande, puede omitirse $P_{at}^2/2M_{at}$ y el hamiltoniano resultante corresponde al modelo de Jaynes-Cummings más simple, que no incluye el movimiento traslacional. g es una constante si M_{at} es muy grande (si se excluye el movimiento traslacional). g es una función (compleja, en principio) si se incluye el movimiento traslacional.

Eligiendo g y ω adecuadamente, la dinámica del átomo y de los fotones, al ser emitidos y absorbidos en las transiciones atómicas, es aproximadamente consistente con la teoría del capítulo 21. Y esto es lo interesante: el modelo de Jaynes-Cummings describe la dinámica de un fotón individual en interacción con un átomo individual (con las simplificaciones indicadas), con la aproximación suficiente para dar cuenta de buena parte de los experimentos que trataremos en este apéndice.

T.4. INTERPRETACIÓN ESTADÍSTICA. MEDICIÓN. DECOHERENCIA

T.4.1. REVISITANDO EL EXPERIMENTO DE LA DOBLE RENDIJA

En otras partes de este libro (secciones 6.9, 7.12, 18.1 y 18.5, apéndices F y G) nos hemos referido a copias idénticas de un sistema microscópico conteniendo una o varias partículas para clarificar la interpretación estadística de la función de onda. En esta subsección, el propio sistema cuántico estará constituido por una única partícula.

Como complemento de las secciones 3.2 y 3.6 y apéndices E y F, y del principio de superposición, reanalizaremos brevemente el experimento de la doble rendija, en términos completamente cuánticos.

Consideramos de nuevo la figura 3.1, ahora con una fuente emisora de partículas monoenergéticas (átomos, electrones...) que pasan primeramente a través de una rendija colimadora en la primera pantalla P_1 , luego, a través de una segunda pantalla, P_2 , con dos rendijas abiertas (1 y 2), y llegan finalmente a la tercera pantalla, P_3 . La superficie de P_3 se supone cubierta por una serie de pequeños detectores que registran los impactos de las partículas que les llegan. Se supone también que el flujo de partículas es tan pequeño que la probabilidad de que haya dos o más partículas simultáneamente en la región del espacio entre P_1 y P_3 es completamente despreciable: dicha condición se ha verificado experimentalmente con diversas partículas (átomos...; recuérdense los experimentos con fotones del apéndice E). Cada impacto corresponde a la llegada de una única entidad corpuscular al correspondiente detector. Puede aceptarse que la fuente y la rendija en P_1 generan sucesivamente partículas que, aproximadamente, están todas en el mismo estado. Se considera un gran número de partículas que, sucesivamente, son emitidas por la fuente y llegan a P_3 en las condiciones indicadas. Dicho conjunto de partículas es, por tanto, una serie de copias idénticas (e idénticamente preparadas) del mismo sistema cuántico, formado por una única partícula, siendo aplicables los argu-

mentos probabilísticos en la sección 6.9 y en F.7. Un gran número de llegadas sucesivas individuales a los diversos detectores en P_3 corresponde a una serie de repeticiones de experimentos análogos. Los resultados de los diferentes experimentos con las copias idénticas serán distintos, es decir, detectores diferentes van recibiendo impactos de manera aleatoria. Se genera una distribución de número de impactos en los detectores que habrá de ser sometida al análisis estadístico estándar, con objeto de obtener distribuciones de probabilidad.

Recuérdese que estamos suponiendo que las dos rendijas en P_2 están abiertas. En tal caso, la distribución en P_3 para los números de impactos en los diversos detectores muestra una serie de franjas de tipo interferencial, como las que aparecen en la figura 3.1. Cada partícula que atraviesa el aparato y llega a P_3 está representada por una función de onda superposición lineal $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$. La función de onda Ψ_1 describe el paso de la partícula a través de una de las dos rendijas en P_2 (y Ψ_2 , el paso a través de la otra), y hay una interferencia entre Ψ_1 y Ψ_2 . El número de impactos detectados en una pequeña zona de la pantalla P_3 es proporcional al módulo cuadrado $|\Psi|^2$ en dicha zona.

Una discusión en términos completamente cuánticos de la distribución de impactos en P_3 , cuando solamente una de las dos rendijas está abierta (pero la otra cerrada), seguiría la pauta correspondiente y se omitirá.

T.4.2. Medición e interpretación de Copenhague

Una forma equivalente de expresar el principio de superposición de un sistema cuántico (secciones 6.3 y 6.4 y apéndice B) es la siguiente. Si un estado es superposición lineal de otros estados posibles, se dice que hay coherencia cuántica entre estos últimos. Por ejemplo, la hay entre Ψ_1 y Ψ_2 en T.4.1.

Limitándonos a una idea cualitativa, lo que denominaremos «medio ambiente» (*environment*) es un sistema macroscópicamente grande (con un gran número de grados de libertad) en el que han de tenerse en cuenta diversos aspectos termodinámicos, estadísticos... Un medio ambiente (*MA*) muy habitual y conceptualmente simple está en equilibrio termodinámico a temperatura absoluta T . Si un *MA* está presente, en principio puede influir en la dinámica de otros sistemas (cuánticos, en particular). Y lo habitual es que los últimos sistemas, teniendo muchos menos grados de libertad que el *MA*, no alteren el estado de éste. Un sistema aislado, no sometido a la influencia de ningún *MA*, se denomina «cerrado».

La ecuación de Schrödinger y el principio de superposición son aplicables de manera estricta solamente a sistemas cuánticos aislados de cualquier *MA* (y sin interactuar con ninguno), es decir, cerrados.

Consideremos un estado $|\Psi\rangle$ de un sistema cuántico S , una variable dinámica A de éste y la posibilidad de que una medición de A en $|\Psi\rangle$ (mediante un aparato de medida) dé lugar al resultado a_j (uno de los autovalores de A). Recordando el apéndice B, lo ampliaremos aquí incluyendo los casos de autovalores no degenerados y degenerados. A tal fin, sea P_j el proyector sobre el subespacio de todos los autovectores de A con el mismo autovalor a_j .

La interpretación de Copenhague (enfanzada por N. Bohr y presentada más tarde de forma más asequible por diversos autores, por ejemplo, por A. Messiah, en 1959) postula que inmediatamente después de una medición de A efectuada por un aparato de medida, y dando el resultado a_j , el sistema S está representado por el ket normalizado

$$\frac{P_j|\Psi\rangle}{\langle\Psi|P_j|\Psi\rangle^{1/2}} \quad [\text{T.4.1}]$$

(reducción o colapso del estado $|\Psi\rangle$, debido al proceso de medición): nótese que $P_j \cdot P_j = P_j$. Ello constituye una receta práctica que se ha aplicado, y se continúa aplicando, a la interpretación de los procesos de medición. La consistencia de los análisis resultantes ha confirmado y continúa confirmando, a posteriori, la validez de dicha prescripción.

Otra forma equivalente y conveniente de la prescripción [T.4.1] es la siguiente. Justamente tras una medición de A , dando a_j , el sistema S está representado por el proyector:

$$\frac{P_j|\Psi\rangle\langle\Psi|P_j}{\langle\Psi|P_j|\Psi\rangle}$$

En correspondencia con todas las posibles mediciones de A (cada una de las cuales implicaría un colapso inevitablemente, que tendría lugar cuando se efectuase la medición), es natural considerar la siguiente suma:

$$\sum_j P_j|\Psi\rangle\langle\Psi|P_j \quad [\text{T.4.2}]$$

a la que contribuyen todos los proyectores correspondientes a todos los posibles resultados. Aunque antes de efectuar una medición de A no se conoce qué se obtendría, sí se sabe a priori cuál es el conjunto de todas los posibles alternativas resultantes, que está expresado por [T.4.2]. Ésta contiene la interpretación de Copenhague sobre la medición cuántica (y permitirá una conexión directa con la formulación de la decoherencia en la subsección siguiente). Así, al efectuar una medición de A , dando el resultado a_j , se producirá el colapso a una única contribución de [T.4.2], concretamente, al término

$$P_j|\Psi\rangle\langle\Psi|P_j \quad [\text{T.4.3}]$$

que, salvo normalización, es equivalente a [T.4.1].

No hay nada en [T.4.2] que pueda interpretarse como coherencia cuántica (con interferencia constructiva o destructiva) entre kets asociados a una u otra alternativas que resulte de mediciones. Por el contrario, los diferentes términos que contribuyen a [T.4.2] corresponden a alternativas separadas: una medición produce colapso a un estado o a otro, pero NO hay interferencia constructiva o destructiva entre dichos estados.

La interpretación de Copenhague aceptó que el aparato de medida requerido en cualquier medición debe ser un sistema clásico: su comportamiento, independientemente del de S , debería regirse por la Física Clásica. Durante la medición, el sistema cuántico S no está aislado (ni es cerrado), debido a la acción del aparato de medida. La interpretación de Copenhague no ofrecía ninguna explicación del colapso más allá de postular «que tiene lugar». En este punto debe señalarse un matiz muy importante: el aparato de medida está influido por un medio ambiente MA que está inevitablemente presente (o aquél forma parte inseparable de éste). Este aspecto crucial será analizado en las subsecciones siguientes. Véanse Zurek (1991, 2002 y 2003) y las referencias allí dadas.

Típicamente (y así se ha hecho a lo largo de este libro), la ecuación de Schrödinger se aplica al estudio de sistemas cerrados formados por partículas microscópicas (una, unas pocas o muchas) que pueden interactuar entre sí y/o estar sometidas a potenciales externos; en este último caso, los sistemas físicos externos que crean esos potenciales NO han sido considerados como «un medio ambiente», y ello es consistente. Por otra parte, no debe identificarse «sistema macroscópico» con «sistema clásico», y debe tenerse presente que existen también sistemas macroscópicos en los que se manifiestan fenómenos cuánticos. Entre diversos ejemplos importantes, nos limitaremos a recordar los superconductores en los que se produce el efecto Josephson (involucrando corrientes eléctricas con un número macroscópico de electrones y un efecto túnel genuinamente cuántico).

Diversos sistemas macroscópicos cuánticos (no sometidos a procesos de medición) no están completamente aislados del medio ambiente que les rodea. En tal caso, su comportamiento no está regido exclusivamente por la ecuación de Schrödinger (aplicable únicamente a sistemas cerrados). Véase la subsección T.4.4.

T.4.3. Medición y decoherencia: la influencia del medio ambiente (MA)

Los sistemas cuánticos microscópicos sometidos a procesos de medición (y también diversos sistemas cuánticos macroscópicos) en presencia de un MA sufren una pérdida natural de coherencia cuántica («absorbida» por el MA , o destruida debido a la interacción con éste). Esta pérdida se denomina, genéricamente, decoherencia (más estrictamente, decoherencia cuántica) y, cuando se produce, invalida la aplicación del principio de superposición. En otros términos, dichos sistemas cuánticos microscópicos no sólo no son cerrados debido a la interacción con el aparato de medida, sino también por causa del MA .

La lectura de Zurek (1991, 2002 y 2003) sobre el concepto de decoherencia cuántica es muy recomendable.

En 1932, y con objeto de ir más allá de la interpretación de Copenhague, von Neumann reanalizó el proceso de medición, pero aceptando, desde el comienzo, que el aparato de medida pudiese obedecer también a las leyes de la Mecánica Cuántica; esta idea será uno de los puntos de partida de lo que sigue. Sin embargo, el estudio de von Neumann no contenía explícitamente la noción moderna de la decoherencia cuántica; así, omitiremos sus detalles por brevedad.

Volvamos a un proceso de medición de una variable dinámica A de un sistema cuántico S en el estado $|\Psi\rangle$, siendo a_j el resultado de la medida. La decoherencia en el proceso de medición proporciona una explicación del colapso del estado $|\Psi\rangle$ (sobre el que la interpretación de Copenhague no ofrecía ninguna) y constituye un paso adelante. La idea física de la decoherencia es: el medio ambiente (aceptando que tiene un comportamiento mecano-cuántico) influye de manera esencial en el proceso de medición efectuado sobre el sistema cuántico S , seleccionando justamente el proyector P_j de A correspondiente al autovalor a_j .

A continuación, presentaremos una introducción sencilla a la decoherencia en procesos cuánticos de medición basándonos en los trabajos de Zurek (que trascienden el estudio de von Neumann).

Consideraremos el sistema cuántico S (en el estado $|\Psi\rangle$), el detector o aparato de medida D y un medio ambiente MA . Aceptaremos que:

- i) Por sencillez, el estado $|\Psi\rangle$ de S está en un espacio de Hilbert de dos dimensiones. La variable dinámica A de S toma sólo dos posibles valores, con autovalores distintos a_+ y a_- , en los estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$ (autovectores de A , que forman una base).
- ii) El detector D sigue las leyes de la Mecánica Cuántica, y sus estados se representan mediante kets, en un espacio de Hilbert de dos dimensiones. D puede dar lugar solamente a dos posibles medidas, de modo que puede estar solamente en dos estados $|D, +\rangle$ y $|D, -\rangle$. Por ejemplo, $|D, -\rangle$ es el estado «fundamental» de D , en el que éste estaría de forma natural cuando está no perturbado o antes de efectuar medición alguna.
- iii) El medio ambiente MA sigue también las leyes de la Mecánica Cuántica, y puede estar en una serie de kets $|MA, j\rangle$, en su propio espacio de Hilbert. Este último tiene una dimensión muy grande (o infinita), pues MA contiene muchos grados de libertad (pudiendo tomar el índice j muchos o infinitos valores). Sin pérdida de generalidad, aceptaremos que los $|MA, j\rangle$ están ortonormalizados. Típicamente, en ausencia de mediciones, MA elige estar en un cierto estado (de equilibrio o de estabilidad) $|MA, 0\rangle$.
- iv) Justamente antes de que tenga lugar ninguna correlación (que fuese asociada o pudiese dar lugar a una detección), el estado inicial completo de S , D y MA es: $|in\rangle = [a|+\rangle + b|-\rangle]|D, -\rangle|MA, 0\rangle$. Se supone que los números complejos a y b son tales que $a|+\rangle + b|-\rangle$ está normalizado ($|a|^2 + |b|^2 = 1$). Asociada a la detección que pudiese tener lugar, hay una correlación entre S y D : si inicialmente S está en $|+\rangle$ y D en $|D, -\rangle$ entonces, según dicha correlación, necesariamente S sigue en $|+\rangle$ y D pasa a estar en $|D, +\rangle$. Pero si, inicialmente, S está en $|-\rangle$, entonces, de acuerdo con esa correlación, D continúa en $|D, -\rangle$. En consecuencia, como resultado de la correlación entre S y D (y si no la hubiera entre D y MA), se tendría el estado $[a|+\rangle|D, +\rangle + b|-\rangle|D, -\rangle]|MA, 0\rangle$.
- v) D y MA están también correlacionados, de modo que, al producirse el acoplamiento indicado en iv), si D pasa a estar en $|D, +\rangle$, entonces MA estará en un estado $|MA, +\rangle$ contenido en un subconjunto de estados $(\dots, |MA, +j\rangle, \dots)$ correlacionados con $|D, +\rangle$. Y si D está en $|D, -\rangle$, debido a dicho acoplamiento, MA

estará en otro estado $|MA, -\rangle$ contenido en otro subconjunto $(\dots, |MA, -j\rangle, \dots)$ correlacionado con $|D, -\rangle$. Es crucial aceptar que cualquier estado perteneciente al subespacio $(\dots, |MA, +j\rangle, \dots)$ es ortogonal a cualquier estado en el subespacio $(\dots, |MA, -j\rangle, \dots)$ (subespacios ortogonales).

En consecuencia, como resultado conjunto de las correlaciones entre S y D y entre D y MA , se tendría el estado $a|+\rangle|D, +\rangle|MA, +\rangle + b|-\rangle|D, -\rangle|MA, -\rangle = |fin\rangle$.

De forma equivalente, se puede afirmar que, tras esas dos correlaciones, el sistema estaría representado, por el proyector:

$$\begin{aligned}
 |fin\rangle\langle fin| &= [a|+\rangle|D, +\rangle|MA, +\rangle + b|-\rangle|D, -\rangle|MA, -\rangle] \cdot \\
 &[a^*\langle +|\langle D, +|\langle MA, +| + b^*\langle -|\langle D, -|\langle MA, -|] = [a|+\rangle|D, +\rangle|MA, +\rangle][a^*\langle +|\langle D, +|\langle MA, +| + \\
 &[a|+\rangle|D, +\rangle|MA, +\rangle][b^*\langle -|\langle D, -|\langle MA, -|] + [b|-\rangle|D, -\rangle|MA, -\rangle][a^*\langle +|\langle D, +|\langle MA, +| + \\
 &[b|-\rangle|D, -\rangle|MA, -\rangle][b^*\langle -|\langle D, -|\langle MA, -|] \quad [T.4.4]
 \end{aligned}$$

En este punto aceptaremos que esas correlaciones entre S y D y entre D y MA están inevitable y efectivamente asociadas a una posible medición de A dando a_+ o a_- , y eso, como veremos, dará lugar al colapso.

Físicamente, se puede argüir que, en un posible proceso de medición de A , hay una ignorancia completa sobre los grados de libertad de MA . Es como si, implícitamente, se realizase una especie de promedio sobre todos los grados de libertad (ni controlados ni medidos) de MA . Así pues, puede interpretarse que, en dicha medición de A , se efectúa automáticamente el siguiente promedio:

$$\sum_{\{MA, j\}} \langle MA, j | fin \rangle \langle fin | MA, j \rangle \quad [T.4.5]$$

donde se suma sobre todos los posibles estados $|MA, j\rangle$ de MA (entre los que se incluyen los $|MA, +\rangle$ y $|MA, -\rangle$). Al tener en cuenta [T.4.4], se ve que en dichos promedios aparecen $\langle MA, j | MA, -\rangle$, $\langle MA, j | MA, +\rangle$, $\langle MA, + | MA, j \rangle$ y $\langle MA, - | MA, j \rangle$. Nótese que $\langle MA, j | MA, +\rangle$ es distinto de 0 sólo si $|MA, j\rangle = |MA, +\rangle$; $\langle MA, j | MA, -\rangle$ es distinto de 0 sólo si $|MA, j\rangle = |MA, -\rangle$, y que $|MA, -\rangle$ y $|MA, +\rangle$ están en subespacios ortogonales. Por tanto, el producto $\langle MA, j | MA, -\rangle \langle MA, + | MA, j \rangle = 0$, para cualquier $|MA, j\rangle$, y el promedio en [T.4.5] genera la decoherencia.

Así, los diversos posibles procesos reales de medición de A , en los que se promediase sobre todos los grados de libertad de MA , en vez del proyector $|fin\rangle\langle fin|$, vendrían representados por:

$$|a|^2|+\rangle\langle +| \cdot |D, +\rangle\langle D, +| + |b|^2|-\rangle\langle -| \cdot |D, -\rangle\langle D, -| \quad [T.4.6]$$

que tiene la estructura de una suma de proyectores y puede compararse con la ecuación [T.4.2]. En efecto, a los posibles $P_j|\Psi\rangle\langle\Psi|P_j$ en la ecuación [T.4.2] corresponden ahora

$|a|^2|+\rangle\langle+|$ y $|b|^2|-\rangle\langle-|$. Y aparecen en el caso [T.4.6] actual los estados del detector correlacionados con los de S : $|D, +\rangle\langle D, +|$ y $|D, -\rangle\langle D, -|$ asociados a $|a|^2|+\rangle\langle+|$ y a $|b|^2|-\rangle\langle-|$, respectivamente. Al efectuar una medición concreta en la que, por ejemplo, el detector D pasa a estar en el estado $|D, +\rangle$ el sistema S está ciertamente en un único término, a saber, $|a|^2|+\rangle\langle+|$. Entonces, podría decirse que, de forma efectiva, se ha producido un colapso al estado $|+\rangle\langle+|$..., y lo nuevo es que se tiene un mecanismo que lo explica: el medio ambiente MA (el promedio sobre sus grados de libertad ni controlados ni medidos) destruye las posibles coherencias de (y genera la decoherencia de) los estados del detector D y hace que cada uno de estos lleve asociado un estado determinado del sistema, sin coherencias entre los últimos.

En términos técnicos, se dice que se toma la traza sobre todos los grados de libertad de MA en [T.4.5], y que la expresión [T.4.6] es la matriz densidad que representa los diversos posibles estados inmediatamente después de la medición.

Generalizando, una medición concreta del observable A de S en el estado $|\Psi\rangle$ (normalizado) dando lugar al resultado a_i en el detector D , indica que éste está en un cierto estado $|D_i\rangle$ correlacionado con P_i . Ello induce (debido a la correlación de D con MA y a la traza sobre todos los grados de libertad, no medidos, de éste) que el sistema S , justo tras la medición, esté en el estado $P_i|\Psi\rangle$. Ello es consistente con la receta práctica de la interpretación de Copenhague y permite mejorar ésta, al incluir los estados de D correlacionados con los de S . Así, la generalización de [T.4.6] es:

$$\sum_j |D_j\rangle\langle D_j| P_j |\Psi\rangle\langle\Psi| P_j \quad [\text{T.4.7}]$$

Es fácil ver que [T.4.7] se reduce a [T.4.6] para el modelo simple caracterizado por las hipótesis i)-v). Véase Haroche y Raymond (2007).

T.4.4. Decoherencia: otros aspectos

Discutiremos aspectos complementarios cuando un sistema cuántico S está en presencia de (e interacciona con) un MA , descrito también mediante la Mecánica Cuántica, sin necesidad de considerar además un aparato de medida D ni una medición. El sistema S no es cerrado debido a la interacción con el MA .

La interacción de S con MA crea correlaciones entre los estados de S y los del MA : tales correlaciones hacen que los estados del MA lleven información acerca de los de S . Para cierta clase de interacciones entre S y MA , es como si el segundo se comportase, de forma efectiva, como un detector que llevase a cabo mediciones indirectas sobre S ..., incluso en ausencia de aparatos D que las hubiesen realizado explícitamente. En tales condiciones, un proceso o manipulación física que, a efectos prácticos, equivalga a promediar sobre el gran número de grados de libertad de MA (ignorándolos) puede producir que las interferencias en un cierto conjunto de estados de S se destruyan en la evolución temporal (de manera muy rápida o casi instantánea): en tal caso, dichos estados pueden adquirir una estabilidad muy fuerte. Esta destrucción dinámica de coherencias cuánticas entre estados de S , debida

a la interacción con el MA , es otra manifestación del fenómeno de decoherencia cuántica. Ésta suprime así, de forma práctica, los efectos del principio de superposición (y lleva a cabo la selección dinámica) de un conjunto de estados cuánticos distinguidos de S .

Si un sistema cuántico S está representado por una superposición lineal de estados $|\Psi\rangle_j$, como, por ejemplo, $\sum |\Psi\rangle_j$, hay una probabilidad no nula de que S pueda estar en cualquiera de los $|\Psi\rangle_j$. Sin embargo, si en ciertas condiciones ocurre que S está solamente en un cierto estado determinado $|\Psi\rangle_0$, con probabilidades nulas (o enormemente pequeñas) de encontrarse en cualquier otro estado o en superposiciones lineales de otros estados, es lógico inferir que, de algún modo, ha tenido lugar una selección de $|\Psi\rangle_0$. ¿Cómo se ha efectuado esa selección? La noción de decoherencia proporciona un posible mecanismo de selección muy natural. Si se acepta que S no está aislado totalmente, sino que está en presencia de un cierto medio ambiente MA , la interacción con este último puede generar una decoherencia entre los posibles estados de S que al final conduzca a la selección del único estado $|\Psi\rangle_0$. Generalizaremos estos conceptos en el párrafo siguiente. Es como si, en la práctica, la coherencia cuántica de S desapareciese absorbida por el MA .

No todas las superposiciones de kets son tratadas en pie de igualdad por la decoherencia debida a un MA . Las interacciones con un MA típicamente singularizan un cierto subconjunto de estados («estados preferidos») en S . Estos «estados preferidos» resultan ser individualmente muy estables frente a los efectos del MA . Debido a la interacción con éste se destruyen las interferencias (las coherencias de fase) de cualquier superposición lineal de los «estados preferidos», con frecuencia muy rápidamente. Debido a esa destrucción de las interferencias, es como si los «estados preferidos» tuviesen propiedades típicas de las situaciones clásicas.

Los «estados preferidos» son aquellos en los que puede encontrarse el sistema cuántico justamente después de un proceso de medición en presencia de un MA .

La decoherencia (genuinamente cuántica) aquí discutida no debe identificarse con la decoherencia debida a ruido producido en un sistema, al ser perturbado por un medio ambiente. Algunos matices que marcan la diferencia pueden verse en Zurek (2003); véase también Haroche y Raymond (2007).

Nótese, a posteriori, que en el recordatorio en la subsección T.4.1 no se introdujeron (por no ser necesarios) ningún MA ni tampoco la decoherencia.

T.4.5. Modelos para un MA cuántico y su interacción con un sistema cuántico S

Un modelo manejable para un MA (cuántico, de los aquí considerados) asimila éste a un enorme número R de osciladores armónicos cuánticos con diferentes frecuencias $\omega_{MA,r}$ ($r = 1, 2, \dots, R$) y enteramente desacoplados entre sí. Cada oscilador lleva sus correspondientes operadores de creación y destrucción ($a_{MA,r}^\dagger, a_{MA,r}$). El hamiltoniano $H_{MA,r}$ del oscilador r -ésimo es análogo al dado en [8.4.10] y [8.4.11], y el hamiltoniano total del MA es

$$H_{MA} = \sum_{r=1}^R H_{MA,r}$$

Físicamente, los R osciladores pueden describir fotones, fonones... El conjunto de todos los R osciladores se supone en equilibrio termodinámico a temperatura absoluta T . La estadística cuántica del conjunto de osciladores (suponiendo que tienen carácter bosónico) se desarrollaría a partir de las subsecciones 17.2 o 17.3: por brevedad, la omitiremos. La interacción entre el MA y el sistema cuántico S puede modelizarse, por ejemplo, mediante un hamiltoniano de interacción

$$H_{\{I;MA,S\}} = \sum_{r=1}^R [c_r a_{MA,r} + c_r^* a_{MA,r}^\dagger] X$$

donde las c_r son ciertas constantes (en principio, complejas), características del modelo, y X es cierta variable mecano-cuántica (operador autoadjunto) de S .

Una posible clase de modelos considera un sistema S formado por una partícula cuántica unidimensional con posición x , sometida a un potencial $V(x)$, y con un hamiltoniano H_S que es la versión unidimensional del que aparece en [7.10.5]. Al incluir la interacción con un MA cuántico como el descrito en esta subsección, el hamiltoniano total para S en interacción con MA es:

$$H = H_S + H_{MA} + H_{\{I;MA,S\}}$$

Es necesario especificar la variable mecano-cuántica X y las constantes c_r . Una elección sencilla y posible es $X = x$ y $c_r = c_r^*$. En tal caso, el modelo resultante se conoce como movimiento Browniano cuántico o, también, como modelo de Caldeira y Leggett, que ha sido objeto de amplio estudio.

Un sistema cuántico S muy interesante y estudiado es el formado por un átomo y fotones, con las aproximaciones descritas en la subsección T.3.3. En tal caso, el modelo aproximado que lo describe es el de Jaynes-Cummings, con hamiltoniano H_{JC} . Al incluir la interacción con un MA cuántico como el descrito en esta subsección T.4.3, el hamiltoniano total para S en interacción con MA es:

$$H = H_{JC} + H_{MA} + H_{\{I;MA,S\}}$$

En el actual contexto de modelos simplificados para la decoherencia, hay dos variantes muy simples del modelo del átomo interaccionando con fotones, muy estudiadas y utilizadas. La primera variante consiste en tomar para S únicamente el átomo, reducido a un sistema de solamente dos niveles (es decir, formalmente a un espín $1/2$), omitiendo los fotones. La segunda variante corresponde a lo contrario, es decir, únicamente a considerar los fotones, omitiendo los estados atómicos. Véanse Breuer y Petruccione (2006) y Joos et al. (2003).

Al efectuar el promedio (técnicamente, al tomar la traza) sobre todos los grados de libertad de MA , se obtiene, según sea el caso, un modelo para una partícula cuántica unidimensional con posición x , sometida a un potencial $V(x)$ o uno para un átomo interaccionando con fotones. Véanse Breuer y Petruccione (2006), Joos et al. (2003) y Haroche y Raymond (2007). Los modelos resultantes describen de forma aproximada los efectos de la decoherencia cuántica.

T.5. EL GATO DE SCHRÖDINGER

T.5.1. La paradoja

En 1935, Schrödinger imaginó un cierto sistema que planteó cuestiones muy básicas acerca de la transición entre los diferentes comportamientos en los regímenes cuántico y clásico. En aquella época, e incluso durante varias décadas después, fue imposible dilucidar las cuestiones planteadas por Schrödinger mediante ningún experimento realizable con los medios disponibles.

Sea un sistema S compuesto por dos subsistemas A (genuinamente cuántico) y B (que puede estar en estados que podrían corresponder a situaciones macroscópicas). A tiene dos estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$ y una cierta interacción interna que hace que el estado $|+\rangle$ pase, necesariamente, al estado $|-\rangle$ al cabo de un cierto tiempo T (adecuadamente largo).

Supondremos que:

1. Los estados relevantes de B son dos: $|V\rangle$ y $|M\rangle$.
2. Hay un cierto mecanismo o acoplamiento aproximado entre A y B , de modo que si A está en $|+\rangle$, entonces B está en $|V\rangle$, en tanto que si A está en $|-\rangle$, B ha de estar en $|M\rangle$.
3. En el instante inicial $t = 0$, el sistema S se encuentra en el estado producto $|+\rangle|V\rangle$. En tales condiciones, un estudio mecano-cuántico directo indica que, en un cierto tiempo intermedio (por ejemplo, al cabo del tiempo $T/2$), el sistema S (supuesto aislado o cerrado) se encuentra, al menos aproximadamente, en el estado: $|+\rangle|V\rangle + |-\rangle|M\rangle$. Esta superposición lineal de estados producto es un ejemplo de estado entrelazado (recuérdese el apéndice R) y constituye un marco muy interesante para discutir la transición entre los regímenes cuántico y clásico.

En el ejemplo imaginado por Schrödinger, A es un átomo radioactivo, siendo $|+\rangle$ y $|-\rangle$ el estado inestable antes de la desintegración (debida a la interacción interna arriba mencionada) y el estado final que resulta tras aquélla, respectivamente. B es un gato: un sistema genuinamente macroscópico, en este ejemplo. $|V\rangle$ y $|M\rangle$ representan estados en los que el gato está vivo y muerto, respectivamente. En una descripción muy somera: el mecanismo que acopla A con B implica que la desintegración radioactiva libera un veneno que produce la muerte del gato.

Después de la desintegración del átomo (en el instante T), el estado final del sistema compuesto S es: $|-\rangle|M\rangle$. Si entre $t = 0$ y $t = T$, un observador externo midiese y encontrase que el átomo no se ha desintegrado, entonces el gato estaría vivo, y al revés: habría tenido lugar un colapso.

El estudio mecano-cuántico directo muestra que en un instante intermedio (por ejemplo, en el tiempo $T/2$), a condición de que ningún observador externo haya realizado medidas, el sistema está en $|+\rangle|V\rangle + |-\rangle|M\rangle$, es decir, en una superposición lineal de gato vivo y gato muerto, ¡que choca con la intuición! Y la cuestión básica es: ¿es posible que, a lo largo de la evolución temporal, y en ausencia de un observador externo que midiese,

dejase S de estar representado por dicha superposición lineal y estuviese necesariamente en $|+\rangle|V\rangle$ o bien en $|-\rangle|M\rangle$? Si eso no ocurriese (contrariamente a la intuición y a la experiencia en el mundo macroscópico), se tendría la llamada paradoja del gato de Schrödinger. Esta última es equivalente a una cuestión básica acerca de la transición entre los regímenes cuántico y clásico.

T.5.2. Decoherencia debida al MA como solución a la paradoja del gato de Schrödinger

El análisis de la subsección anterior fue incompleto por no haber tenido en cuenta que una descripción menos idealizada debería incluir, además, un medio ambiente (MA) y los efectos que éste produce, a saber, decoherencia cuántica. En efecto, es más realista incluir un medio ambiente, en el sentido descrito anteriormente (es decir, cuántico) acoplado al subsistema B , de modo que el sistema completo está ahora constituido por A , B y MA . En tal caso, ni A ni B constituyen sistemas cerrados. Y son el acoplamiento de B con MA , el gran número de grados de libertad de MA y el promedio (la traza) sobre éstos los que, en la evolución temporal, producen la destrucción de las coherencias cuánticas que dieron lugar a la paradoja.

Entonces, $|+\rangle|V\rangle + |-\rangle|M\rangle$ en un cierto tiempo intermedio es una sobresimplificación que ya no da cuenta de manera adecuada del estado de A y B , y es, por tanto, físicamente no adecuada. Por analogía con [T.4.6], en el caso actual del gato de Schrödinger la descripción físicamente correcta del subsistema formado por A y B es la suma de los proyectores siguientes: $|+\rangle\langle+| \cdot |V\rangle\langle V|$ y $|-\rangle\langle-| \cdot |M\rangle\langle M|$. Es decir, ya NO hay superposición de gato vivo y muerto: ahora el gato está vivo o muerto. En las secciones siguientes, trataremos someramente diversos experimentos de tipo «gato de Schrödinger».

T.6. EXPERIMENTOS REALES CON SISTEMAS INDIVIDUALES

Uno de los propósitos centrales de este apéndice es resumir ciertos experimentos realizados directamente en las últimas décadas con determinados sistemas S , formado cada cual por uno o unos pocos átomos o iones individuales y uno o varios fotones individuales. Es decir, ahora lo genuinamente novedoso será que cada sistema individual contendrá una o unas pocas partículas individuales. En cada caso, se supondrá sin necesidad de recordarlo, que en los experimentos habrá un gran número de copias idénticas del sistema en el estado en estudio, que aquellos se repetirán muchas veces para generar distribuciones estadísticas y que los análisis se llevan a cabo según las pautas indicadas (por ejemplo, en las secciones 6.9, 18.1, apéndice F, en especial F.7, y apéndice G y subsección T.4.1). En todos los casos, los resultados de los experimentos refuerzan y confirman la interpretación probabilística estándar de la Física Cuántica. Es decir, los experimentos detectan y ponen de manifiesto efectos cuánticos al nivel de una o unas pocas partículas individuales.

Diversos físicos (en particular, Bohr, Einstein y Schrödinger), en la década de 1920 y en otras posteriores, trataron posibles experimentos «idealizados» en los que intervenían sistemas individuales (uno o unos pocos electrones, fotones, átomos...) con objeto de establecer y clarificar diversas ideas básicas de la Física Cuántica, tal como han llegado a la actualidad y se han resumido en este libro. Entonces no cabía imaginar que tales experimentos «idealizados» (*thought experiments*) con sistemas individuales llegasen a ser realizables. Diversos avances, enormemente importantes, de las últimas décadas (entre ellos, las trampas de iones, los enfriamientos mediante luz láser, las cavidades ópticas y de microondas...) han permitido llevar a cabo versiones realistas de tales experimentos «idealizados». Y, tan importante o más: las realizaciones de dichos experimentos han confirmado, de nuevo, la validez de las leyes de la Física Cuántica. Aunque dichos experimentos han sido realizados, por seguir una terminología ya establecida continuaremos refiriéndonos a ellos como «idealizados».

Las realizaciones de estos experimentos «idealizados» se han basado en que ha sido posible detectar sistemas individuales (uno o unos pocos electrones, fotones, átomos...) sin que se escapen fuera de control o sean destruidos durante un intervalo de tiempo adecuado. Es decir, una vez que el sistema individual ha sido detectado, su permanencia o su supervivencia han permitido volver a detectarlo posteriormente algunas (o un cierto número de) veces más..., o someterlo a alguna operación o manipulación después de la primera medición. Éstos son aspectos cruciales de los experimentos «idealizados» realizados, en comparación con los experimentos de hace bastantes décadas..., en los que la detección implicaba deslocalización o destrucción y/o imposibilidad de detección repetida y/o manipulación. Las posibilidades de control sobre los sistemas individuales mejoran al disminuir el número de partículas que éstos contienen.

T.6.1. Manipulación de iones individuales atrapados

El propósito de estos experimentos es actuar de forma controlada (es decir, manipular) iones individuales. Ello ha sido posible gracias a los formidables avances tratados en T.1 y T.2.

En una región espacial tridimensional, en un vacío muy elevado, se construyeron trampas armónicas combinando un campo eléctrico y uno magnético estáticos (trampa de Penning), o bien sendos campos eléctricos, uno estático y otro oscilatorio (trampa de Paul); véase la sección T.1 en este apéndice. Dichas trampas permitieron capturar y mantener atrapado un ión (habiendo sido posible también construir trampas que han permitido atrapar unos pocos iones distribuidos a la largo de una región, con forma aproximada de segmento). Los iones utilizados fueron, sucesivamente, $^{24}\text{Mg}^+$, Ba^+ , $^{199}\text{Hg}^+$ y $^{198}\text{Hg}^+$; por ejemplo, un simple ión de Ba^+ en una trampa de Paul, uno de $^{24}\text{Mg}^+$ en una de Penning, uno de $^{199}\text{Hg}^+$ en una de Paul...

Un ión atrapado está sometido a campos externos y tiene grados de libertad, que están cuantificados. Los estados cuantificados (discretizados) correspondientes a esos grados de libertad del ión atrapado en el campo externo son de dos tipos: vibracionales (movimiento oscilatorio global del ión) y electrónicos. Recuérdense la discusión en T.2. Esa cuantificación se pone de manifiesto experimentalmente con mayor claridad a temperaturas adecuadamente bajas.

Los estados vibracionales del ión son formalmente análogos a los de un oscilador armónico cuántico estudiados en la sección 27.4 y se representan mediante $|n\rangle$ (siendo $n = 1, 2, \dots$, el número cuántico vibracional). Pero debe notarse la siguiente diferencia conceptual importante. En el caso de las moléculas diatómicas (sección 27.4), no hay ningún campo externo sobre la molécula: la partícula ficticia asociada a la posición relativa de los dos núcleos «ve» un potencial efectivo generado por la energía electrónica de la molécula (siendo los correspondientes estados cuánticos, aproximadamente, los de un oscilador armónico cuántico).

Los grados de libertad electrónicos del ión atrapado se representan por estados atómicos, con transiciones entre ellos. En los casos habituales, que corresponden a los experimentos que trataremos, las transiciones dominantes son debidas solamente a dos estados atómicos. Así pues, se pueden asimilar los últimos a los dos estados de un espín $1/2$, formalmente.

En el caso actual de los iones atrapados, la evolución de los grados de libertad vibracionales y electrónicos puede describirse aproximadamente mediante modelos de tipo Jaynes-Cummings (subsección T.3.3).

Un ión atrapado puede interactuar, además, con un haz de radiación electromagnética incidente (luz láser). Tienen lugar fenómenos de absorción de luz por el ión, en los que éste salta de unos estados a otros, y de reemisión de luz, que generan nuevas transiciones. Así, la interacción con luz láser acopla los diferentes estados cuánticos del ión. La detección (mediante el ojo o una cámara CCD) de la radiación emitida en las transiciones ópticas permite una observación directa del ión.

Mencionaremos el siguiente importante experimento de atrapamiento y control de transiciones entre estados con el ión $^{199}\text{Hg}^+$ (Bergquist, 1986). Véase la figura T.3.

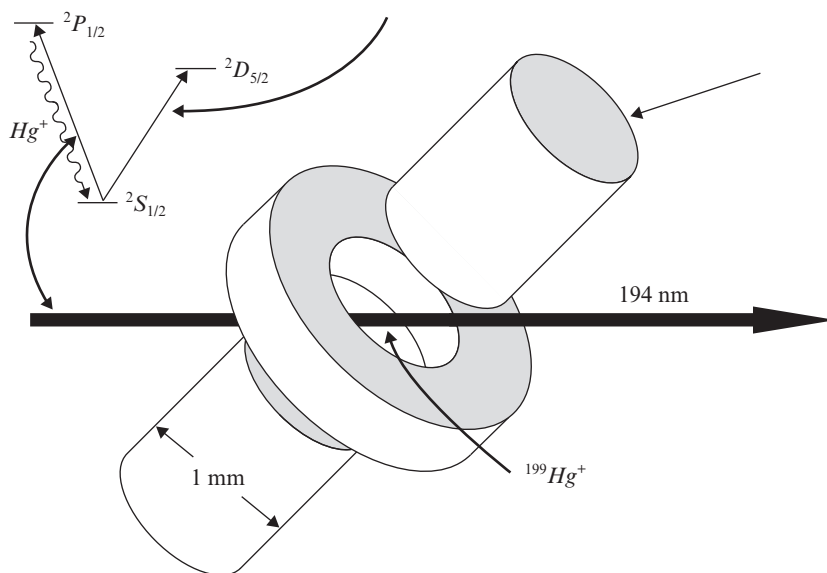


Figura T.3. Experimento con un solo ión.

Se utilizó una trampa de Paul casi armónica (con un potencial variable con el tiempo, de radiofrecuencia) creada a partir de un electrodo de anillo y otros dos electrodos (*end-caps*). Los estados electrónicos relevantes del ión $^{199}\text{Hg}^+$ eran $^2\text{S}_{1/2}$ (el «fundamental», $|f\rangle$), $^2\text{D}_{5/2}$ (el «excitado», $|e\rangle$) y el estado $^2\text{P}_{1/2}$ que desempeña, por otro lado, un papel en el enfriamiento láser (por efecto Doppler). En la correspondiente transición de $^2\text{P}_{1/2}$ a $^2\text{S}_{1/2}$, se emiten fotones (denominados «fluorescentes») con longitud de onda 194 nm, que se detectan: en un régimen de funcionamiento estacionario, los fotones «fluorescentes» pueden ser empleados para obtener una imagen del ión. Por otra parte, se puede aplicar otro pulso de láser con longitud de onda 282 nm al ión produciendo una transición desde $^2\text{S}_{1/2}$ hasta $^2\text{D}_{5/2}$. Estas transiciones producen una variación muy apreciable en la detección de la radiación «fluorescente» (con longitud de onda 194 nm). Específicamente, lo que se observa ahora NO es una disminución gradual de la radiación «fluorescente», sino variaciones bruscas en la detección de ésta: unas veces detección completa, y otras ausencia de detección (cuando justamente se está produciendo la transición desde $^2\text{S}_{1/2}$ hasta $^2\text{D}_{5/2}$). Es decir, la variación de la radiación «fluorescente» con longitud de onda 194 nm detectada da cuenta de cuándo se están produciendo los saltos cuánticos desde $^2\text{S}_{1/2}$ hasta $^2\text{D}_{5/2}$. Para una discusión más detallada, que incluye algunas transiciones a estados vibracionales (no mencionadas, por sencillez), véase Wineland (2013).

Por último, resumiremos el siguiente experimento importante de manipulación de un ión, en el que se transformaron superposiciones de estados atómicos en superposiciones de estados vibracionales Monroe (1995).

La idea del experimento fue la siguiente. Considérese un ión atrapado mediante enfriamiento láser, en el estado electrónico $|f\rangle$ y, a la vez, en el estado vibracional más bajo ($|0\rangle$). Mediante la aplicación de otro pulso de luz láser (con fotones de energía igual a la diferencia de energías entre $|e\rangle$ y $|f\rangle$), que sólo afecta a los estados atómicos sin alterar el estado vibracional ($|0\rangle$), el ión pasa a estar en el estado $[a|f\rangle + b|e\rangle]|0\rangle$, siendo a y b amplitudes complejas. La aplicación de otro pulso láser (denominado «*red sideband*», con fotones de energía igual a la diferencia de energías entre $|e\rangle$ y $|f\rangle$ menos la energía de un cuanto vibracional) y sin alterar $|f\rangle|0\rangle$, permite transformar $|e\rangle|0\rangle$ en $|f\rangle|1\rangle$. Por tanto, el estado final resultante para el ión es: $|f\rangle[a|0\rangle + b|1\rangle]$. Compárese con la discusión del *resolved sideband cooling*, en la sección T.2.

El resultado de esta manipulación es que una superposición de estados atómicos ($|f\rangle$ y $|e\rangle$) con amplitudes a y b se convierte en una superposición de estados vibracionales ($|0\rangle$ y $|1\rangle$), con las mismas amplitudes a y b .

D. J. Wineland recibió el Premio Nobel de Física de 2012.

T.6.2. Manipulación de fotones individuales en cavidades

El propósito es actuar de forma controlada, es decir, manipular los fotones, en el dominio de las microondas, mientras «viven» en la cavidad, sin destruirlos ni absorberlos durante los experimentos. Durante ese tiempo de «vida», se evita cuidadosamente que los fotones participen en cualquier posible fenómeno del tipo efecto fotoeléctrico (en el que desaparecerían, dando lugar a corrientes eléctricas). Finalmente, e inevitablemente, los

fotones desaparecerán de la cavidad..., pero ello ocurrirá después de la manipulación y no será como consecuencia directa de ésta.

Nos limitaremos a describir ciertos experimentos que alcanzaron un alto nivel de precisión hacia el año 2006. Véase la figura T.4 y Haroche (2013).

Los experimentos emplean cavidades de microondas, C , formadas por dos espejos esféricos separados entre sí una distancia d (unos pocos centímetros). Los espejos están formados por cobre (Cu) con una delgada capa de un material superconductor (niobio, Nb). La cavidad se mantiene a temperaturas muy bajas (inferiores a 1 °K, por ejemplo 0.8 °K). La cavidad es tal que la probabilidad de persistencia de la radiación electromagnética en ella, sin ser absorbida, es muy grande: esta importante propiedad se expresa técnicamente diciendo que la cavidad tiene un parámetro Q muy elevado (del orden de 10^{10}). Ello implica que un fotón con frecuencia de microondas existe en la cavidad, sin desaparecer o ser absorbido, durante un tiempo relativamente muy largo (del orden de 130 milisegundos o algo más), reflejándose un enorme número de veces en las paredes internas de la cavidad (con un recorrido total que equivale a una distancia del orden de 40 000 km). Ello permite que varios miles de iones puedan atravesar la cavidad (de uno en uno), e interactuar con dicho fotón. Los fotones se generan por medio de una fuente de luz coherente y son transmitidos (por medio de una guía de ondas) de uno en uno a la cavidad de microondas, donde quedan atrapados.

En los experimentos, los iones son preparados y manipulados en ciertos estados de Rydberg. Estos últimos, típicamente, corresponden a número cuántico principal $n = 50$ (con momento angular orbital $l = 49$ y tercera componente de éste igual, en valor absoluto, a 49). En las condiciones de los experimentos, solamente es necesario tener en cuenta dos estados del ión (no siendo afectado ninguno de los demás): el de energía más baja o «fundamental» $|f\rangle$ es ahora el arriba descrito (con $n = 50$) y hay otro de energía superior o «excitado» $|e\rangle$ (otro estado de Rydberg con $n = 51$, con momento angular orbital $l = 50$ y tercera componente de éste igual, en valor absoluto, a 50). La ventaja de utilizar estados

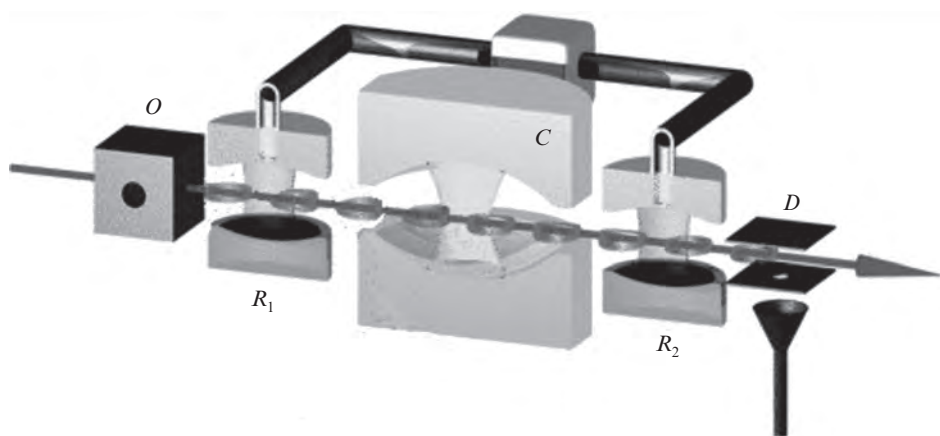


Figura T.4. Experimento con un solo fotón.

de máximo momento angular orbital l en comparación con los de pequeño l (para n dado) es que los primeros pueden existir durante tiempos relativamente largos (comparables a las duraciones de «vida» de los fotones en la cavidad C).

Iones (de rubidio, Rb) son inicialmente preparados (mediante la acción de un láser) en el estado de Rydberg $|e\rangle$ (en la parte O de la figura T.4).

A continuación, en la cavidad R_1 , los iones de Rb previamente preparados en el estado $|e\rangle$, pasan a estar (mediante la acción de otro láser) en una superposición lineal de los estados de Rydberg $|f\rangle$ y $|e\rangle$: $|f\rangle + |e\rangle$ (figura T.4).

Posteriormente, los iones son enviados de uno en uno a través de la cavidad C (figura T.4).

Cada ión interacciona fuertemente con la radiación electromagnética (el fotón «vivo») en el interior de la cavidad. Las velocidades de los iones están muy controladas, de modo que también lo están las duraciones de sus interacciones con la radiación.

Es crucial que las energías de las transiciones atómicas de los iones (entre los estados de Rydberg con $n = 50$ y $n = 51$) estén muy próximas a la energía del fotón atrapado en la cavidad C , pero que NO coincidan con ella. En consecuencia, los iones que atraviesan la cavidad C ni absorben ni pueden emitir el fotón que hay en ella. Y en la descripción de dicha interacción se emplea el modelo aproximado de Jaynes-Cummings de la subsección T.3.3. El efecto neto de la intensa interacción entre el fotón y los iones es producir desplazamientos en los niveles de energía de los últimos (precisamente, los desplazamientos mencionados previamente en la subsección T.3.1). El estado del ión tras haber atravesado C es: $|f\rangle + e^{i\varphi}|e\rangle$, donde φ es la fase acumulada como resultado de dicha interacción al atravesar C .

Tras haber atravesado C , se actúa sobre el estado del ión en la cavidad R_2 mediante otro haz láser adecuado (técnicamente conocido como un pulso « $\pi/2$ ») (figura T.4).

El estado en que entonces se encuentra el ión, tras haber atravesado R_2 , es analizado por medio del detector (de ionización) D (figura T.4).

La detección de un ión en D permite medir (gracias a la fase φ) el número de fotones en la cavidad C que interaccionaron con él: específicamente si, en C , no hubo ningún fotón (si $\varphi = 0$) o hubo uno (si $\varphi = \pi$). En el primer caso, el ión que sale de C está en $|f\rangle$, y en el segundo en $|e\rangle$.

Ha sido posible extender estos experimentos al caso en que hay unos pocos fotones en el interior de C .

S. Haroche recibió el Premio Nobel de Física de 2012.

T.7. TESTS EXPERIMENTALES DE LA DECOHERENCIA CUÁNTICA

Diversos experimentos con sistemas cuánticos individuales, sometidos a la influencia de un MA , han sido específicamente consistentes con las ideas básicas acerca de cómo, en la evolución temporal, un sistema cuántico deja de estar en una superposición lineal de estados pasando a estar necesariamente en uno único, con pérdida de la coherencia cuántica.

tica. Dichos experimentos han sido consistentes con la noción de decoherencia, discutida de forma elemental en este apéndice. Los experimentos han sido interpretados como una clase de «gatos de Schrödinger»: eso ha ocurrido, de forma natural, con manipulaciones de iones y fotones, que han constituido extensiones de lo tratado en las subsecciones T.6.1 y T.6.2. En los análisis de los experimentos se han empleado los modelos aproximados para la decoherencia cuántica mencionados en T.4.5, concretamente aquellos en los que S se describe mediante el modelo de Jaynes-Cummings (y sus simplificaciones, o un átomo a dos niveles o bien un fotón). Dichos modelos permiten analizar en los experimentos, de forma accesible, cierta función y su evolución temporal. Esto último puede interpretarse como una caracterización cuantitativa de la decoherencia cuántica. A continuación, resumiremos algunos de ellos. Estudios detallados de los MA correspondientes y de la decoherencia cuántica resultante pueden verse en Haroche y Raymond (2007).

T.7.1. Tests manipulando iones atrapados mediante radiación

Se realizaron experimentos con iones atrapados; véase Turchette et al. (2000). Recordando la formulación en la subsección T.5.1, los estados del subsistema A son los electrónicos de un ión individual (dos estados atómicos, asimilables a los dos estados de un espín $1/2$, formalmente), y los del sistema B corresponden a las vibraciones (que, en determinadas condiciones, permiten conectar con descripciones clásicas). Así, los dos estados atómicos corresponden al «átomo radioactivo» y las vibraciones al «gato». Se crearon estados tipo «gato de Schrödinger» entrelazando estados electrónicos con estados vibracionales. Se analizó la decoherencia (por medio de radiación electromagnética) y se estudió posteriormente su evolución temporal; véase Wineland (2013).

T.7.2. Tests manipulando fotones en cavidades mediante haces atómicos

Se llevaron a cabo experimentos (tipo «gato de Schrödinger») manipulando campos electromagnéticos en cavidades de microondas, mediante átomos de rubidio; véanse Brune et al. (1996) y Haroche et al. (1998). Se crearon superposiciones (tipo «gato de Schrödinger») mediante el entrelazamiento de estados atómicos de Rydberg y estados de fotones en la cavidad de microondas. Comparando con la formulación en la subsección T.5.1, el subsistema A (el «átomo radioactivo») es un ión en un estado de Rydberg que atraviesa la cavidad, y B (el «gato») es un sistema de fotones, con frecuencias en el dominio de las microondas, que están atrapados en la cavidad. En estos experimentos, el papel del MA relevante lo desempeñaban osciladores acoplados a los fotones en la cavidad. Las superposiciones eran muy frágiles y se destruían motivadas por el acoplamiento con dicho MA . La destrucción de las interferencias entre estados en las superposiciones y, por tanto, la decoherencia pudieron ser medidas en la evolución temporal; véase Haroche (2013).

BIBLIOGRAFÍA

- Bergquist, J. C., Hulet, R. G., Itano, W. M. y Wineland, D. J. (1986). *Phys. Rev. Lett.* 57: 1699.
- Bohr, N. (1928). *Nature*, 121, 580.
- Breuer, H.-P. y Petruccione, F. (2006). *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford: Oxford University Press.
- Brune, M., Hagley, E., Dreyer, J., Maître, X., Maali, A., Wunderlich, C., Raimond, J.-M. y Haroche, S. (1996). *Phys. Rev. Lett.* 77, 4887.
- Chu, S. (1997). *The Manipulation of Neutral Particles*. Nobel Lecture, 8 de diciembre.
- Cohen-Tannoudji, C. N. (1997). *Manipulating Atoms with Photons*. Nobel Lecture, 8 de diciembre.
- Dubin, D. E. (2001). *Phys. of Plasmas*, 8, 4331.
- Haroche, S. (1998). *Physica Scripta*, T76, 159.
- Haroche, S. (2013). *Rev. Mod. Phys.* 85: 1103 (Nobel Lecture).
- Haroche, S. y Raimond, J.-M. (2007). *Exploring the Quantum. Atoms, Cavities and Photons*. Oxford: Oxford University Press.
- Joos, E., Zeh, H. D., Kiefer, C., Giulini, D., Kupsch, J. y Stamatescu, I.-O. (2003). *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*. Berlín: Springer-Verlag.
- Messiah, A. (1959). *Mecanique Quantique*, volumen I. París: Dunod.
- Monroe, C., Meekhof, D. M., King, B. E., Itano, W. M. y Wineland, D. J. (1995). *Phys. Rev. Lett.* 75: 4714.
- Paul, W. (1989). *Electromagnetic Traps for Charged and Neutral Particles*. Nobel Lecture, 8 de diciembre.
- Phillips, W. D. (1997). *Laser Cooling and Trapping of Neutral Atoms*. Nobel Lecture, 8 de diciembre.
- Pritchard, D. E. (1983). *Phys. Rev. Lett.* 51, 1336.
- Schrödinger, E. (1935). *Naturwissenschaften*, 23: 807.
- Turchette, Q. A. C., Myatt, C. J., King, B. E., Sackett, C. A., Kielpinski, D., Itano, W. M., Monroe, C. y Wineland, D. J. (2000). *Phys. Rev.* A62: 053807.
- Von Neumann, J. (1932). *Mathematische Grundlagen der Quanten Mechanik*. Berlín: Springer-Verlag. Traducción de R. Ortiz Fornaguera (1949): *Fundamentos matemáticos de la mecánica cuántica*, Monografías de Matemáticas I, Publicaciones del Instituto de Matemáticas «Jorge Juan». Madrid: Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
- Wineland, D. J. (2013). *Rev. Mod. Phys.* 85: 1083 (Nobel Lecture).
- Zurek, W. (1991). *Physics Today*, 44 (10): 36.
- Zurek, W. (2002). *Los Alamos Science*, 27: 2.
- Zurek, W. (2003). *Rev. Mod. Phys.* 75: 715.

Índice analítico

A

Abegg, regla, 642.
Absorción de radiación, 538, 541, 550.
– , teoría clásica, 538.
– , teoría semiclásica, 544.
Acelerador lineal, 1079.
Acoplamiento de momentos, 632.
Acoplo espín-órbita, 514, 518, 589.
– JJ, 595.
– Russell-Saunders, 589.
Acoplos residuales, 586, 589, 595.
Actividad, 823.
Adiabática, aproximación, 619.
Alcalinos, átomos, 586.
Alcance, 921.
Algoritmo cuántico de Shor, 1137.
Algoritmos cuánticos, 1136.
Amplificador de radiación, 1064.
Amplitud de ondas parciales, 440.
Anchura, 871.
– natural, 872.
– total, 893.
Anchuras parciales, 893.
Angstrom, 977, 978.
Ángulo de difusión, 1005, 1008.
Anillo de almacenamiento, 1081.
Aniquilación de pares, 845.
Anticonmutador, 326.
Antideuterio, 938.
Antiferromagnéticos, 763, 764, 774.
Antiligantes, términos, 631.
Antineutrino, 880, 923, 924.
Antipartículas, 913, 914.
Antiprotones, 932, 1078.
Antiquarks, 947, 948, 950-952.

Antisimetrización, 356.
Apareamiento, 862.
Aproximación adiabática, 619.
– de Born, 426.
– de Born-Oppenheimer, 616, 619.
– de Heitler-London, 765, 769.
– de ondas planas, 724, 744, 1103.
Argón, distribución radial, 583.
Armónico esférico, 279.
Armónicos esféricos, 279-285, 290, 999.
Arseniuro de galio, 748.
Atenuación, 821.
Atómicos, orbitales, 341, 582.
Autoconsistente, potencial, 581.
Autofunción, 207.
Autofunciones degeneradas, 207.
– ortogonales, 207.
Autovalor, 207, 986.
Autovector, 986.
Átomo de helio, 559.
– de hidrógeno, 303-314, 507.
– – efectos relativistas, 509.
– –, energía, 309, 312, 518.
– –, hamiltoniano rel., 513.
– –, hamiltoniano, 510.
Átomos alcalinos, 585.
–, efecto Zeeman, 529.
Átomos en estados de Rydberg, 1151.
Átomos multieletrónicos, 561, 577.

B

Back-Goudmist, efecto, 527.
Balance detallado, 890.
Balmer, 122.

Banda de conducción, 698, 729, 732, 736-739, 741, 742, 745-753, 756-759, 770-776, 782, 785, 788, 789, 1142.
– de valencia, 726, 728, 729, 732-734, 736, 738, 748-750, 1143.
Bandas de energía, 698, 726, 736, 737, 1049, 1051.
Baño térmico, 380.
Bardeen, 780, 783.
Bariones, 925, 932.
– encantados, 950.
Barn, 117, 885, 977, 978.
Barrera de Coulomb, 878.
– de potencial, 878.
– Josephson, 798.
Base autonormalizada, 217.
Beams, 56.
Becquerel, 824, 869, 1085.
«Belleza», 927, 931, 935, 950.
Beth, 74.
Bisección, 1094.
Bit, 1113.
Bohr, 70, 93, 98, 129, 304, 313, 344, 862, 866, 1156.
Boltzmann, 45, 46, 400, 402, 1071.
Bombas de cobalto, 820.
Bombeo óptico, 1148.
Born, 83, 183, 184.
Born, Oppenheimer, aproximación, 616.
Bosón de Higgs, 955, 1079, 1082.
Bosón neutro Z^0 , 925, 955, 1082.
Bosones, 352, 376, 925, 955.
Bothe, 71.
Bottonium, 951, 952.
Bras, 985.
Bremsstrahlung, 60.

C

Calor específico, 659, 703, 704, 706, 708, 718.
– de un sólido cristalino, 395-398.
– , gases moleculares, 659.
– molar, 29.
Calorímetros, 1084.
Cámara de detección electrónica
– de chispas, 1083.

– de deriva, 1084.
– de ionización, 63.
Camino libre medio, 822, 892, 1068, 1069.
Campo molecular, 765.
Canales de desintegración, 916.
Canje, interacción, 765, 768-772, 774, 810.
Capa electrónica, 312.
Capacidad calorífica, 704, 707, 718.
Captura, 1069.
– electrónica, 1112.
Carga del electrón, 58, 910.
– eléctrica elemental, 978.
– nuclear, 115.
Catástrofe ultravioleta, 42.
Celda de Wigner-Seitz, 700, 701, 712.
– unidad, 699-701, 703, 712, 714, 719.
Centrales nucleares, 1067.
Chadwick, 115.
Charmonium, 950.
Chirping, 1149.
Cinématica relativista, 1003.
Cinta gluónica, 954.
Clausius, 33, 44.
Colapso, 1157 y ss.
Coeficientes de Clebsch Gordan, 331, 1000-1002.
– de reflexión y transmisión, 247.
Colisión de paquetes de ondas, 252.
– elástica, 820, 885, 928.
– inelástica, 820, 885, 928.
Colisiones, 820.
Color, 952, 953.
Complementariedad, 98, 202, 224, 1044.
Compton, 62, 70, 313.
Condensación de Bose-Einstein, 407-414.
Condición de Bragg, 63.
– de Lorentz, 322.
Condon, Franck-Condon, 679.
Conexión espín-estadística, 356.
Configuraciones electrónicas, 584.
Confinamiento, 953, 954, 1072, 1073.
– inercial, 1073.
– magnético, 1073, 1074.
Conjugación de carga, 927, 938.
Conjunto completo de observables, 312, 723.
– de observables compatibles, 217.
– gran canónico, 384.
Conmutador, 202.

Conservación de la paridad, 889, 937.
 – de la carga, 927.
 – del cuadrimomento total, 889, 928.
 – del flujo, 185, 187, 248.
 – del momento angular, 889, 929.
 Constante de acoplo, 333, 919, 920.
 – de Boltzmann, 37, 704, 873, 978.
 – de desintegración, 824.
 – de estructura fina, 150, 313, 516, 859, 919.
 – de Faraday, 50.
 – de Planck, 49, 61, 978.
 – de Rydberg, 123, 137.
 – de Stefan-Boltzmann, 36.
 – de Wien, 37.
 – del movimiento, 199.
 – radioactiva, 824.
 – reducida de Planck, 83, 174.
 Constantes de Rot-Vib, 658.
 Cooper, 799, 780, 783, 784, 786-789.
 Coordenadas del centro de masas, 273.
 Correcciones relativistas, átomos de hidrógeno, 509.
 Corriente de probabilidad, 187, 245.
 Coulomb, acoplos, residuales, 586.
 Covalente, enlace, 649, 701, 771.
 Creación de pares, 914.
 Criptografía cuántica, 1139.
 Criterio de Lawson, 1073.
 Cromodinámica cuántica, 955.
 Cromodinámicas (fuerzas), 955.
 Cuadrimomento, 1004.
 Cuadrivector, 1003.
 Cuantificación de la energía, 49.
 – espacial, 150.
 Cuantización de la dirección del momento angular, 286.
 Cuanto de radiación, 56, 912.
 Cuanto mediador, 920-922, 925, 926, 955.
 Cuantos de energía, 49.
 Cuerpo negro, 31.
 Curie, 764, 765, 769, 772, 778, 1070, 1085.

D

Darwin, término, 517.
 Davisson, 86.
 De Broglie, 82, 400.

Debye, 62, 396-398, 703, 706, 707, 718, 785, 802, 977.
 Decoherencia cuántica, 1157 y ss.
 Degeneración, 986.
 – accidental, 150, 311, 315.
 – esencial, 311.
 – intrínseca, 262.
 Densidad de corriente, 187, 738, 780, 789, 790, 797.
 – de estados fonónicos, 707, 708, 717, 718.
 – de probabilidad, 189, 211, 215.
 Defasajes, 438.
 Desigualdades de Bell, 1035, 1038, 1048.
 Desintegración alfa, 828, 876.
 Desintegración beta, 879, 923, 937, 1069, 1112.
 Desplazamiento de Lamb, 522.
 – de Stokes, 674, 678.
 Desviación típica, 826.
 Detectores, 1083.
 – Cherenkov, 1084, 1110.
 – de centelleo, 1083.
 Determinante de Slater, 566, 581, 616, 766.
 Deuterio, 938.
 Deuterón, 818, 885, 887.
 Diagramas de Feynman, 784, 785.
 Diamagnético, 756, 779, 780.
 Diatómicas, moléculas, 616.
 Diodos Gunn, 751.
 Dipolar, momento, 652, 751, 765, 778.
 Dipolo, 652, 769.
 Dirac, ecuación, 511.
 Discretización, 307, 1090.
 Dispersión a bajas energías, 440.
 – Compton, 70.
 – de Rayleigh, 681.
 – de rayos X, 708, 709, 713-715, 717, 718, 803.
 – elástica, 715, 716.
 – electrón-fonón, 746, 747, 782, 784, 785.
 – inelástica, 709, 715, 717.
 – por un potencial cristalino, 428, 449.
 – Raman, 614, 680.
 – Thomson, 70.
 Distribución de Gibbs, 382.
 – de Maxwell, 43, 402.
 Divisor de haces (*beam splitter*), 1118.
 Doblete de isospín, 930.
 Dosis absorbida, 1085.
 – equivalente, 1085.

E

Ecuación

- de Compton, 69.
- de continuidad, 186, 187, 215.
- de Dirac, 511.
- de Lippmann-Schwinger independiente del tiempo, 425.
- de Lippman-Schwinger, 423.
- de ondas, 38, 169, 538.
- de Schrödinger, 174, 177, 200, 211, 214, 725, 729, 730, 742, 757, 795, 856.
- de Schrödinger en el espacio de momentos, 221.

– en diferencias finitas, 1090.

– nuclear, 661.

Ecuaciones de Ehrenfest, 198.

– de estado, 367, 402, 405, 407, 412.

– de Hamilton, 193, 210.

– de Maxwell, 40, 64.

Efectivo, número atómico, 583.

–, potencial, 295, 302, 304, 305, 311, 579.

Efecto Auger, 843.

– Back-Goudsmit, 527.

– Cherenkov, 1084, 1110.

– Compton, 62.

– de Hass-van Alphen, 759, 760.

– de Josephson, 789, 794, 796, 797, 1054.

– Doppler, 872.

– fotoeléctrico, 53, 842.

– Gunn, 741.

– Hall, 1055.

– Hall cuántico, 1055.

– isotópico, 781-783.

– Kerr, 614.

– Mössbauer, 873.

– Paschen-Back, 527.

– Raman, 614, 680, 852.

– Sagnac, 1024.

– Shubnikov-de Haas, 759.

– Stark, 532.

– túnel, 249, 780, 782, 792-794, 797, 798, 878, 879.

– Zeeman, 150, 525.

– – anómalo, 155, 156.

– – «normal», 156.

Efectos genéticos, 1086.

– somáticos, 1086.

Ehrenfest, 42, 198.

Einstein, 56, 57.

–, coeficientes, 550, 1062.

Electrodinámica Cuántica, 955.

Electrómetros, 848.

Electrón, 912, 1077.

– de retroceso, 68.

Electrones, 840.

– de conducción, 406, 728, 736, 737, 741, 742, 745, 760, 770, 774, 775, 780, 782, 783, 785, 1055.

– independientes, aproximación, 577.

– ópticos, 584.

Electrónicas, configuraciones, 584.

Electrónico, espectro, 674.

Electrónicos, términos, 630.

Electronvoltio, 911, 977, 978.

Elsasser, 85.

Emisión alfa, 876.

– beta, 879, 1112.

– de radiación, 538, 544.

– –, oscilador, 543.

– –, teoría clásica, 538, 543.

– –, teoría semiclásica, 544.

– de rayos X, 59.

– espontánea, 550, 1061.

– estimulada, 550, 1062.

– gamma, 870.

– termoiónica, 57.

Emulsiones fotográficas, 819, 848.

«Encanto», 927, 931, 935, 949.

Energía de Debye, 703, 785.

– de enlace, 818.

– de Fermi, 403, 406, 698, 731, 732, 739, 747, 785, 792, 1058.

– de ionización, 132, 309, 835.

– de ligadura, 132, 313.

– de punto cero, 230.

– en Mecánica Cuántica, 198.

– libre de Helmholtz, 384.

– nuclear de fisión, 1067.

– – de fusión, 1071.

– total relativista, 66, 1004.

Enfriamiento láser, 1147.

– Doppler, 1147.

– *Resolved side cooling*, 1149.

– «Sísifo» o gradiente de polarización, 1150.

– VSCPT, 1150.

– Raman, 1150.
 – por evaporación, 1150.
 Enlace covalente, 641, 644.
 – de hidrógeno, 653.
 – heteropolar, 642.
 – homopolar, 644.
 – iónico, 642.
 – molecular, 644.
 – químico, 642.
 Entropía, 44, 367, 369, 373, 376, 379.
 Esclavitud infrarroja, 954.
 Esleptones, 956.
 Espacio de fases, 143.
 – de Hilbert, 985.
 Espectro, 207.
 – continuo, 59, 140, 207, 227.
 – – de rayos X, 59.
 – de líneas del hidrógeno atómico, 122.
 – de rayos X, 599.
 – discreto, 207, 227.
 – electrónico, 674.
 – electromagnético, 67, 708, 709.
 – puntual, 227.
 – rotacional, 674.
 – vibracional, 674.
 Espectrómetros de masas, 852.
 Espectros de absorción, 124.
 – de emisión, 121, 124.
 – moleculares, 670, 674, 852.
 Espectroscopio de rayos X, 63.
 Espín, 510.
 – del fotón, 73, 360, 912.
 – isotópico, 929, 930.
 – nuclear, 598, 852.
 – órbita, acoplo, 518, 587.
 Espontánea, emisión, 550.
 Esquarks, 956.
 Estadística clásica de Boltzmann, 370.
 – cuántica de Bose-Einstein, 352, 388, 916.
 – – de Fermi-Dirac, 352, 384, 916.
 Estado excitado, 138.
 – singlete, 330.
 – triplete, 330.
 Estados estacionarios, 129, 206.
 – entrelazados, 330, 1115.
 – EPR (de Einstein, Podolsky y Rosen) o de Bell, 1115.
 – ligados, 227.

Estermann, 92.
 Estimulada, emisión, 151, 556.
 Estructura fina, 150, 522.
 – – , constante, 516, 919.
 – hiperfina, 598, 854.
 Experimento de Franck-Hertz, 141.
 – de la doble rendija, 78, 99, 1154.
 – de Stern-Gerlach, 323.
 – idealizado (*thought experiment*), 1165.
 Exposición, 1085.
 «Extrañeza», 923, 927, 931, 934, 935.
 Extrapolación de Richardson, 1096.

F

Factor de atenuación, 121.
 – de degeneración, 368.
 – de Gamow, 250, 878.
 – de Lande, 532, 774, 812.
 – giromagnético de espín, 325.
 Familias hadrónicas, 947-952.
 – leptónicas, 925, 943.
 Fermi, 977, 978.
 – Regla de oro, 550.
 Fermiones, 352, 373, 729, 731, 745, 746, 766, 786, 916.
 Ferrimagnéticos, 763, 764.
 Ferromagnetismo, 769-771, 775.
 Feynman, 784, 785.
 Fina, estructura, 151, 522.
 Fisión, 886.
 Floquet, 721.
 Flujo de probabilidad, 189.
 Fondo cósmico de microondas, 52, 1111, 1151.
 Fonón, 395, 873.
 Fonones, 395, 396, 698, 701-703, 706-708, 717, 718, 737, 744, 749, 751, 752, 782-784, 803, 1143.
 Fórmula de Breit-Wigner, 896.
 – de Gell-Mann y Nishijima, 935.
 – de Klein-Nishina, 844.
 – de Planck, 49, 393.
 – de Rayleigh-Jeans, 37, 42.
 – de Rutherford, 115, 118, 428, 836.
 – de Stirling, 47.
 – de Wien, 35.

Fórmulas de Breit-Wigner, 444.
Fotino, 956, 957.
Fotoelectrones, 54.
Fotón, 56, 65, 66, 358, 911, 917.
Fotones, 841.
– entrelazados, 1116.
– –, generación experimental, 1120.
– ionizantes, 842.
Fotonuclear, efecto, 888.
Fowler, 136.
Franck, 141.
Frecuencia ciclotrónica, 2654, 757, 758.
– de corte, 57.
– de Debye, 703, 785.
– de Einstein, 706.
Frisch, 92.
Fuerza de Lorentz, 210, 1055.
Fuerzas de Van de Waals, 655.
– intermoleculares, 652.
– nucleares, 851, 857.
Fugacidad, 383, 399, 403, 408.
Función de Green, 429.
– –, independiente del tiempo, 425, 449.
– de onda, 172, 182, 212 y ss.
– – de un fotón, 359.
– – para N fotones, 363.
– de ondas, paridad, 284, 635.
– de partición, 372.
– de trabajo, 56.
– gamma, 991.
– prueba, 340.
– zeta de Riemann, 408, 415, 992.
Funciones asociadas de Legendre, 279, 998.
– esféricas de Bessel, 299, 300, 317, 994.
Fusión termonuclear, 1071.

G

Gas de electrones libres, 406, 729.
– de fermiones, 402, 729, 731.
– de fonones, 395.
– de fotones en una cavidad, 392.
– ideal clásico monoatómico, 391.
– – de Fermi, 398-406.
Gases moleculares, calor específico, 659.
Gato de Schödinger, 1163.

– paradoja, 1163.
– y decoherencia cuántica, 1164.
Gauge de Lorentz, 539.
Gauss, 977, 978.
Gaussiana, 238, 254.
Geiger, 71, 105.
Germer, 86.
Gluinos, 956.
Gluones, 954, 955.
Gran función de partición, 382.
Gravitón, 926.
Gray, 1085.

H

H_2^+ , ion molecular, 616.
 H_2 , calor específico, 660.
 H_2 , térmicos eléct., 639.
 H_2O , 650.
Hadrones, 925.
Hamilton, 86.
Hamiltoniano clásico, 193, 199, 210.
– cuántico, 199, 211, 214.
– no perturbado, 334.
Hartree, 982.
– método, 580.
Hartree, potencial, 581, 586.
Haxel, 865.
Haz reflejado, 246.
– transmitido, 246.
 He^4 líquido, 413.
Heisenberg, 95, 204, 721, 765, 768, 769, 812, 929, 1044.
Helicidad, 882, 924, 937, 938.
Helicidad del fotón, 361, 966.
Helio, átomo, 559.
Hertz, 45, 53, 141.
Heteropolar, enlace, 642.
Hibridación, 626.
– puente, 653.
Higgs (véase Bosón de Higgs).
Higgsino, 957.
Hiper carga, 935.
Hiperfina, estructura, 598.
Hipótesis de Boltzmann, 369.
Homopolar, 644.

Hueco, 729, 733, 734.
Hull, 71.

I

Imanación, 698, 755, 756, 761-765, 771, 778, 779.
Incertidumbre en la posición, 203.
Independencia de carga, 857, 890.
Índice de multipolaridad, 874.
Índices de Miller, 700, 713, 718, 719, 735, 801.
Indistinguibles, partículas, 349 y ss, 560.
Inducida, emisión, 550, 1062.
Inestabilidad del protón, 917, 932, 934.
Infrarrojo, 67.
Integral de solapamiento, 623.
Integral en resonancia, 623.
Interacción débil, 880, 919, 923, 955.
– de canje, 576, 769-771, 810.
– electromagnética, 919, 920, 955.
– electrón-fonón, 746, 747, 782, 784, 785.
– espín órbita, 865.
– fuerte, 857, 858, 919, 921, 955.
– gravitatoria, 916, 919, 926.
– Rad-Mat, teoría clásica, 538.
– Rad-Mat, teoría semiclásica, 544.
– fundamentales, 919.
– nucleares, 838.
Interferencia de un fotón consigo mismo, 1011 y ss.
– y difracción de neutrones, 1017 y ss.
Interferómetro de tipo Bonse-Hart, 1019.
Interpretación de Copenhague, 1033 y ss, 1155 y ss.
– probabilística de la función de onda, 182 y ss, 189 y ss, 436, 1026 y ss, 1154.
Intervalo de Lande, regla, 592.
Invarianza bajo CP, 938.
Inversión espacial, 927, 936.
– temporal, 927, 940.
Ion molecular H_2^+ , 616.
Iónico, enlace, 642.
Ionización primaria, 836.
Irradiancia espectral, 31.
Ishiwara, 129, 143, 146.
Isomería nuclear, 870.
Isospin, 890, 927, 929.
Isótopos, 817.

J

J/X_i , 950, 973.
Jeans, 38.
Jensen, 865.
JJ, Acoplo, 595.

K

Karmerlingh Onnes, 779.
Kaones, 922, 939.
Kerr, efecto, 613, 614.
Kets, 985.
Kirchhoff, 31, 48.
Karmers y Anderson, 770.
Kramers, 70.
Kurlbaum, 45.

L

Lamb, desplazamiento, 522.
Lande, factor, 532, 774, 812.
Lande, regla, 598.
Lande, regla de intervalo, 548.
Láser, 1061.
Laue, 89.
Lawrence, 56.
Lebedev, 71.
Lenard, 53.
LEP (*large electron-positron collider*), 1078, 1080-1082.
Leptones, 925, 943.
Lewis, 56.
Ley de Bragg, 430, 713-715.
– de Coulomb, 836.
– de Dulong-Petit, 398, 704.
– de Kirchhoff, 31.
– de Maxwell-Boltzmann, 392, 402.
– de Moseley, 601.
– de Poisson, 825.
– de Stefan-Boltzmann, 36.
– de Wiedemann-Franz, 745.
– del desplazamiento de Wien, 37, 49.
Leyes de conservación, 927-941.
LHC (*large hadron collider*), 955, 1078, 1082.
Libertad asintótica, 954.

Física cuántica

Liénard-Wiechert, potenciales, 541.
Ligantes, términos, 631.
Línea anti-Stokes, 681.
Línea Stokes, 681.
London, 765, 769, 787.
Longitud coherente, 796.
– de coherencia, 363.
– de dispersión, 441.
– de onda de Compton, 69, 70.
Lorentz, 156.
–, fuerza, 1078.
–, modelo, 538.
–, referencial, 539.
–, transformaciones, 1003, 1006.
Lummer, 33.
Luz visible, 67.

M

Magnetismo nuclear, 854.
Magnetón de Bohr, 322, 753, 854.
– nuclear, 854.
Manipulación de entidades individuales, 1145, 1164.
– fotones en cavidades (de microondas), 1167 y ss.
– iones atrapados, 1165 y ss.
María Curie, 869.
Marsden, 105.
Masa del electrón, 911, 978.
– del neutrón, 913, 978.
– del protón, 912, 978.
– efectiva, 698, 732-734, 744, 750, 751, 760.
– en reposo, 66, 1004.
– reducida, 127.
– relativista, 66.
–, tamaño y forma de los núcleos, 852.
Masas de los núcleos, 852.
Materia oscura, 944, 1111.
Matrices de Pauli, 326, 510, 930.
Matthiessen, 748.
Maxwell, ecuaciones, 538.
Mayer, 865.
Mecánica cuántica de un fotón, 358, 1167.
– estadística, 46.
Mesones, 925, 932, 947.
– con belleza, 951, 974.

– con encanto, 950, 973.
– extraños, 948, 972.
– virtuales, 860.
Métodos de diferencias segundas, 1089.
– de Hartree, 580.
– de la fase estacionaria, 180, 252.
– de Numerov, 1100.
– de separación de variables, 259.
– espectral, 1103.
Método variacional, 339, 340.
MeV, 826.
MeV/c, 827.
MeV/c², 827.
Microscopio de efecto túnel, 251.
Microscopios electrónicos, 92.
Millikan, 58.
Modelo de Debye, 396, 397, 703, 707, 718, 802.
– de Kronig-Penney, 1049.
– de la gota líquida, 861.
– de Thomson, 103 y ss.
– de Weinberg-Salam, 955.
– estándar, 955, 956.
– nuclear colectivo, 866.
– nuclear de capas, 864.
– nuclear de la gota líquida, 861.
– óptico, 891.
– vectorial, 531.
Modo de vibración, 664, 702, 706.
Modos de radiación, 40.
Molecular, enlace, 644.
– orbital, 625.
Moléculas de Van der Waals, 630, 668.
–, espectros, 674.
–, estados, 632.
–, orbitales, 650.
Moléculas diatómicas, 661.
– nucleares, 888.
Momento angular de la radiación, 72 y ss.
– orbital, 276.
– cuadrupolar, 854.
– dipolar
– magnético, 854.
Momento en Mecánica Cuántica, 195 y ss.
– magnético
–, intrínseco, 325.
– relativista, 66.
Momentos, acoplamientos, 632.
Moseley, Ley, 601.

Mottelson, 866.
 Muestra radioactiva, 823.
 Multielectrónicos, átomos, 577.
 Multipletes, 561.
 Multipolo eléctrico, 874-876.
 Multipolo magnético, 874-876.
 Muones, 914, 924.

N

Nagaoka, 103.
 Nanoestructuras, 1141, 1143.
 Neptunio, 869.
 Neutrino, 881, 920, 923, 924, 943.
 – atmosférico, 944, 1105, 1106.
 – cósmico, 944, 1105, 1110.
 – electrónico, 923, 943, 1106.
 – fuentes, 1105.
 – muónico, 920, 943, 1106.
 – solar, 944, 1105.
 – tautónico, 943.
 Neutrinos estériles, 1111.
 Neutrón, 84, 817, 912, 946.
 Neutrones de baja energía, 886.
 – de energía alta, 887.
 – – intermedia, 887.
 – fenómenos de *antibunching*, 1031.
 – lentos, 886, 889, 895.
 – térmicos, 84, 886.
 – NH₃, 650.
 Nicols, 71.
 Nivel de Fermi, 732, 739, 759, 771, 789, 792, 793, 866.
 Niveles degenerados, 338.
 – de Landau, 267, 268, 742, 755, 758, 759.
 – de rotación, 863.
 – de vibración, 863.
 Nodo, 231.
 Normalización de la función de ondas, 188, 189.
 Notación de Dirac, 216, 341.
 Nuclear, ecuación, 664.
 – , espín, 598.
 Nucleido, 817.
 Nucleidos radioactivos, 819.
 – radiactivos naturales, 825.
 Núcleo atómico, 817.
 – compuesto, 893, 894, 896.

Nucleón, 857, 890, 930.
 Nucleones, 817.
 Número atómico, 817.
 – barónico, 927, 931.
 – cuántico azimutal, 149, 282.
 – cuántico del momento angular, 282.
 – cuántico magnético, 149, 282.
 – cuántico principal, 149.
 – cuántico radial, 307.
 – cuántico, rotacional, 307, 666.
 – cuántico, vibracional, 665.
 – de Avogadro, 50, 368, 704, 801, 822, 978.
 – electrónico, 933, 943.
 – leptónico, 881, 882, 927, 931, 933, 943.
 – mágico, 864.
 – muónico, 933, 943.
 – tautónico, 933, 943.
 Números cuánticos, 209, 217, 778, 931.
 – de ocupación, 374, 378, 402-404, 407, 409.

O

Observables, 216.
 – compatibles, 217.
 Octetes, 642.
 Onda de de Broglie, 171.
 – de materia, 171.
 – dispersada, 419.
 – incidente, 419.
 – piloto, 1035.
 – rotante, aproximación, 547.
 Ondas guía, 81.
 – , ecuación, 169, 172.
 Operador autoadjunto, 207.
 – momento, 196.
 – número, 240.
 Operadores autoadjuntos, 986.
 Operadores autoadjuntos conmutantes, 217.
 – de creación y destrucción, 240.
 Oppenheimer-Born, aproximación, 616, 619.
 Orbital molecular, 632.
 Orbitales atómicos, 582, 765, 769, 776.
 – moleculares, 651.
 Órbitas ciclotrónicas, 758.
 Ortohelio, 562.
 Oscilación de neutrinos, 934, 944, 1106-1110.

Oscilador armónico, isótropo, 264, 265, 314-317.
– tridimensional, 263, 264.
Oscilador, emisión, 543.
Ópticos, electrones, 584, 586.

P

Paquete de ondas, 175, 178.
– mínimo, 243, 255.
Paradoja de Einstein, Podolsky y Rosen, 1035.
Parahelio, 562.
Paramagnéticos, 761-764.
– anómalos, 761.
Parámetros de impacto, 110.
Pares de colisión, 669.
Paridad, 852, 875, 876, 936-937.
– de la F. D. O., 635.
– de la permutación, 354.
– de los armónicos esféricos, 284, 285.
– intrínseca, 937, 965.
– orbital, 936, 937.
Partículas
– alfa, 818, 885-887, 914.
– cargadas, 839, 887, 1077, 1078.
– extrañas, 922, 924.
– idénticas, 349.
– indistinguibles, 566.
– lentas, 894.
– macroscópicas idénticas, 349, 350.
– pesadas, 839.
Paschen-Back, efecto, 527.
Pauli, 156, 880, 923.
–, matrices, 326, 930.
– principio exclusión, 952.
Período de desintegración, 820, 824.
Permutación, 354.
Perrín, 103.
Perturbación, 333-338, 916.
Perturbaciones dependientes del tiempo, 342-346.
Peso atómico
– estadístico, 369.
Pickering, 139.
Piones, 858, 915.
Pirómetro óptico, 50.
Placas fotográficas, 849.

Planck, 43, 45, 50.
Poder absorbente, 31.
– reflector, 841.
Polarización, 40.
Polinomios de Hermite, 239, 992, 994.
Polinomios de Laguerre, 308.
– de Legendre, 279, 997, 998.
– generalizados de Laguerre, 308, 316, 995-997.
Positrón, 845, 914, 1077.
Positrones, 880.
Positronio, 845, 938.
Postulados de Bohr, 129 y ss.
Potencial autoconsistente
– de contacto, 54.
– de Coulomb, 131, 427, 859.
– de frenado, 54.
– de Woods-Saxon, 865, 892.
– de Yukawa, 419, 861, 1099.
– óptico, 1018.
– químico, 383, 732.
– termodinámico, 384.
– vector, 321.
Potenciales centrales, 274, 295.
– retardados, 539, 541.
Pozo esférico, 297-303.
Presión de punto cero
– de radiación, 71, 72.
Principio de combinación, 124.
– de complementariedad, 98, 101.
– de correspondencia, 133, 152, 154.
Principio de exclusión, 356, 585, 701, 703, 729, 745, 785, 786.
– de Pauli, 402, 403, 565.
– de Fermat, 85.
– de indeterminación, 92.
– de mínima acción, 85.
– de Pauli, 701, 703, 729, 745, 785, 786, 862, 952.
– de superposición, 171, 174, 178.
Principios de conservación, 888, 927.
Pringsheim, 33.
Probabilidad de desintegración, 893, 910.
Probabilidad de transición, 345, 916.
– termodinámica, 369.
Proceso de colisión, 245, 927.
Producción asociada, 922.
– de pares, 842, 845, 846.

- interna de pares, 871.
- Propagador, 84.
- Protón, 817, 887, 912, 945, 1077.
- Puertas lógicas clásicas, 1123.
- – cuánticas, 1123.
- – – experimentales, 1126.

Q

- Quarks, 945-952.
- Qubit, 1113.
- Químico, enlace, 641.

R

- Rad, 1085.
- Radiación de frenado, Bremsstrahlung, 836, 837, 1072-1074.
- térmica, 30 y ss.
- Radiaciones, 819.
- ionizantes, 819, 835.
- Radiancia espectral, 31.
- Radiancia total, 33.
- Radio, 67.
- clásico, 324.
- – del electrón, 844.
- de Bohr, 136, 313.
- del núcleo, 853.
- Radioactividad artificial, 869, 870, 914.
- natural, 869.
- Radón, 819.
- Ramán, efecto, 679, 681.
- Rayleigh, 37.
- , dispersión, 681.
- Rayleigh-Ritz-Garlekin, 1103.
- Rayos cósmicos, 67, 913, 1110.
- delta, 836.
- gamma, 66, 67, 885, 888, 1069.
- Rayos X, 59, 67, 599, 708, 709, 713-718, 843, 870, 1072.
- espectros, 600.
- Reacciones endoenergéticas, 818.
- exoenergéticas, 818, 1071.
- nucleares, 818, 828, 885, 891, 1071, 1072.
- Reactor nuclear, 1067, 1068.
- fusión, 886.

- térmico, 1069.
- Reactores rápidos, 1068, 1069.
- Rebka, 66.
- Recorrido libre medio, 121, 745, 760, 1142, 1144.
- Red cristalina, 698-711, 714, 724, 741-746, 754, 772, 782, 784, 798.
- de difracción, 708.
- recíproca, 429, 708, 712-715, 717, 721, 724, 725, 739.
- Reducción de la función de onda, 1034, 1056.
- Referencial de Lorentz, 1103.
- Reflexión de Bragg, 62.
- Regla
- de selección de Fermi, 883.
- – de Gamow-Teller, 883.
- Reglas de conmutación, 285.
- – de posiciones y momentos, 201, 202.
- de selección, 155, 876.
- Relación de cierre, 987.
- de Einstein, 818.
- de Rayleigh, 864.
- energía-alcance, 840.
- Relaciones de De Broglie, 171.
- Relaciones de incertidumbre, 202, 203, 1042 y ss.
- – energía-tiempo, 205, 206.
- – posición-momento, 204, 205.
- Relaciones de indeterminación, 95, 1042 y ss.
- Rem, 1085, 1086.
- Representación de momentos, 990.
- de posiciones, 989.
- Residuales, acoplos, 586, 589, 595.
- Resolución numérica, 1089.
- Resonancia, 886, 894, 922.
- , integral, 623.
- magnética, 752.
- – nuclear, RMN, 855.
- paramagnética, 752.
- Retardados, potenciales, 539, 541.
- Ritmo de desintegración, 917.
- Ritz, 124.
- Röntgen, 59, 1085.
- Rotación-vibración, constantes, 658.
- Rotacional, espectro, 674.
- , número cuántico, 666.
- Rotaciones, 656.
- Rotador, 656.

Rotante, aproximación onda, 547.
Rubens, 45.
Russell-Saunders, acoplo, 589.
Rutherford, 103, 109, 869, 945.

S

Salto de Stokes, 673, 679.
Schrieffer, 780.
Sección eficaz, 116 y ss, 820, 885, 893, 895, 1069.
-- de absorción, 886, 887.
-- de producción de pares, 840.
-- de Thomson, 844.
-- del efecto Compton, 844.
-- diferencial, 117, 421, 821.
-- total, 118, 422, 821, 922.
Segundo principio de la termodinámica, 32.
Selección, reglas, 571, 674.
Semiconductor, 698, 729, 733-739.
- con zanja directa, 749.
- con zanja indirecta, 749.
- extrínseco, 738.
- intrínseco, 738.
Semiconductores, 698, 729, 733-739.
Serie de Balmer, 122.
- de Born, 426.
- de Brackett, 124.
- de Lyman, 123.
- de Paschen, 123.
- de Pfund, 124.
- espectral, 123.
Series espectrales, 137.
- radiactivas, 869.
Sievert, 1086.
Simetría
- CP, 927, 938.
- CPT, 928, 941.
Simetrización, 356.
Simon, 70.
Sincrotón, 1079-1080.
Singlete de isospín, 930.
Sistema de centro de masas, 830, 1005.
- (cuántico) cerrado, 1155, 1157.
- de laboratorio, 119, 1005.
- de referencia, 1003.
- del laboratorio, 830, 1005.

- inercial, 1003.
- internacional, 979.
- simétrico, 977, 979.
Slater, 70, 766.
-, determinante, 566, 581, 610, 766.
Soddy, 869.
Solapamiento, integral, 623.
Sommerfeld, 129, 146.
Stefan-Boltzmann, 50.
Stellarator, 1074.
Stern, 92.
Stokes, desplazamiento, 674, 678.
Subcapa, 312.
Suess, 865.
Superconductividad, 699, 779-784, 788, 789, 797, 798.
Superconductores de alta temperatura, 1053, 1054.
Superficie de Fermi, 732, 742, 758, 760, 776, 785, 793.
Superfluido, 413.
Supersimetría, 956.
Susceptibilidad, 756, 759, 760-762.
Su (3), 949.

T

Tabla periódica, 584, 643.
Tamaño crítico, 1068, 1069.
Tau, 943.
Taylor, 77, 1012.
Teleportación cuántica, propuesta teórica, 1128.
-- , realización experimental, 1131.
Temperatura absoluta, 367.
- de Curie, 764, 765, 769, 772, 778.
- de Debye, 397, 703, 785.
- de Fermi, 404, 407.
- de Neel, 764.
Teorema de Bloch, 721, 722, 724, 725.
- de equipartición de la energía, 37.
- de no-clonación, 1125.
- de Van Leeuwen, 698.
- del virial, 126.
- óptico, 435.
- Wigner-Eckart, 970.
Teoría BCS, 780-789.

– cinética clásica, 37.
 – cuántica antigua, 129.
 – de Ginzburg-Landau, 789.
 – de Vonsovskii-Stoner, 771.
 – electromagnética de Maxwell, 53.
 – RKKY, 770, 774-776.
 Teorías de variables ocultas, 1033.
 Término de Bloch
 – de canje, 769, 770, 774.
 Términos antiligantes, 631.
 – electrónicos, 630.
 – –, CO, 641.
 – – H₂, 639.
 Thomson, 70, 86, 103.
 Tokamak, 1074.
 Trampa de iones, 1145.
 – magneto-ópticas, 1150.
 – de Paul, 1146.
 – de Penning, 1146.
 Transformada de Fourier, 200, 222, 346, 713, 812.
 Transposición, 354.
 Triplete de isospín, 930.
 Tritio, 818, 886, 1071-1075, 1112.
 Túnel Giaver, 794.
 TV, 67.

U

Ultravioleta, 67.
 Unidad de masa atómica, 827, 977, 978.
 – electrostática, 978.
 – x, 977, 978.
 Unidades atómicas, 982.
 – de Gauss, 979.
 – electrostáticas, 977.
 – especiales, 977, 978.
 – naturales, 983.
 Upsilon (Y), 951.

V

Valor medio de la energía, 199.
 – – de la posición, 194.
 – – del momento, 196.

– propio, 986.
 Van de Waals, fuerzas, 653.
 – –, moléculas, 630, 668.
 Variables de acción, 146.
 – de Mandelstam, 1006.
 – ocultas, 96, 1034, 1045, 1048.
 Varianza, 825.
 Vector de Poynting, 875.
 – propio, 986.
 Vectorial, modelo, 531.
 Velocidad de grupo, 84, 732, 733.
 – de la luz en el vacío, 978.
 «Verdad», 927, 931, 935, 951.
 Vibracional, espectro, 674.
 – –, número cuántico, 665.
 Vibraciones, 677.
 Vida media, 824, 917.
 – – de la resonancia, 444, 922.
 Violación de CP, 939, 940.
 – de paridad, 937.
 – de T, 940.
 Von Weizsäcker, 862.

W

Wilson, 143, 146.
 Wino, 956.
 Wu, 65, 882.

Y

Young, 77.
 Yukawa, 921.

Z

Zanjas de energía, 728, 729, 735, 736, 748, 782, 783, 788, 789, 794, 813, 1143.
 Zeeman, efecto, 525.
 Zino, 956, 957.
 Zona de Brillouin, 712, 718, 724, 725, 727, 728, 735-739, 749, 776, 777.

TÍTULOS PUBLICADOS

- ÁLGEBRA LINEAL (vol. 2), *A. Gutiérrez Gómez y F. García Castro.*
- ANÁLISIS DE DATOS EN LAS CIENCIAS DE LA ACTIVIDAD FÍSICA Y DEL DEPORTE, *M.ª I. Barriopedro y C. Muniesa.*
- CIENCIA DE MATERIALES, *P. Coca Rebollero y J. Rosique Jiménez.*
- CURSO DE GENÉTICA MOLECULAR E INGENIERÍA GENÉTICA, *M. Izquierdo Rojo.*
- ECOLOGÍA, *J. Rodríguez.*
- ECUACIONES DIFERENCIALES II, *C. Fernández Pérez y J. M. Vegas Montaner.*
- ENZIMOLOGÍA, *I. Núñez de Castro.*
- FÍSICA CUÁNTICA, *C. Sánchez del Río (coord.).*
- FISIOLOGÍA VEGETAL, *J. Barceló Coll, G. Nicolás Rodrigo, B. Sabater García y R. Sánchez Tamés.*
- INTEGRACIÓN DE FUNCIONES DE VARIAS VARIABLES, *J. A. Facenda Aguirre y F. J. Freniche Ibáñez.*
- INTRODUCCIÓN A LA ESTADÍSTICA Y SUS APLICACIONES, *R. Cao Abad, M. Francisco Fernández, S. Naya Fernández, M. A. Presedo Quindimil, M. Vázquez Brage, J. A. Vilar Fernández y J. M. Vilar Fernández.*
- MÉTODOS NUMÉRICOS. Teoría, problemas y prácticas con MATLAB, *J. A. Infante del Río y J. M.ª Cabezas.*
- PROBLEMAS, CONCEPTOS Y MÉTODOS DEL ANÁLISIS MATEMÁTICO. 1. Números reales, sucesiones y series, *M. de Guzmán y B. Rubio.*
- PROBLEMAS, CONCEPTOS Y MÉTODOS DEL ANÁLISIS MATEMÁTICO. 2. Funciones, integrales, derivadas, *M. de Guzmán y B. Rubio.*
- SERIES DE FOURIER Y APLICACIONES. Un tratado elemental, con notas históricas y ejercicios resueltos, *A. Cañada Villar.*
- TABLAS DE COMPOSICIÓN DE ALIMENTOS, *O. Moreiras, A. Carbajal, L. Cabrera y C. Cuadrado.*
- TECNOLOGÍA MECÁNICA Y METROTECNIA, *P. Coca Rebollero y J. Rosique Jiménez.*
-

Si lo desea, en nuestra página web puede consultar el catálogo completo o descargarlo:

www.edicionespiramide.es