

Libros de Cátedra

Física cuántica y relativista

Myrian Cristina Tebaldi (coordinadora)

FACULTAD DE
INGENIERÍA

e
exactas


EduLP
EDITORIAL DE LA UNLP



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA

FÍSICA CUÁNTICA Y RELATIVISTA

Myrian Tebaldi

(coordinador)

Roberto Alonso

Mariano Creus

Emiliano Muñoz

Cintia Perrone

Marcelo Trivi

Alejandro Velez Zea

Facultad de Ingeniería



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA


Eduulp
EDITORIAL DE LA UNLP

Agradecimientos

Los autores agradecemos a nuestras familias, que nos alentaron y apoyaron durante la redacción de este libro.

A los profesores Jorge Tocho, Néstor Bolognini y Héctor Rabal, que nos antecedieron en la cátedra y cuyas enseñanzas durante años compartidos de docencia sin duda enriquecieron el contenido de esta obra.

A nuestros alumnos y colegas que a través de sus inquietudes, dudas y sugerencias nos motivaron a preparar este trabajo. Finalmente, nuestro reconocimiento al apoyo recibido de la Facultad de Ingeniería y de la Universidad Nacional de La Plata para la concreción de este proyecto.

Prólogo

El libro que presentamos aquí es una Introducción a la Física Cuántica y Relativista a nivel Física General para alumnos de Ingeniería y Ciencias. En consecuencia, nos hemos enfocado en la discusión de las ideas y conceptos fundamentales que dieron origen a principios del Siglo XX a la irrupción de una “nueva” Física. Asimismo, hemos reducido la complejidad matemática y la notación más avanzada para que sea accesible a alumnos de los primeros años de las Carreras con conocimientos básicos de Cálculo, Álgebra y Física clásica general.

Son numerosos los textos que abarcan estos temas, consideramos necesario una adaptación a nuestro propio plan de estudio. Sin embargo, este libro incluye los contenidos de la asignatura “Física III” correspondiente al Plan de Estudio del año 2018 que cursan los alumnos de Ingeniería Electrónica, en Telecomunicaciones, Energía Eléctrica, Química y en Materiales de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata. Tales contenidos abarcan algunos tópicos de Física Cuántica y de la Teoría Especial de la Relatividad.

Si bien los temas están presentados según nuestra propia percepción como docentes de Ingeniería de la Universidad de La Plata, estimamos que nuestro aporte en el tratamiento de los mismos será muy útil para Cátedras similares de otras Facultades y Universidades.

Además de los fundamentos teóricos y las demostraciones experimentales, hemos incluido problemas, algunos de ellos resueltos, para que los alumnos adquieran una adecuada comprensión y ejercitación en los temas que contiene este libro. Al final, presentamos un breve resumen de las biografías de los principales científicos que abordaron estos estudios.

En el capítulo 1 se desarrollará de manera introductoria la Teoría Especial de la Relatividad. Se describirá el experimento de Michelson y Morley, el cual refutó la teoría del éter. Se enunciarán los postulados de la Teoría Especial de la Relatividad. Se definirán las Transformaciones de Lorentz. Se desarrollarán las consecuencias físicas de estos enunciados.

En los capítulos 2, 3 y 4 se desarrollarán los tópicos que evidenciaron experimentalmente la necesidad de una nueva teoría física. Estos tópicos son: Radiación de Cuerpo Negro, Efecto Fotoeléctrico y Efecto Compton.

En el capítulo 5 se describirán fenomenológicamente y de manera cronológica, los modelos atómicos anteriores al desarrollo formal de la Física Cuántica (modelo atómico de Thomson. Modelo atómico de Rutherford y modelo atómico de Bohr)

En el capítulo 6 se describirán el Postulado de Louis de Broglie y el Principio de Incerteza de Heisenberg mostrando que la naturaleza de estos conceptos no tiene asidero en la Física Clásica. Se relacionarán estos conceptos con el nacimiento de una nueva teoría, la Teoría de Schrödinger de la Física Cuántica que será analizada en el capítulo 7.

En el capítulo 7 se introducirá al alumno en este nuevo marco conceptual de la física a partir del Postulado de Born de la densidad de probabilidad. Se darán argumentos físicos para comprender que la solución de la ecuación de Schrödinger de un sistema físico unidimensional contiene la información física necesaria para describir a tal sistema. Y se ejemplificará con el caso de una partícula cuántica en diversos potenciales de una dimensión espacial.

En el capítulo 8 se resolverá el caso real de tres dimensiones del electrón en el átomo de Hidrógeno. Se mostrará cómo se resuelve matemáticamente el problema. Y a partir de esta solución, se definirán los observables físicos de interés y su relación con los números cuánticos del electrón en el átomo de Hidrógeno, obtenidos de la solución del problema. Luego se describirá como se completa la Tabla Periódica de los Elementos a medida que aumenta el número atómico Z .

En el capítulo 9 se desarrollará la física relacionada con el hecho de tener partículas que no pueden distinguirse entre sí. En este nuevo marco conceptual, matemáticamente es necesario definir nuevas funciones que hagan indistinguibles las partículas idénticas (función de onda simétrica y antisimétrica). Se describirá que tipo de partícula describe cada función de onda. Luego se desarrollará el comportamiento estadístico de sistemas físicos con muchas partículas idénticas indistinguibles. Se analizarán el caso de partículas descritas por funciones de onda antisimétricas (fermiones) y el caso de partículas idénticas descritas por funciones de onda simétricas (bosones). Se comparará los resultados obtenidos con el caso de partículas distinguibles.

Finalmente, en el capítulo 10 se analizará desde un punto de vista fenomenológico la formación de una red cristalina en función del enlace atómico entre los átomos de la red. Se describirán los diferentes tipos de enlaces atómicos y su relación con las características físicas del sistema. Por último, se desarrollarán las diferentes estructuras de bandas de energía según el tipo de material sólido en cuestión.

Índice

Capítulo 1

Teorías de la relatividad	12
Introducción	12
Teorías de relatividad	14
El experimento de Michelson y Morley: un capítulo en la historia de la física	18
La Mecánica de Newton y el electromagnetismo frente a la relatividad de Galileo	22
Los postulados de Einstein	26
Consecuencias de las transformaciones de Lorentz	31
Cambio en la dinámica Newtoniana	40
Expresión de la cantidad de movimiento relativista	40
Concepto de masa relativista	43
Energía relativista	46
Resumen final	47
Problemas resueltos	48
Problemas propuestos	49

Capítulo 2

Radiación de cuerpo negro	52
Introducción	52
La radiación térmica de un cuerpo negro	52
Nomenclatura radiométrica y sistema de unidades	53
El espectro de radiación de cuerpo negro	56
Las leyes de la radiación de Kirchhoff	58
Las leyes empíricas de la radiación térmica	60
Ley de Stefan-Boltzmann (1879)	60
Ley de desplazamiento de Wien (1893)	60
La física clásica y la forma del espectro de cuerpo negro	61
La aproximación de Wien (1896)	61

La teoría clásica de Rayleigh-Jeans de la cavidad radiante (1899)	62
La teoría cuántica de Planck de la cavidad radiante (1900)	65
La Ley de Planck	66
Deducción de las leyes empíricas de la radiación térmica	68
Aplicaciones y cuestiones prácticas	69
Cámaras y pistolas térmicas	69
Formas de determinar el valor de emisividad de una superficie	71
Aplicaciones de materiales con baja emisividad	72
Problemas resueltos	72
Problemas propuestos	75
Capítulo 3	
Efecto fotoeléctrico	78
Introducción	78
Efecto Fotoeléctrico: esquema experimental	79
Resultados experimentales obtenidos por Hallwachs	81
Dificultades para la explicación del Efecto Fotoeléctrico con la teoría electromagnética clásica de Maxwell.	85
Teoría Cuántica de la Luz (Einstein, 1905)	86
Consecuencias de la cuantización de la luz	90
Aplicaciones	92
Aplicaciones tecnológicas	93
Paneles solares	93
Fotocopiadora	95
Problemas resueltos	96
Problemas propuestos	100
Referencias	102
Capítulo 4	
Radiación x. Ley de Bragg. Efecto Compton	103
Introducción	103
Emisión de rayos X	104
Emisión de radiación X continua	104

Emisión de radiación X característica	106
Difracción de rayos X en cristales	106
El efecto Compton	108
El experimento de Compton	108
El modelo de Compton	110
Usos y aplicaciones de los Rayos X, la difracción de Bragg y el efecto Compton	113
Problemas resueltos	114
Problemas propuestos	121

Capítulo 5

Modelos atómicos	124
Introducción	124
Espectros de Gases	126
El espectroscopio	127
Espectro de emisión del Hidrógeno (H)	128
El electrón	129
Experimento de rayos catódicos de J.J. Thomson	130
Experimento de la gota de aceite de R. Millikan	133
Conocimientos “a priori” sobre el átomo.	136
Modelos Atómicos	137
Modelo Atómico de Dalton	137
Modelo Atómico de Thomson (modelo del “budín de pasas”)	137
Experimento de Rutherford, Marsden y Geiger	138
Modelo Atómico de Rutherford	140
Modelo Atómico de Bohr	143
Principio de correspondencia	149
Extensión del Modelo de Bohr	150
Límites del Modelo de Bohr	151
Comentarios finales	151
Problemas resueltos	152
Problemas propuestos	155
Referencias	157

Capítulo 6

Propiedades ondulatorias de la materia	158
Ondas de materia	158
La hipótesis de Louis de Broglie	158
El experimento de Davisson y Germer	158
Principio de complementariedad de Bohr	160
Función de onda y la interpretación de Max Born	162
Propiedades de la función de onda. Paquete de ondas.	163
Principio de indeterminación de Heisenberg	168
Comentarios sobre las desigualdades de Heisenberg	173
Usos y aplicaciones de las propiedades ondulatorias	173
Los microscopios electrónicos MET y SEM	173
Problemas resueltos	175
Problemas propuestos	177

Capítulo 7

Mecánica cuántica: ecuación de Schrödinger 1D	179
Introducción	179
La ecuación de Schrödinger unidimensional a partir de los postulados de de Broglie-Einstein	180
Interpretación de Max Born de las funciones de onda	182
Valores de expectación	183
La ecuación de Schrödinger unidimensional, independiente del tiempo.	185
Soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.	187
Potencial cero	187
Potencial escalón	189
Energía de la partícula menor que la altura del escalón $E < V_0$	189
Energía de la partícula mayor que la altura del escalón $E > V_0$	193
Barrera de potencial	197
Barrera de potencial para el caso $V_0 > E$	198
Barrera de potencial para el caso $V_0 < E$	202
Potencial de pozo cuadrado	205

Potencial de pozo cuadrado infinito	212
“El Gato de Schrödinger”	215
Problemas resueltos	217
Problemas propuestos	223
Capítulo 8	
Ecuación de Schrödinger 3D: el átomo de Hidrógeno y la Tabla periódica	225
Solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de Hidrógeno	225
Impulso angular orbital	229
Experimento de Stern y Gerlach	233
Interacción espín-órbita	235
Impulso angular total	237
Llenado de la Tabla Periódica	240
Problemas resueltos	244
Problemas propuestos	249
Capítulo 9	
Estadísticas cuánticas	251
Partículas idénticas	251
Introducción	251
Indistinguibilidad de partículas idénticas.	253
Funciones de onda simétricas y antisimétricas	255
Bosones y Fermiones	257
Funciones de onda para un número N de partículas (con N mayor que 2)	258
Estadísticas cuánticas	258
Introducción	258
Distribución de Maxwell-Boltzmann	259
Distribución de Bose-Einstein	264
Distribución de Fermi-Dirac	266
Comparación de las distribuciones	268
Límite clásico de las estadísticas de Fermi-Dirac y Bose-Einstein	271
Problemas resueltos	272
Problemas propuestos	280

APÉNDICE	281
Distribución de Maxwell–Boltzmann empleando el formalismo de la mecánica estadística	281
Capítulo 10	
Teoría de bandas	285
Estructura periódica de los sólidos	285
Modelo de Kronig-Penney	287
Masa efectiva	292
Enlaces químicos y comportamiento electrónico	294
Posición y dispersión de las bandas y su relación con el comportamiento eléctrico	296
Resumen final	299
Problemas resueltos	300
Problemas propuestos	306
Capítulo 11	
Biografías de científicos	308
Max Planck (Alemania, 1858-1947).	308
Joseph J. Thomson (Reino Unido, 1856-1940)	309
Robert Millikan (Estados Unidos, 1868-1953)	310
Albert Einstein (Alemania, 1879-1955)	311
William Henry Bragg (Inglaterra, 1862-1942) William Lawrence Bragg (Australia/Inglaterra 1890-1971)	312
Arthur Compton (Estados Unidos, 1892-1962)	313
Louis de Broglie (Francia, 1892-1987)	314
Ernest Rutherford (Nueva Zelanda/Reino Unido 1871-1937)	315
Niels Bohr (Dinamarca, 1885-1962) / Werner Heisenberg (Alemania, 1901-1976).	316
Erwin Schrödinger (Austria, 1887-1961)	317
Wolfgang Pauli (Austria, 1900-1958)	318
Dmitri Mendeléyev (Rusia, 1834-1907)	319
James Clerk Mawell (Escocia, 1831-1879)	320
Paul Dirac (Reino Unido, 1902-1984)	321
Ludwig Boltzmann (Austria, 1844-1906)	322
Enrico Fermi (Italia, 1901-1954)	323

Satyendra Nathan Bose (India, 1894-1977)	324
Maria Salomea Skłodowska-Curie (Polonia/Francia, 1867-1934)	325
Lise Meitner (Austria, 1878-1968)	327
Congresos Solvay	328
Inflaciones eran las de antes...	329
Premio Nobel	329
Referencias	330
Bibliografía recomendada	332
Los autores	333

CAPÍTULO 1

Teorías de Relatividad

Introducción

Antes de llegar a este punto, hemos transitado un largo aprendizaje de las leyes de la física, y, sobre todo, de cómo aplicarlas a las actividades propias de cada una de las distintas ramas de las ingenierías. De cierta forma se ha ido escalando, desde las situaciones más simples a las de mayor complejidad. Primeramente, estudiamos la Mecánica, basada en las Leyes de Newton. Ahí, fuimos conociendo cómo hacer modelos que tengan capacidad de predecir lo que va a ocurrir en un futuro próximo en base a ciertas condiciones iniciales, y fuimos desarrollando, primero el movimiento puro, sin relacionarlos con las causas, lo que llamamos *Cinemática*. Luego lo relacionamos con las causas: aparecen por primera vez las Leyes de Newton, que nos dan el nexo entre la causa y el efecto. A esto llamamos *Dinámica*. En este transitar fuimos desde lo simple, las “partículas”, a algo más complejo: los “cuerpos *extensos*”, pero rígidos. En ese proceso inicial aparecieron por primera vez conceptos muy fuertes y de total relevancia, como ser la masa, la fuerza, la gravedad, la cantidad de movimiento lineal, las energías cinética, potencial y mecánica, el trabajo, el impulso, el torque, el momento de inercia, el centro de masas, la cantidad de movimiento angular, los teoremas de Trabajo-Energía Cinética y Trabajo-Energía Mecánica, y las ondas que llamamos “mecánicas”.

Luego, en una segunda instancia, estudiamos Electromagnetismo. En esta parte del aprendizaje no analizamos fuerzas genéricas, sino las que tienen origen en las interacciones eléctrica y magnética. Su tratamiento matemático resultó ser un poco más costoso, ya que en esta rama de la física resulta casi imposible reducir la dimensionalidad de los problemas, lo que nos demandó un análisis vectorial en tres dimensiones a lo largo de todo el curso. En esta parte aprendimos las leyes que relacionan las fuerzas derivadas de las cargas y corrientes eléctricas. Definimos los campos \mathbf{E} y \mathbf{B} , como funciones de la posición y el tiempo, así como sus fuentes, y las densidades de energía correspondientes. Estudiamos las Leyes de Gauss Eléctrica y Magnética, la Ley de Faraday y la Ley de Ampere-Maxwell. Analizamos circuitos electromagnéticos en condiciones estáticas, transitorias y periódicas, junto con las leyes de Kirchhoff, y con todo esto pudimos conocer muchos de los fenómenos más relevantes de la ingeniería, que conformaron una gran parte de los inventos que, junto con otros, llevaron a la Revolución Industrial, un cambio de era para la humanidad entera: ¿Qué cambió? Cambiaron la industria, las máquinas, los procesos de fabricación, la automatización, la forma de transporte, las posibilidades de comunicarse, y todo ello tuvo implicancias en otros ámbitos: el desarrollo económico, la educación, las leyes laborales, por sólo citar algunos ejemplos. También la forma

de hacer la guerra, pero, por suerte, a su vez se generó mayor producción y bienestar, con fortísimo impacto también en la medicina y en la capacidad de diagnóstico. En esta instancia podemos decir que, así como lo aprendido anteriormente en Mecánica surge de la síntesis realizada por Newton en sus tres leyes, todo lo aprendido sobre electromagnetismo, queda a su vez comprendido en las cuatro Ecuaciones de Maxwell, junto con la Fuerza de Lorentz y la Ecuación de Continuidad. Luego, podemos valernos de todas ellas para estudiar el movimiento de cuerpos que tengan masa y a su vez cargas o corrientes eléctricas: una vez determinadas las fuerzas de origen electromagnético, podemos predecir el movimiento ulterior usando las Leyes de Newton. Así lo hemos hecho por ejemplo en el estudio del espectrómetro de masas, en la deflexión de un electrón en un tubo de rayos catódicos, en el cálculo del torque de una espira de corriente en un campo magnético, entre otros.

Con estas leyes, hemos adquirido herramientas enormes para el cálculo predictivo en todas las actividades de la ingeniería. Impactan en forma directa en la profesión, siendo parte de los pilares fundamentales para el ejercicio de desarrollar soluciones oportunas y económicamente viables para las más diversas temáticas. Pero, para utilizarlas sin temores a equivocarnos, antes debemos repasar a qué llamamos "*ley*". Claro que, en física, no hay un congreso que las vote, ni un poder ejecutivo que las promulgue, ni un poder judicial que las haga cumplir. Hablamos de leyes naturales, en todo caso, digamos que la "naturaleza" cumplió todos esos roles, ¡más el de la redacción! Entonces, podríamos preguntarnos si las leyes naturales cambian con el tiempo, o tienen límites o rangos de validez, o por el contrario llamamos ley a algo que es de naturaleza tan profunda que no tiene excepciones, es inmutable, es válida en todo el universo en todos los tiempos. Incluso en condiciones extremas como dentro de un agujero negro. *¿Son de esa naturaleza las Leyes de Newton y las Leyes de Maxwell?* Sólo sabiendo eso podremos contestar una licitación cotizando nuestro producto calculado en base a ellas sin poner en riesgo a la empresa en la que trabajamos. Y la verdad es que aún no hemos realizado ese análisis, y es el momento oportuno para hacerlo.

Vamos a intentar responder a la pregunta *¿a qué llamamos ley natural?*, pero también a la pregunta *¿a qué llama la comunidad científica ley?* En referencia a las primeras, podemos decir que todos, o al menos una inmensa mayoría de las personas, pensamos que sí existen, pero que no las conocemos, aún, pero vamos achicando diferencias. A lo largo de la historia el conocimiento científico fue abarcando nuevas áreas y escalas, desde lo más pequeño a lo más inmenso. Si existen esas leyes, de alguna manera pensamos que existe el orden, el comportamiento repetitivo, la previsibilidad, el poder predictivo de la física a través de las matemáticas. Ahora conocerlas, o mejor dicho ponerlas de manifiesto, no es tarea fácil. En la historia de la ciencia podemos observar que *lo que más se han producido fueron refutaciones*, es decir, encontrar falta de validez de algo que se consideraba ley. Debemos resaltar aquí la enorme *diferencia entre una ley y un teorema*. Justamente, el teorema tiene una demostración, una igualdad entre dos miembros de una ecuación puede ser deducida a partir de otros saberes más simples. En cambio, en la búsqueda de las leyes naturales, llegamos a un punto donde algo que se observa experimentalmente, no tiene explicación en términos de otros saberes, y decimos

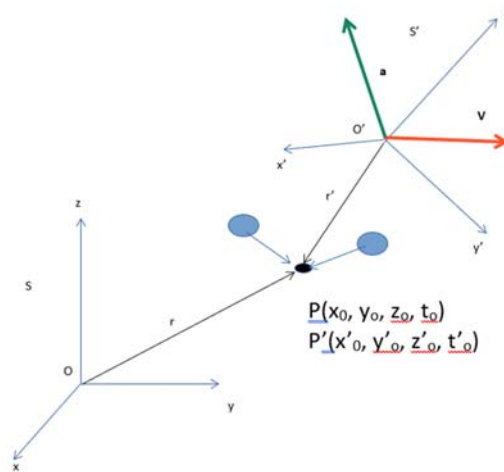
que, simplemente, *“la naturaleza es así”*. Podemos dar como ejemplo la fuerza de Coulomb, también, la fuerza gravitatoria. ¿A qué llamaremos ley? Llamaremos ley a algo que, *no tenga explicación en términos de cosas más simples, y que en su mínima expresión abarque la mayor cantidad de fenómenos posible*: algo que en su expresión matemática *describa una interacción elemental, desde lo cual poder explicar los sistemas más complejos*. ¡Por eso, una cuestión muy importante es el número! Las leyes no deben ser redundantes, por ejemplo, que una se deduzca de otras dos. ¡No sería una ley entonces! Ahora bien, existen distintas formas de enunciar las leyes, como las de Newton. Pero, por más que los enunciados cambien, el número seguirá siendo tres, así como las de Maxwell cuatro. Por supuesto, *las leyes seguirán siendo leyes mientras sean corroboradas por el experimento*. Una ley dejará de serlo cuando, o bien, sea *refutada por al menos un experimento*, o bien, se hayan obtenido saberes más elementales, que hace que ahora con ellos sea posible *“deducir” lo que antes no*. Esa ley pasará entonces a ser un “teorema”. Desafortunadamente en la física y en la química, por cuestiones históricas y costumbres, muchos hallazgos que, en su momento fueron llamados “ley” por no tener explicación en términos del conocimiento de la época, pero que luego sí la tuvieron, se las sigue llamando ley en algunos ámbitos. Son ejemplos la Ley de Wien, La Ley de Dalton, la Ley de los gases ideales, etc. Claro está que cuantas menos leyes mejor: más compacta es la teoría y más abarcadora, con menos enunciados. ¡Y para los estudiantes, menos cosas para recordar! La ciencia ha avanzado mucho en las últimas décadas en esta dirección. Lo estudiado en electromagnetismo es un buen ejemplo de ello: Las ecuaciones de Maxwell unen dos fenómenos aparentemente diferentes e inconexos como la electricidad y el magnetismo en una única teoría. Así, al día de hoy se ha ido reduciendo el número de leyes conocidas que describen a las interacciones, que a primeras vistas parecieran ser diferentes: el electromagnetismo se fundió con la interacción débil, formando una única teoría para la interacción “electrodébil”. Quedan aún como diferentes, la interacción fuerte (la que ocurre entre partículas intranucleares), y la gravitación. Ojalá podamos ser testigos de cuando se llegue a la gran unificación de las leyes naturales, en una única teoría, que sea capaz de abarcar todos los fenómenos conocidos.

Teorías de relatividad

¿Qué es una teoría de relatividad? Y ¿qué tiene que ver con la física? En casi todos nosotros existe la creencia de que los fenómenos ocurren, sin relación con quien los esté observando. El suceso o fenómeno se produce por causas externas al observador, tiene existencia propia y obedece a las leyes de interacción propias de lo que esté ocurriendo, por ejemplo, una colisión entre dos bolas de billar. Más adelante en este libro veremos que esta independencia de los sucesos con el observador deberá ser revisada en el ámbito de la mecánica cuántica. Fuera de ese ámbito, resulta que esa independencia nos da la *libertad de observar* (medir) un fenómeno desde dónde nos resulte más ventajoso, con la seguridad de que observaremos lo mismo sin importar nuestra elección. Claro, siendo así, esto nos conecta inmediatamente con los sistemas

de referencia: dos observadores distintos (cada uno encontró ventajoso una ubicación diferente) deben ver el mismo fenómeno, pero, junto a cada observador va atado su propio sistema de referencia (SR). Y un sistema de referencia es un conjunto de coordenadas espaciales, más el tiempo. Así, en la Fig. 1.1 vemos una colisión de bolas de billar, observada por dos observadores distintos, cada uno con su propio sistema de referencia.

Figura 1.1



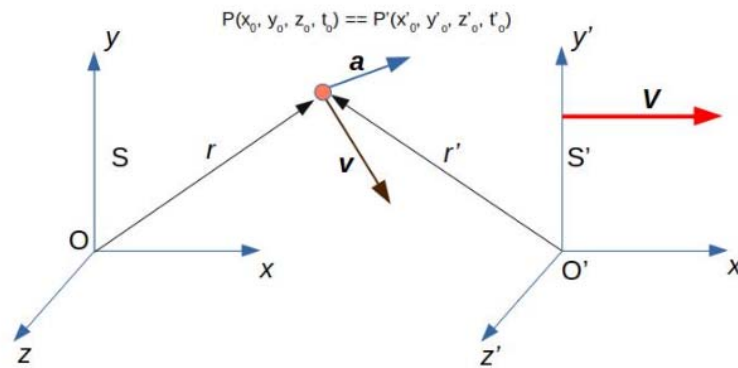
Nota. Dos observadores diferentes observan una colisión de dos bolas de billar y miden la posición del impacto en sus sistemas de referencia respectivos, S y S'. S' se mueve con respecto a S con velocidad v y aceleración a .

Por ejemplo, para el observador A en su SR que llamaremos S la colisión ocurrió en (x_0, y_0, z_0, t_0) y para el observador B, en su propio SR, S', éste anotó la colisión en (x'_0, y'_0, z'_0, t'_0) . Llamamos "teoría de relatividad" simplemente a *las fórmulas que predigan cuáles serán esas coordenadas (x'_0, y'_0, z'_0, t'_0) para el observador S', conociendo las de S, junto con la posición, velocidad y aceleración del SR S' "relativo" al SR S*. Dicho de otra manera, cómo convertir las coordenadas y el tiempo de un SR al otro, conociendo el movimiento que hay entre ellos. Eso es todo, y dicho así, pareciera que tiene muy poco que ver con la física, es un problema relativamente simple matemático de transformación de coordenadas.

Veamos un ejemplo simple de esto. Para evitar complicaciones matemáticas que pudieran aparecer en el caso en que los SR estén rotados uno con respecto al otro, en lo que sigue de este capítulo supondremos que los dos observadores han elegido *ejes cartesianos paralelos entre los dos sistemas* como en la Fig. 1.2. Junto con ello, diremos que en el instante que llamaremos $t=t'=0$ los dos orígenes de coordenadas coinciden en el mismo punto, y finalmente, que el sistema S' se mueve con velocidad constante V relativo a S, y que ese vector V es paralelo al eje de las x. Estas simplificaciones no cambian el contenido de lo que se quiere poner de manifiesto, solo facilitan las matemáticas inherentes. Ahora, en el punto $P(x, y, z)$ en el instante

t , el observador S detecta un objeto que viaja con velocidad $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ y aceleración $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$. ¿Cómo serán estas magnitudes vistas desde S'?

Figura 1.2



Nota. Un objeto (punto naranja) siendo observado por dos SR diferentes S y S'. Los ejes de S y S' son paralelos, y en un instante $t = t' = 0$ los orígenes O y O' coinciden.

Intuitivamente diríamos, varias cosas: primero, si los cronómetros de S y S' marcaban cero cuando se cruzaron los orígenes, entonces el tiempo seguirá corriendo igual para los dos, es decir: $t = t'$ en cualquier instante posterior. ¡Esta asunción, que normalmente hacemos en forma intuitiva y no analizada es muy importante! En segundo lugar, dado que el movimiento relativo entre S y S' es en la dirección de sus ejes cartesianos x o x' (a velocidad V) y los orígenes de coordenadas coincidieron a $t = 0$, entonces, las coordenadas y y z en ambos sistemas debe medir siempre lo mismo, es decir: $y = y', z = z'$. Por último, la coordenada x' del punto P' en el que está el objeto para S', se va desplazando hacia la izquierda en la figura, ya que S' se mueve hacia la derecha respecto de S, entonces: $x' = x - Vt$

Todo esto lo podemos escribir sintéticamente así:

$$\begin{cases} t' = t \\ x' = x - Vt \\ y' = y \\ z' = z \end{cases} \quad (1.1)$$

Dado que, en el esquema propuesto asumimos que $t' = t$, las derivadas con respecto al tiempo t o t' serán iguales, es decir: $\frac{d}{dt} = \frac{d}{dt'}$

Entonces, pueden derivarse ambos miembros de la Ec. (1.1), pero, a la izquierda con respecto a t' , y a la derecha con respecto a t (aquí vemos la importancia de la asunción realizada sobre la igualdad de los tiempos en S y S'), obteniendo:

$$\begin{cases} v'_x = v_x - V \\ v'_y = v_y \\ v'_z = v_z \end{cases} \quad (1.2)$$

Y repitiendo el procedimiento (ya que supusimos V constante):

$$\begin{cases} a'_x = a_x \\ a'_y = a_y \\ a'_z = a_z \end{cases} \quad (1.3)$$

El conjunto de las Ecs. (1.1), (1.2) y (1.3) representan lo que se llamó “*Teoría de la relatividad de Galileo*”. Como vemos, no sólo nos permiten transformar las coordenadas, sino también las velocidades y las aceleraciones de objetos en movimientos vistos en dos SR diferentes S y S' , con la particularidad de que S' no presenta aceleración con respecto a S , pero sí se mueve con una velocidad constante V . Si en el ejemplo elegido V no fuera constante, y tuviera una aceleración $A = \frac{dV}{dt}$ paralela al eje x , la Ec. (1.3) cambiaría simplemente por: $a'_x = a_x - A$. Hasta este punto no tendría mayores implicancias, ya que sólo estamos haciendo matemáticas. Sin embargo, la elección del ejemplo de tener una velocidad constante entre diferentes SR será de crucial importancia en la *Dinámica*, como se verá en lo que sigue.

Esta teoría de relatividad, que acabamos de obtener de consideraciones simples e intuitivas, es la que hemos venido utilizando, tal vez sin darnos cuenta o ponerle un nombre, cuando trabajamos con problemas relacionados con el movimiento: movimiento rectilíneo uniforme MRU (el sistema S' se pone justo arriba del móvil y con su misma velocidad $v = V$, Ec. (1.1)), o la regla de adición de velocidades (Ec. (1.2)). Sin embargo, no hemos aplicado ninguna ley física para obtenerlas. *¿Dónde aparecerá la física en estas consideraciones?* La física va a aparecer cuando una ecuación relacione una *interacción* (causa: la fuerza) con un *movimiento consecuente* (efecto: el cambio en su estado de movimiento), como, por ejemplo: la segunda Ley de Newton:

$$\mathbf{F} = \frac{d}{dt} (m\mathbf{v}) \quad (1.4)$$

o, cuando aparezca una *interacción* (efecto: la fuerza natural resultante) *en términos de sus fuentes* (causas, que podrían estar en movimiento), como, por ejemplo, la Ley de Lorentz:

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

Por lo que dijimos antes, no esperamos que la presencia del observador cambie la naturaleza del fenómeno observado. Y por supuesto, la elección del SR del observador tampoco. Por ejemplo, el valor de la fuerza sobre una masa m producida por un campo gravitatorio uniforme como el de la superficie de la tierra (el peso), no debiera depender del observador, es decir, debe ser la misma para todos los observadores posibles, nada tiene que ver con ellos, y todos deberían poder diferenciar esta fuerza de otros efectos relacionados con su SR (por ejemplo, su propia aceleración). De entre todos los observadores posibles, algunos estarán en SR inerciales, y *en estos SR valen las Leyes de Newton*, en particular la segunda (Ec. (1.4)). Los miembros de este subgrupo de observadores podrían *calcular* la fuerza (miembro izquierdo) tomando registro

detallado del movimiento ulterior (miembro derecho, es decir, calcular el cambio por unidad de tiempo en los valores del producto entre la masa y la velocidad medida en su sistema particular a intervalos regulares), y todos, ahora sí *haciendo física predictiva*, deberían acordar (calcular) que la interacción (la fuerza), obtenida de la Ec. (1.4) es la misma a pesar de que cada observador en cada SR midió velocidades diferentes en función del tiempo. Si así no fuera, *estaríamos frente a un severo problema*. Muy severo, realmente, tanto como para tener que o bien descartar la teoría (en este caso sería la segunda ley de Newton), o bien descartar las fórmulas de relatividad (Ecs. (1.1), (1.2) y (1.3)), ¡o ambas! Ahora sí, ¡apareció la física!

En la próxima sección analizaremos un hecho notablemente curioso de las predicciones del electromagnetismo, y en la siguiente se analizará si lo que aprendido hasta el día de hoy: la Mecánica de Newton, y el electromagnetismo de Maxwell presentan o no dificultades de este tipo.

El experimento de Michelson y Morley: un capítulo en la historia de la física

Tal como hemos aprendido anteriormente, las ecuaciones de Maxwell predicen que, en el vacío, y en ausencia de cargas y corrientes, campos eléctricos y magnéticos variables en el tiempo se *“propagan” en el espacio y en el tiempo* de forma tal de conformar lo que se ha dado en llamar “onda”. Y no sólo eso, ya de por sí curioso, sino que, además, esas ondas *viajan a velocidad finita c* . Esas ondas transportan energía y cantidad de movimiento. Estos hechos se desprenden de las ecuaciones, como seguramente ya han estudiado en los cursos anteriores, y fueron verificados experimentalmente en forma inmediata por Faraday, Hertz, Marconi, entre otros. Junto con la verificación de la experiencia, debemos agregar que, en la época, el conjunto de predicciones acertadas y el mundo nuevo descubierto y sintetizado en las ecuaciones de Maxwell conformó un avance rotundo. Sin embargo, no todo fue comodidad y festejo: las ondas electromagnéticas pusieron en jaque muchas creencias, de forma tal que sus propiedades resultaron difíciles de aceptar como última realidad, más bien *parecía que había algo más en el medio*.

En primer lugar, que puedan existir ondas en el vacío ya fue motivo de un gran desconcierto. Las ondas previamente conocidas, las mecánicas, ocurren sobre un medio material que las soporta. Más allá de las matemáticas inherentes, no resultan difíciles de entender. Por ejemplo, si se tensa una cuerda y se la jala bruscamente de un extremo hacia arriba, no resulta demasiado sorprendente el mecanismo de propagación: cada elemento pequeño de longitud de la cuerda al subir jala hacia arriba al siguiente, el que, *al tener masa*, demora por su inercia en cambiar su estado de reposo y llegar a alcanzar la altura a la que es llevado, mientras a su vez, en su subida jala del siguiente, que también tiene masa y su correspondiente demora y así siguiendo. Tal como si se transmitiera un mensaje en una fila de personas dándole una nota al primero y esperando el pase de mano en mano hasta que le llegue al último. Para que esto

ocurra, hace falta un medio elástico, como la cuerda, y las ondas producidas viajarán con una velocidad que justamente dependerá de la masa de la cuerda por unidad de longitud, y por supuesto de la tensión. Contrario a este análisis, en el vacío, *la ausencia de todo, no hay nada que vincule lo que pasa en un punto con el siguiente*. ¿Cuál sería el mecanismo para que el campo eléctrico en un punto o intervalo diferencial sea transferido al punto o intervalo siguiente en un lapso finito, y a la vez copie el del punto anterior, en ausencia de cargas y corrientes? ¿Cómo se propaga un mensaje en una fila de personas que faltaron a la cita? Si el mensaje aun así se propaga, ¿habrá personas que no se están detectando?

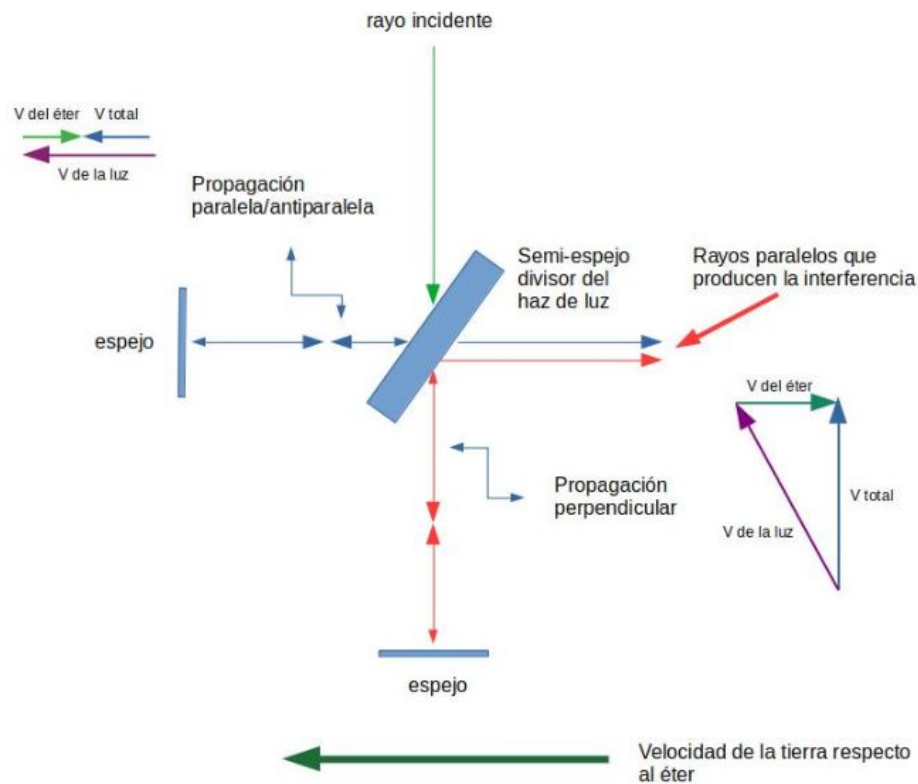
En segundo lugar, la predicción de que las ondas electromagnéticas se propagan a una *velocidad finita* c parecía ser la prueba de que justamente había algo allí: ¡el vacío no estaría tan vacío como aparenta! Esto, porque no se espera que la nada, la ausencia, tenga propiedades de ningún tipo. El vacío no debería tener color, perfume, recuerdos, caprichos ni propiedades físicas, ¡porque no hay nada ahí! Cualquier magnitud en la nada o bien vale cero o bien infinito, pero no 5 g/cm^3 , o $4,52 \text{ l/m}^2$, o $3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$. Vale decir, las ondas electromagnéticas o bien no se propagan ($c = 0$) o bien no se deberían andar demorando en el camino vacío ($c = \infty$). Esta última opción era la que se consideraba en esos tiempos para todas las interacciones en general en el vacío (la interacción a distancia), esta cuestión se tratará más adelante.

Así, se ideó la existencia de una sustancia, que llenara todo lo vacío, pero claro, a su vez resultara de difícil detección, ya que no había aparecido en ningún experimento anterior: el “éter”. Huygens, a quien se debe principalmente la idea del éter en la ciencia, indicaba que el éter era imponderable, incompresible, homogéneo, único, de elasticidad perfecta, sin resistencia al movimiento, que lo penetra todo y que es asiento de las excitaciones eléctricas, luminosas y térmicas. A su vez, Lord Kelvin indicaba que el sólido elástico que forma el éter goza de propiedades excepcionales para un sólido. Su extrema rigidez, debe combinarse con una densidad extremadamente débil para que no pueda retrasar con su frotamiento la traslación de los astros por el espacio. Con la existencia planteada del éter, por un lado, se hacía comprensible lo incomprensible. Pero, a su vez, sus propiedades tan disímiles provocaban nuevas contradicciones. Por ejemplo, en los sólidos la velocidad de propagación de las ondas mecánicas depende de su módulo de elasticidad longitudinal. Una velocidad tan enorme como c , implica un módulo de elasticidad también enorme, mucho mayor que el de cualquier sólido conocido. Sin embargo, el éter pareciera ser tan leve, como para no producir ningún tipo de rozamiento...

Los físicos del XIX atribuyeron a la luz las mismas características de las de una onda mecánica. La luz, debe de propagarse con velocidad fija de modulo “ c ” con respecto a su medio de propagación, el éter. Además, la velocidad de la luz en un sistema que se mueve respecto al éter *podría hallarse por la fórmula clásica de adición de velocidades*. El éter, era un sistema en reposo absoluto lo que indica que cualquier velocidad medida respecto de él, será una velocidad absoluta. Para llegar a esta conclusión, partieron del supuesto que la luz se propagaba con velocidad “ c ”, solo en el éter, y que *las ecuaciones de Maxwell, solamente serán válidas para el sistema del éter*.

Un primer análisis nos diría que, si este fluido se encuentra en reposo absoluto, al movernos, *deberíamos percibir un “viento del éter”*. Y en este sentido Michelson y Morley, en el año 1881, diseñaron un interferómetro para demostrar la existencia del viento del éter, de la misma forma que con la atmósfera en calma percibimos el viento en un automóvil (uno con techo convertible). La tierra no puede estar siempre estacionaria con respecto al éter, porque, en su viaje alrededor del sol, cambia de dirección al menos dos veces al año. El aparato que diseñaron (junto con otros) consiste en dividir en dos un rayo de luz por medio de una superficie semi espejada. El rayo reflejado que sale hacia la izquierda en la Fig. 1.3 luego se refleja hacia la derecha en un espejo, y parte de él atraviesa la superficie semi espejada viajando hacia la derecha en la figura, mientras que el rayo refractado en el semi espejo que viaja hacia abajo, luego se refleja y sube en la dirección del semi espejo, donde se refleja y comienza a viajar hacia la derecha junto con el anterior. De esta manera, estos dos rayos interfieren sobre una pantalla, siendo la diferencia de fase entre ellos dependiente de la diferencia de tiempo entre los dos rayos en su viaje desde el punto en que se dividen en dos, hasta que se juntan nuevamente en la superficie semi espejada y salen paralelos hacia la pantalla a la derecha.

Figura 1.3



Nota. Esquema del dispositivo experimental de Michelson y Morley

El interferómetro fue diseñado de forma tal de medir justamente este efecto de interferencia: *la luz que viaja en sentido paralelo o antiparalelo a la velocidad de la tierra sobre el éter tardará un tiempo distinto que la que lo hace en la dirección perpendicular*, produciendo entonces, franjas de interferencia. Esto es así si se utiliza la fórmula clásica de adición de velocidades. La clave es que todo el aparato pueda rotarse: así, dependiendo de la orientación del aparato con respecto al movimiento de la tierra a través al éter, al rotarlo 90° este desfase se invierte, ya que el rayo paralelo/antiparalelo se torna perpendicular, y recíprocamente.

Calculando los tiempos de cada tramo usando la fórmula usual de composición de velocidades:

$$\Delta t_{\parallel} = \frac{L}{c-v} + \frac{L}{c+v} = \frac{L(c+v)}{c^2-v^2} + \frac{L(c-v)}{c^2-v^2} = \frac{2Lc}{c^2-v^2} = \frac{2L}{c} \frac{1}{1-\frac{v^2}{c^2}}$$

$$\Delta t_{\perp} = 2L/\sqrt{c^2-v^2} = \frac{2L}{c} \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\Delta t_{\parallel} - \Delta t_{\perp} = 2L/c \left(\frac{1}{1-\frac{v^2}{c^2}} - \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \right)$$

Esta diferencia de tiempos es la que da origen a las franjas de interferencia, y estaba dentro del rango de lo que el aparato podía detectar. El experimento se realizó en diversas oportunidades, en diferentes épocas del año y con equipamientos cada vez más sofisticados y mejorados. *¡En todos los casos el resultado del experimento fue nulo!* Esto es, no hay diferencia de fase. Esto es, no hay diferencia en las velocidades transversales y paralelas/antiparalelas. El resultado significó un golpe muy fuerte. Se buscaron explicaciones de lo más diversas para justificar el resultado nulo de la experiencia de Michelson y Morley. Una de ellas, mencionaremos en particular: H. Lorentz y G. FitzGerald propusieron que, las longitudes de los objetos medidas en la dirección del viento del éter se contraen, con un factor $L = L_0 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$ siendo L_0 la longitud del elemento en reposo y v su velocidad respecto del éter. Si contraemos las longitudes paralelas en el experimento de Michelson con esa fórmula, veremos que efectivamente que $\Delta t_{\parallel} - \Delta t_{\perp} = 0$ y el resultado del experimento sería nulo. Efectivamente, esta explicación ad-hoc, mejoraba una situación (explicaba el resultado nulo), pero a la vez abría un abismo de interrogantes (¿Por qué?). Las mencionamos aquí porque, en base a su trabajo, las ecuaciones de transformación de coordenadas de una nueva teoría de relatividad diferente, que veremos más adelante, llevan sus nombres. En secciones siguientes veremos cómo con una explicación simple, aunque con consecuencias enormes, se descartó completamente la supuesta existencia del éter, y ¡el vacío volvió a estar vacío!

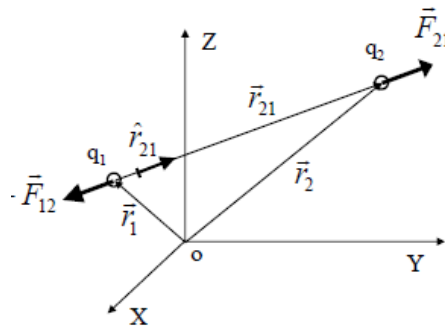
La Mecánica de Newton y el electromagnetismo frente a la relatividad de Galileo

Las Ecs. (1.1), (1.2) y (1.3) relacionan posiciones, velocidades y aceleraciones entre dos sistemas de referencia S y S', tales que el segundo se mueve con respecto al primero con una velocidad V paralela al eje x . Vemos en particular, de la Ec. (1.3), que las tres componentes de aceleración quedan inalteradas cuando se pasa de un sistema al otro. Esto es lo que ocurre entre SR inerciales. Entonces, cualquier ley física que relacione interacciones (fuerzas) con aceleraciones, quedará correctamente inalterada frente a un cambio de SR. Para introducir lenguaje, diremos que esas fuerzas serían invariantes frente a las transformaciones de coordenadas de la relatividad de Galileo. Y esto es lo deseable para que una teoría satisfaga que los observadores sean independientes de los sucesos. Por otro lado, vemos que tanto la coordenada como la velocidad en la dirección de V , sí se alteran, lo hacen según: $x' = x - Vt$ y $v'_x = v_x - V$. De aquí, podemos decir que ninguna ley válida (la fuerza es invariante frente a transformaciones de coordenadas entre SR inerciales.) podrá tener para las fuerzas expresiones matemáticas en función explícita de las coordenadas o las velocidades, a menos que éstas aparezcan en su fórmula de manera tal de dejar inalterado el valor de la función ante una transformación de coordenadas: por ejemplo, sí podrían contener diferencias de coordenadas o diferencias de velocidades Δx o Δv , ya que al hacer la resta los términos dependientes de la velocidad del observador V se cancelan mutuamente, y resultan iguales para todos los SR inerciales. Un ejemplo de este tipo es la Fuerza de Coulomb (ver Fig. 1.4):

$$\vec{F}_{21} = k_e \frac{q_1 q_2}{|\vec{r}_{21}|^2} \hat{r}_{21} \quad (1.5)$$

donde $\hat{r}_{21} = \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}$

Figura 1.4



Nota. Fuerza de Coulomb entre dos cargas q_1 y q_2 .

En esta expresión se puede ver que, si bien en la fórmula aparecen explícitamente las coordenadas \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 , éstas aparecen como diferencias $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ de manera tal que frente a

transformaciones de Galileo se cumple que: $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}'_1$ para cualquier SR inercial S' . Entonces, la fuerza calculada da el mismo valor en todos los SR inerciales. El mismo razonamiento aplica para la Ley de Gravitación, que tiene una expresión similar a la Ec. (1.5) para la fuerza gravitatoria, reemplazando las cargas por las masas, y la constante k_e por $-G$.

¿Qué pasa con la segunda Ley de Newton? Según la teoría clásica, la masa es una propiedad intrínseca de los objetos que la poseen. Intrínseca debe entenderse como algo que no cambia con respecto al observador ni con las interacciones al que la partícula esté expuesta. Al decir esto, también se dice entonces que la masa no depende ni de la posición ni de la velocidad, ni de las fuerzas a las que el objeto estuviere sometido. A diferencia de ello, el peso sí depende de las fuerzas ya que es el resultado de una interacción (por ejemplo, con un planeta, a una distancia variable), por ende, no es una propiedad intrínseca. Siendo así, para los casos en los que la masa no varía con el tiempo, esta ley puede escribirse:

$$\mathbf{F} = \frac{d}{dt} (m\mathbf{v}) = m \frac{d}{dt} \mathbf{v} = m\mathbf{a} \quad (1.6)$$

La fuerza entonces es directamente proporcional a la aceleración, y, cómo vimos, las aceleraciones dan el mismo valor en todos los SR inerciales (Ec. (1.3)). Concluimos entonces, que *la segunda Ley de Newton es invariante frente a transformaciones de Galileo*.

Detengámonos un poco aquí. La fórmula de la Ec. (1.6) junto con las ecuaciones de la relatividad de Galileo (Ecs. (1.1), (1.2) y (1.3)) tiene implícito algo que aún no hemos mencionado: *¡no hay forma de determinar el movimiento absoluto!* Ningún experimento mecánico, realizado en cualquier SR inercial, dará un resultado diferente. Resulta imposible decidir si un SR inercial está o no en reposo, en cuyo caso, sabríamos que son los demás los que se mueven. No cambiará el período de oscilación de un péndulo, el tiempo de caída de un objeto en caída libre, la órbita de un planeta ni el estiramiento de un resorte al cambiar entre diferentes SR inerciales. Esto, claramente no es así con SR no-inerciales, en los cuales fácilmente con experimentos sencillos podemos detectar su aceleración: por ejemplo, con un simple péndulo podemos determinar la rotación angular de la tierra sobre sí misma (Péndulo de Foucault), o medir indirectamente la aceleración lineal de un tren observando el desvío de la vertical del hilo del que pende un objeto colgado del techo. La imposibilidad de detectar el movimiento absoluto en SR inerciales es una simetría de la naturaleza, simetría que puede expresarse así: *“las leyes del movimiento son iguales para todos los SR inerciales”*. Recordemos esto para más adelante, porque sería deseable, si la naturaleza lo permite, que esta simetría se extienda no sólo a las leyes del movimiento, sino a *todas las leyes de la física en general*.

¿Qué ocurre con las interacciones en el electromagnetismo? Como vimos, la fuerza de Coulomb da el mismo valor en todos los SR inerciales, por ende, *es invariante frente a transformaciones de Galileo*. Pero, debemos observar que esto no se cumple en general. Sin ir más lejos, en la expresión de la Fuerza de Lorentz para una carga q que se mueve con velocidad \mathbf{v} en una región donde coexisten los campos eléctrico y magnético \mathbf{E} y \mathbf{B} :

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (1.7)$$

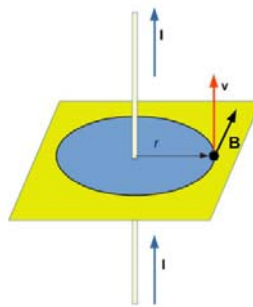
observamos una dependencia explícita y, en apariencia, no compensada *de la fuerza con la velocidad*. Decimos “en apariencia”, porque tal vez pueda haber una “compensación” de esta dependencia con la velocidad dentro de las fórmulas que definen los campos E y B que dejen finalmente invariante esta expresión para la fuerza. Si no hubiera tal compensación, distintos observadores S y S' medirían diferentes valores para la velocidad de la carga q , v y v' , con lo que el cálculo de la fuerza les daría diferente, y eso significaría un enorme problema. Imaginemos esta situación: por un hilo conductor circula una corriente I que genera a su alrededor un campo magnético B , el cual, conforme a lo que aprendimos en el curso de electromagnetismo utilizando la Ley de Ampere vale:

$$|\vec{B}| = \frac{\mu_0 I}{2\pi r} \quad (1.8)$$

y el vector de campo magnético apunta en la dirección tangencial de la circunferencia de radio r , de acuerdo con la regla de la mano derecha. Si en el punto indicado en la Fig. 1.5 existe una partícula con carga q que se mueve con velocidad v , ¿cómo utilizaríamos la Ec. (1.7) para calcular la fuerza que sobre ella ejercen los campos E y B ? Podríamos pensar que, en el conductor, la densidad de carga positiva es igual a la carga negativa. Esto porque, a pesar de que sabemos que los responsables de la corriente eléctrica son los electrones de conducción, y éstos se están moviendo, en ningún lugar del conductor hay acumulación de carga, por lo tanto, en un elemento de longitud dl el número de electrones que sale por un extremo es igual número de electrones que entra por el otro. Por ello, la carga neta, la suma de la carga negativa más la positiva del elemento dl del conductor sería nula, y entonces no habría campo eléctrico E fuera del conductor. Nos queda entonces para la fuerza de Lorentz sólo la parte magnética:

$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (1.9)$$

Figura 1.5



Nota. Una partícula con carga q y velocidad v se encuentra en el campo magnético producido por un hilo infinito de corriente I .

Si la carga q es positiva, y la velocidad v va paralela a la corriente hacia la arriba como en la figura, esto, por regla de mano derecha da una fuerza en la dirección al cable cuyo módulo vale:

$$F = \frac{qv\mu_0 I}{2\pi r} \quad (1.10)$$

¿Y qué valor se le da a la velocidad v en la Ec. (1.10)? Este punto no ha sido detalladamente tratado hasta ahora. ¿La velocidad de la partícula con respecto al cable conductor? Un observador en reposo con respecto al cable conductor, llamémosle S, mediría entonces una velocidad v para la partícula, y de acuerdo con el movimiento ulterior de aceleración de la partícula hacia el cable deduciría una fuerza conforme a la Ec. (1.10). Pero otro observador, en particular uno que se mueva junto con la partícula, llamémosle S', *para él la velocidad v' de la partícula es cero*. Este observador se movería también paralelo al cable, hacia arriba, con lo cual para él la corriente sería diferente I' , con lo cual, el campo magnético sería diferente, B' , conforme a la Ec. (1.8) reemplazando la I por I' . Pero el vector B' apuntaría en la misma dirección, al menos si la velocidad de la partícula, que es la que adquiere el nuevo observador, es menor que la velocidad de deriva de los electrones que conforman la corriente ahora llamada I' . Digamos que detectaría un campo magnético menor, porque éste es proporcional a la corriente, y la corriente I' sería menor que I . Pero él *no sentiría ninguna fuerza magnética que lo empuje hacia el cable*, porque el producto vectorial de la fuerza de Lorentz de B' con v' sería nulo, al ser nulo v' en S'.

Nos encontramos en este punto, o bien, al borde del desastre, o bien, al borde de una de las revoluciones científicas más importantes de la historia de la humanidad. Estamos calculando la fuerza que siente una partícula cargada en movimiento frente a un conductor, y vemos que *dos observadores diferentes miden fuerzas magnéticas diferentes*. Con lo que el movimiento ulterior así sin más sería diferente. Sólo podría salvarse la teoría en el caso de que para el observador S', *aparezca una fuerza eléctrica que compense el cambio en la fuerza magnética, es decir, que aparezca un campo eléctrico E' ausente en el sistema S*. Sin embargo, las consideraciones de neutralidad del elemento del conductor *dl siguen aplicando en el sistema S'*, con lo cual, no habría densidad de carga neta que generen un campo eléctrico tampoco en S'...

Un análisis detallado de esta situación publicado por R. Feynman (Premio Nobel 1965), que omitiremos aquí, muestra que efectivamente aparece un campo eléctrico E' ya que la densidad de carga neta nula del conductor en el sistema S, *deja de ser nula en el sistema S'*, y así los dos observadores S y S' miden la misma fuerza, y con eso, el electromagnetismo se salva de la catástrofe. Pero, esto no es gratis, porque para que las fuerzas en S y S' den iguales, es decir, para que la densidad de carga eléctrica en el conductor vista por S' no sea también nula, *hay que cambiar la forma en que se pasan coordenadas y tiempos de un sistema de coordenadas al otro. El problema no estaba en el electromagnetismo, sino en las fórmulas de relatividad de Galileo*. El electromagnetismo fue escrito a fines del siglo XIX, digamos aproximadamente en las últimas cuatro décadas. Los problemas como el que acabamos de mencionar se hacían evidentes, si bien es probable que no hayan sido mencionados en los cursos que se han brindado para no generar mayor complejidad a la no poca que ya de por sí involucra el proceso de aprendizaje. Las discusiones en la época fueron acaloradas, y en ellas participaron muchos de los hombres que hoy llamamos *padres de la ciencia*, como Lorentz, Poincaré, Faraday, Michelson, Morley, Thompson, Geiger. Siendo el electromagnetismo tan joven, aunque muy exitoso, y la relatividad de Galileo ya de cuatro siglos, y con inmenso éxito y extensa corroboración en la mecánica, resultaba evidente que el problema debería buscarse dentro de

las ecuaciones de Maxwell, y no en aquello que había funcionado tan bien durante tanto tiempo, prediciendo por ejemplo órbitas y eclipses. Más aún, como las leyes de Movimiento de Newton funcionaban bien con las transformaciones de Galileo, cualquier intento de modificar estas transformaciones resultaba doble desafío: arreglar el electromagnetismo y *no desarreglar con ello la mecánica*. Realmente, además de una enorme inteligencia, hacía falta mucho valor para pararse delante de un estrado con científicos de semejante talla escuchando, y hacer lo que hizo un joven de 26 años llamado Albert Einstein en 1905, al defender su publicación "*Teoría Especial de la Relatividad*", con el electromagnetismo aún caliente, y sin siquiera una teoría que explicara fehacientemente a los átomos, de los que algunos científicos aún descreían. Su teoría de relatividad, que veremos en lo que sigue, significó un hito mayor, en particular porque al modificar la transformación del espacio y del tiempo entre sistemas de coordenadas diferentes, aparecieron nuevos efectos, desconocidos e insospechados, absolutamente contrarios a la intuición general, junto con nuevos límites a *lo que se puede y lo que no se puede hacer en los viajes en el espacio y en el tiempo*. Luego, en 1916, Einstein escribió la Teoría General de la Relatividad, que abarca a la gravitación y a los SR no inerciales. Sus predicciones, tardaron muchos años en ser corroboradas porque, como veremos más adelante, se diferencian más y más de las de la relatividad de Galileo en cuanto las velocidades implicadas son más altas, y en los primeros años era dificultoso encontrar experimentos que pudieran claramente diferenciar entre los resultados de una teoría y otra. Einstein murió un 18 de abril de 1955, casi cuarenta años después de su primera publicación sobre relatividad. Es sabido que no recibió un Premio Nobel por lo que para muchos es considerada como la aventura intelectual más grande de todos los tiempos. Sí recibió uno en 1921, pero por otra publicación, también totalmente relevante para otra revolución científica más, la de la mecánica cuántica: su aporte en la explicación del efecto fotoeléctrico. Entre las innumerables cosas asombrosas, es de mencionarse que esta publicación también fue en el año 1905. Sin dudas un gran año para la ciencia. Hoy en día, la teoría de la relatividad de Einstein es puesta a prueba en los experimentos más importantes, con instrumental impensable en sus tiempos, como la observación de ondas gravitacionales reciente (2019), o el estudio del comportamiento de objetos supermasivos como los agujeros negros. Al día de hoy, no se han publicado hallazgos de violaciones a esta teoría dentro de la precisión de las observaciones realizadas.

Los postulados de Einstein

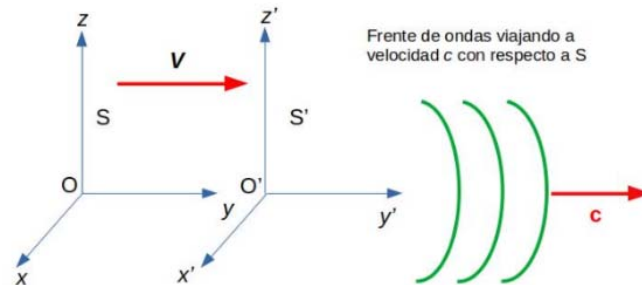
El nuevo principio de relatividad propuesto por A. Einstein se desprende de dos simples postulados, y de algunas consideraciones sobre ellos:

- 1- Principio de relatividad: "*Todas las leyes de la física son las mismas en todos los sistemas de referencia inerciales*". Este principio es una extensión de lo que analizamos de las leyes del movimiento, a todas las leyes de la física (las interacciones). *Todo SR S' que se traslade respecto a otro inercial S con movimiento relativo uniforme es equivalente.*

- 2- La constancia de la velocidad de la luz: Observadores en todos los SR inerciales miden el mismo valor para la velocidad de la luz en el vacío”.

El segundo enunciado, de ser válido, implicaría un profundo cambio en nuestra concepción del movimiento, que involucra también a nuestra concepción del tiempo, de una forma totalmente contraria a nuestra intuición, veremos:

Figura 1.6



Nota. Un pulso de luz se emite en el momento exacto en que los orígenes O y O' coinciden en el mismo punto.

Imaginemos la situación de la Fig.1. 6. Supongamos que los orígenes de S y S' coinciden a $t = t' = 0$, y que en ese instante desde el origen común se emite un pulso de luz en la dirección x. Utilizando las transformaciones de Galileo (Ecs. (1.1) y (1.2)), que coinciden con nuestra noción intuitiva de la adición de velocidades:

$$\begin{aligned}
 t' &= t & v'_{x'} &= c - V \\
 x' &= x - Vt & v'_{y'} &= v_y \\
 y' &= y & v'_{z'} &= v_z \\
 z' &= z & &
 \end{aligned}$$

Obtenemos, como esperábamos, que la velocidad del frente de onda de luz en S' sea menor, ya que restaríamos las velocidades: $v'_{x'} = c - V$, tal como cuando vamos manejando detrás de otro auto que va más rápido, la velocidad relativa de éste con respecto al nuestro es menor que lo que marca su velocímetro. ¡Pero esto es *contrario al 2do postulado*, que dice que el observador parado en el SR S', también detectará que el frente de ondas se aleja con velocidad c! Aquí se puede vislumbrar como el segundo postulado de Einstein resulta completamente radical. En el siguiente párrafo analizaremos las consecuencias de si este postulado fuera cierto.

Intentemos satisfacer este segundo postulado: si el frente de ondas en ambos sistemas viaja a la velocidad c, entonces, su posición vista en cada SR será:

En S:

$$x = ct \quad (1.11)$$

mientras que en S':

$$x' = ct' \quad (1.12)$$

Ya en este primer renglón, sin mucho más, nos damos cuenta de una de las profundas implicancias totalmente contraria a nuestra intuición y conocimientos previos: las posiciones x y x' (miembro izquierdo de las Ecs. (1.11) y (1.12) no son iguales. Claro, S' se mueve respecto a S alejándose, uno espera que $x' < x$. Por ende, si los miembros izquierdos de las ecuaciones son diferentes, los miembros derechos también: $ct \neq ct'$. Pero si c es igual en S y S', simplificando se obtiene: $t \neq t'$. ¡El tiempo no transcurre igual en dos sistemas diferentes! Los relojes, avanzan a distinto ritmo.

En este punto es necesario hacer sólo un poco de matemáticas, las mínimas necesarias para que nada quede sin explicación. Veremos al final con beneplácito que, ¡no era más que despejar un par de ecuaciones! Intentemos encontrar una transformación que satisfaga el segundo postulado de Einstein, partiendo de la transformación de Galileo, ya que éstas, ¡tan mal no pueden estar! Después de todo, al rango de precisión de la época de Newton y Kepler, las predicciones de las leyes de movimiento se correspondían muy bien con el experimento. Busquemos la modificación más simple posible: una transformación lineal, como un factor de escala. ¡Tal vez ese factor multiplicativo sea tan cercano a 1 que nadie había notado su presencia! Llamaremos γ a este factor.

Hagamos, en vez de (Galileo):

$$x' = (x - Vt) \quad (1.13)$$

la transformación lineal (Einstein y Lorentz):

$$x' = \gamma(x - Vt) \quad (1.14)$$

Si S' se mueve con velocidad V respecto a S, entonces para S', S se mueve con la velocidad opuesta $-V$ respecto de él, entonces, la transformación inversa será:

$$x = \gamma(x' + Vt') \quad (1.15)$$

Como dijimos, la posición del frente de ondas que avanza será: $x = ct$ en S, y $x' = ct'$ en S' (Ecs. (1.11) y (1.12)), ya que la luz viaja en ambos a velocidad la misma velocidad c según el segundo postulado de Einstein. Reemplazando Ecs. (1.14) y (1.15) en Ecs. (1.11) y (1.12):

$$ct' = x' = \gamma(ct - Vt) \quad \text{o bien, reagrupando: } t' = \gamma t(1 - V/c) \quad (1.16)$$

$$ct = x = \gamma(ct' + Vt') \quad \text{o bien, reagrupando } t = \gamma t'(1 + V/c) \quad (1.17)$$

Sustituyendo t (Ec. 1.17) en $t' = \gamma t(1 - V/c)$ queda:

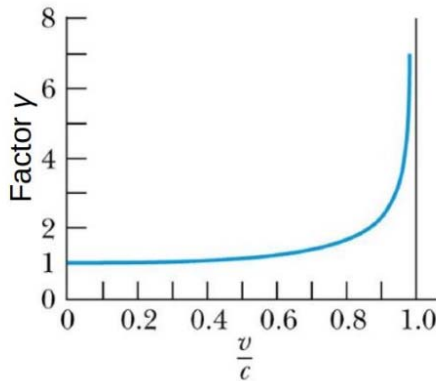
$$t' = \gamma \gamma t'(1 + V/c)(1 - V/c), \quad \text{entonces, simplificando } t': 1 = \gamma^2(1 + V/c)(1 - V/c)$$

Entonces, de ésta última podemos despejar ese factor de escala γ que escribimos a priori: haciendo el cuadrado del binomio y pasando términos:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (1.18)$$

¿Cómo es este factor adimensional γ ? Para analizarlo, nada mejor, que observar su gráfica en la Fig.1.7. Ahí notamos que:

Figura 1.7



Nota. Gráfica de la función γ vs. el factor adimensional V/c .

Para $V = 0$ (Sistemas de referencia S y S' sin movimiento relativo), $\gamma = 1$, es decir, la transformación propuesta coincide con la transformación de Galileo.

1- A medida que aumenta V , recién cuando $\frac{V}{c} \sim 0.5$ se puede apreciar un sensible apartamiento de γ con respecto a 1. Pero, notemos que $V = 0.5 c$ es una velocidad enorme! Ya que la luz viaja a aproximadamente 300000 km/s

2- A medida que V/c se acerca a 1, γ crece en forma cada vez más rápida, de forma tal que presenta una asíntota vertical cuando $V = c$.

Todo esto da a pensar que, efectivamente para experimentos realizados a bajas velocidades, ($V \ll c$), este factor que introdujimos en la transformación de Galileo pudo haber pasado desapercibido, porque, por decir, si para velocidades bajas γ difiere de 1 en una parte en un millón, entonces, experimentos que puedan diferenciar las predicciones de $x' = \gamma(x - Vt)$ y $x' = x - Vt$ sólo podrían lograrlo si se realizaran las mediciones con altísima precisión, mucho mayor de la que se contaba en los tiempos de Newton y Galileo con las herramientas e instrumentos de la época.

Veamos qué pasa con el tiempo:

Sustituyendo la Ec. (1.14) en la Ec. (1.15):

$$x = \gamma(x' + Vt') = \gamma(\gamma(x - Vt) + Vt')$$

Entonces: $x - \gamma^2(x - Vt) = \gamma Vt'$ y despejando t' :

$$t' = \frac{x}{\gamma V} - \gamma \left(\frac{x}{V} - t \right) = \gamma t + \frac{x}{\gamma V} - \gamma \frac{x}{V} = \gamma t + \frac{\gamma x}{V} \left(\frac{1}{\gamma^2} - 1 \right)$$

pero $\frac{1}{\gamma^2} = 1 - \frac{V^2}{c^2}$. Sacando factor común γ y despejando nos queda:

$$t' = \gamma \left(t - \frac{Vx}{c^2} \right) \quad (1.19)$$

Aquí vemos nuevamente, que, para velocidades bajas, no solamente el factor γ puede no distinguirse de 1, sino que más aún, $V/c^2 \sim 0$ (el denominador es del orden de 10^{16}) con lo que nos quedaría en esa situación $t \cong t'$ coincidiendo con nuestra experiencia cotidiana. Sin embargo, para velocidades donde estas aproximaciones no aplican, esta ecuación predice que el ritmo de la marcha del reloj puesto en S' que mide el tiempo tiempo t' , no solo está relacionado con el ritmo del reloj que mide el tiempo t en el sistema S , y de la velocidad relativa entre S y S' a través del factor γ , ¡sino también de la posición x en el sistema S ! Esto marca una gran diferencia entre la relatividad de Galileo y la de Einstein. En la primera, el tiempo era el mismo en todos los SR inerciales, y por supuesto *desacoplado de las coordenadas espaciales* x , y y z . En la segunda, al transformar de un sistema S a otro S' , en las fórmulas de cálculo como las Ecs. (1.14) y (1.19) *las coordenadas espaciales y temporales se entremezclan*, no siendo independientes unas de las otras. La relatividad de Einstein nos dice que el espacio y el tiempo pueden mezclarse para formar *una sola entidad llamada "espacio-tiempo", que es de cuatro dimensiones*: tres espaciales y una temporal.

Por todo lo analizado en esta sección, diremos que, los postulados de Einstein, en particular el segundo que nos dice que la luz viaja a la misma velocidad en el vacío en todos los SR, nos llevan a una reformulación de las ecuaciones de relatividad de Galileo (Ecs (1.1), (1.2) y (1.3)). Las nuevas ecuaciones llevan el nombre de *Ecuaciones de Transformación de Lorentz-FitzGerald*, o simplemente Transformaciones de Lorentz, en honor a quienes las escribieron por primera vez, en su intento de explicar el resultado nulo del experimento de Michelson y Morley.

Transformaciones de Lorentz-FitzGerald

$$\begin{cases} x' = \gamma(x - Vt) \\ y' = y \\ z' = z \\ t' = \gamma \left(t - \frac{Vx}{c^2} \right) \end{cases} \quad \text{con } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}} \quad (1.20)$$

Para calcular las transformaciones inversas (cómo son las coordenadas y el tiempo en el sistema S sabiendo las de S'), bastará con reemplazar las coordenadas espacio-temporales primadas con las no primadas y recíprocamente, teniendo el cuidado de reemplazar V por $-V$.

Frente a las transformaciones de Lorentz, *el electromagnetismo resulta invariante*. Nada tendremos que revisar o modificar de lo aprendido hasta este momento. Una demostración matemática de la invariancia resulta un poco compleja matemáticamente y está fuera de los contenidos de este libro. Sin embargo, con estas transformaciones resulta que las leyes del

movimiento de Newton, a velocidades para las cuales el factor γ difiera significativamente de 1, sí deben ser revisadas, y de alguna forma modificadas. Esas modificaciones, a velocidades comparables con c , junto con la observancia del primer postulado de Einstein en relación con la simetría de las leyes de la física, resultaron en un cambio de paradigma científico: una visión radicalmente diferente de las leyes del universo entero, como veremos un poco más adelante.

Consecuencias de las transformaciones de Lorentz

En esta sección se abordarán algunos de los efectos puramente cinemáticos de las transformaciones de Lorentz, que fueron predichos por la Teoría de la Relatividad de A. Einstein, y sucesivamente verificados experimentalmente.

La dilatación del tiempo

Llamaremos "*tiempo propio*", al intervalo de tiempo transcurrido entre dos eventos que ocurren en la misma posición, y medido por un cronómetro fijo a esa posición.

Supongamos, como se ve en la Fig. 1.8, que una persona en un vagón de tren que está viajando a velocidad V con respecto al andén, dispara un frente de luz encendiendo una linterna directamente hacia arriba en forma vertical hacia el techo, en donde hay un espejo que hace que el rayo de luz se refleje directamente hacia abajo. El tiempo que tarda la luz en su recorrido total de subida y de bajada será el *tiempo propio*, ya que el evento de llegada a la linterna se produce en el mismo punto en el SR S' fijo al tren, en el cual la linterna está en reposo. Si la altura del techo es d , tenemos:

$$\Delta t' = 2d/c$$

Y la distancia total recorrida en el sistema S' es $2d$.

Por otro lado, para un observador fuera del tren parado en el andén, cuyo SR es S , la luz no subió y bajó en forma vertical, sino que lo hizo en forma oblicua, porque desde el momento en que se encendió la linterna hasta que la luz llegó al techo, en S el espejo avanzó horizontalmente una distancia $l = V\Delta t/2$, y luego recorre otra distancia igual durante el proceso de bajada. El tiempo t en el sistema S no es el propio, ya que los eventos inicial y final no están en el mismo punto, sino separados una distancia $2l$. La distancia total recorrida por el rayo de luz en S es $2L$ con $L=c\Delta t/2$:

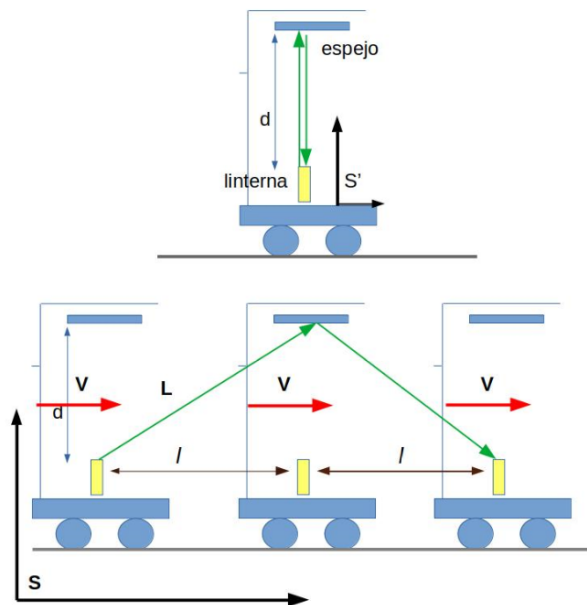
$$L^2 = l^2 + d^2$$

Es decir: $(c\Delta t/2)^2 = (v\Delta t/2)^2 + (c\Delta t'/2)^2$, simplificando y reordenando: $(c^2 - v^2)(\Delta t)^2 = c^2(\Delta t')^2$

$$\Rightarrow \Delta t = \frac{\Delta t'}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = \gamma \Delta t' \quad (1.21)$$

Como $\gamma \geq 1 \Rightarrow \Delta t \geq \Delta t'$, el reloj asociado al sistema en movimiento respecto al andén S' va más lento, lo que equivale a decir que en el sistema S el intervalo de tiempo es mayor. En particular, de todos los SR inerciales posibles, ¡el tiempo propio $\Delta t'$ es el más pequeño de todos! ¡Todos los observadores en movimiento con respecto a la persona que sostiene la linterna medirán un lapso mayor! Este efecto de la dilatación del tiempo da lugar a la famosa paradoja de los mellizos, uno de los cuales se queda en la tierra (el andén) y el otro hace un viaje espacial a velocidades altas (como el del tren). A su regreso, el hermano viajero observa que su hermano que quedó en la tierra ha envejecido mucho más que él. Esto es así, porque, que el tiempo propio sea el menor de todos, implica que todos los procesos, incluidos los biológicos, ocurren de acuerdo con el tiempo del propio SR. Por ejemplo, si el viaje del hermano viajero duro 1 año en tu tiempo propio, para su hermano que quedó en la tierra este lapso pudo ser, por decir, 50 años, y esto sin dudas se va a notar en su aspecto cuando se junten nuevamente en la misma posición, a velocidad cero.

Figura 1.8



Nota. Una linterna dispara un rayo de luz que se refleja en un espejo en el techo de un vagón de tren que avanza a velocidad V respecto a la tierra. En la parte de arriba, cómo se ve ese rayo desde el SR S' fijo en el vagón. En la parte inferior, la trayectoria del rayo vista desde un SR S fijo al andén.

Una consecuencia de esto es que *el tiempo se detiene para una onda de luz*. Efectivamente, si $\Delta t = \gamma \Delta t'$, $\Delta t' = \Delta t/\gamma$, entonces, cuando $v \rightarrow c$, $\gamma \rightarrow \infty$. Entonces, cualquier intervalo de

tiempo finito Δt en el sistema S, será cero en el sistema S' que viaja a la velocidad de la luz, como si su reloj se hubiese detenido, mientras en el resto de los SR, las cosas ocurren en sus intervalos normales correspondientes. Si fuera posible viajar a la velocidad de la luz *para los cuerpos que tienen masa*, por ejemplo, el nuestro, podríamos trasladarnos de un lugar a otro del universo sin envejecer, salvo durante los períodos de aceleración y frenado, ya que nuestro tiempo en ese caso se hubiera detenido. Desafortunadamente, esto no es posible, como veremos más adelante en este capítulo.

Una de las muchas verificaciones experimentales indirectas de la dilatación del tiempo se realizó por medio de la detección de muones que impactan en la superficie de la tierra viajando desde el espacio exterior a velocidades tan altas como $0,99c$. Estas partículas tienen una vida media muy corta, medida en laboratorio (reposo, tiempo propio) de $2,2 \mu s$, y, dado el espesor de la atmósfera, deberían desintegrarse completamente antes de llegar al suelo (sólo penetrarían una distancia de $2,2 \mu s \cdot 0,99 \cdot 3 \cdot 10^8 \frac{m}{s} = 653 m$ antes de desintegrarse la mitad de ellas). Sin embargo, desde el sistema de referencias fijo en la tierra, este tiempo es mucho mayor, las partículas viven más tiempo, y logran alcanzar la superficie atravesando todo el espesor de la atmósfera antes de desintegrarse. El tratamiento de esta situación es uno de los problemas sugeridos en este curso y se resuelve utilizando la Ec. (1.21).

Otro experimento de verificación de la dilatación del tiempo se realizó en 1971 colocando varios relojes atómicos de ^{133}Cs con precisión del orden del attosegundo (trillonésima parte de 1 s) en aviones comerciales con velocidad de crucero standard del orden de los 1000 km/h, sincronizados con otro que quedó en tierra, y observando los distintos lapsos medidos al finalizar varios tramos de vuelo por un total de más de 40 horas. Si bien los dispositivos utilizados son llamados "relojes", por su funcionamiento no deben ser considerados de medidas directas, sino que entran también dentro en la categoría de determinaciones indirectas.

La contracción de las longitudes

Llamaremos "*longitud propia*" a la longitud de un objeto medida en un SR en la cual el objeto está en reposo, y medido por un instrumento fijo a esa posición. Para determinar esta longitud, no hace falta que la posición de cada uno de los dos extremos del objeto respecto a una regla sea determinada en forma simultánea. En cambio, notemos que, en cualquier otro sistema en movimiento respecto del objeto a medir, resulta imprescindible que la posición de ambos extremos sea determinada en forma simultánea. Utilizando las transformaciones de Lorentz (Ec. (1.20)) para cada una de las posiciones de los extremos x_1 y x_2 en S y x'_1 y x'_2 en S', y llamando $L' = x'_2 - x'_1$ a la longitud del objeto medida en S', sistema en el cual el objeto está en reposo, y $L = x_2 - x_1$ a la longitud en el sistema en movimiento, tenemos:

$$x'_1 = \gamma(x_1 - Vt_1)$$

$$x'_2 = \gamma(x_2 - Vt_2)$$

$$L' = x_2' - x_1' = \gamma(x_2 - x_1 - V(t_2 - t_1))$$

pero, como para S la medida de la posición es simultánea $t_2 = t_1$

$$L' = \gamma(x_2 - x_1) = \gamma L$$

O bien:

$$L = L'/\gamma \quad (1.22)$$

Como $\gamma \geq 1$, la Ec. (1.22) nos muestra que todas las longitudes medidas en cualquier SR en movimiento con respecto a aquél en el cual el objeto está en reposo, resultan más cortas que la longitud propia. Nótese que, de las tres dimensiones de un objeto, la que se contrae vista en un SR en movimiento sólo es la dimensión en la dirección de movimiento, ya que según las transformaciones de Lorentz (Ec. (1.20)), las otras dos coordenadas cartesianas y y z de cada uno de los extremos del objeto son iguales en ambos SR.

La pérdida de la simultaneidad y la cuestión de la causalidad

No puede decirse con sentido absoluto que, dos acontecimientos distintos, ocurridos en diferentes lugares, puedan haberse realizado al mismo tiempo, es decir, ser simultáneos. Si dos observadores, en el mismo lugar, presencian dos fenómenos simultáneos, podrían decir ambos que se realizaron al mismo tiempo. Pero si los dos presencian esos acontecimientos en lugares diferentes, espacios diferentes, al mismo tiempo, ninguno de ellos podría afirmar que se realizaron simultáneamente.

Matemáticamente, esto puede comprobarse de la transformación de Lorentz (Ec. (1.20)):

$$t' = \gamma(t - \frac{Vx}{c^2})$$

Un evento que se realiza en el sistema de referencia S en x_1 y t_1 , al mismo tiempo que otro en x_2 y t_2 , al ser simultáneos en este sistema satisfacen $t_1 = t_2, \Delta t = 0$. Utilizando la ecuación anterior y tomando diferencias:

$$\Delta t' = \gamma(\Delta t - \frac{V\Delta x}{c^2}) \quad (1.23)$$

Dado que $\Delta t = 0$ resulta:

$$\Delta t' = -\gamma \frac{V\Delta x}{c^2} \neq 0 \quad (1.24)$$

Inesperadamente, se observa de la Ec. (1.24) que los dos eventos no solamente no son simultáneos en otro sistema de referencia inercial S', sino que, además, el signo de $\Delta t' = t_2' - t_1'$ depende de los signos de V y de Δx en el producto de ellos. Entonces, en algunos SR, si $\Delta t' > 0$, entonces $t_2' > t_1'$ mientras que, en otros, $\Delta t' < 0$, por lo cual, $t_2' < t_1'$. Vale decir, en algunos sistemas de referencia como en estos últimos, el evento, digamos, el que ocurre en t_2' está en el pasado del otro (es anterior), mientras que, en los primeros, está en el futuro (es posterior). Este análisis de la pérdida de simultaneidad, que ya de por sí es muy sorprendente,

nos lleva a una cuestión de importancia aún mayor: La Ec. (1.23) es tal que $\Delta t'$ y Δt pueden llegar a tener distintos signos, dependiendo del valor de $\frac{V\Delta x}{c^2}$. Ahora bien, dentro de nuestro paradigma científico, las causas siempre preceden a los efectos, ya que el tiempo, decimos, avanza en una sola dirección. Así, nunca el efecto puede anteceder a la causa. Supongamos que dos eventos que ocurren en dos posiciones diferentes son uno efecto del otro. Por ejemplo, en (x_1, t_1) se dispara un rayo de luz que al llegar a x_2 al tiempo t_2 , ahí encuentra un dispositivo fotosensible que cuando es iluminado, cierra un interruptor con lo cual comienza a reproducirse una música. Podemos decir que, si escuchamos la melodía, es porque ya llegó a x_2 el rayo de luz disparado desde x_1 , e indudablemente $t_2 > t_1$. Entonces, podemos decir que hay una relación causal (causa-efecto) entre el disparo del rayo de luz (causa) y el sonido de la melodía (efecto). Aquí, como en toda relación de causalidad, $t_2 - t_1 > 0$. ¿Es posible entonces que, en otro SR, digamos S', mida entre el disparo del rayo de luz t'_1 y el comienzo de la melodía t'_2 un $t'_2 - t'_1 < 0$, por ende, comenzando a sonar la melodía en este sistema antes que se dispare el rayo de luz? La respuesta a esta pregunta, justamente, *establece qué regiones del espacio-tiempo están relacionadas por causalidad, y cuáles no*. No cualquier par de eventos, por ejemplo, los que ocurren uno en $P_1(x_1, y_1, z_1, t_1)$ y el otro en un punto $P_2(x_2, y_2, z_2, t_2)$ pueden estar relacionados por causalidad. Solamente pueden serlo, aquellos pertenecientes a ciertas regiones del espacio-tiempo tales que, al transformarse con la Ec. (1.23), *no ocurra que $\Delta t'$ tenga un signo diferente que Δt* . La razón subyacente en esta cuestión es que nada viaja a una velocidad mayor que la velocidad de la luz c . *¡Ni siquiera las interacciones!* Así, si la distancia espacial entre P_1 y P_2

$$d(P_1, P_2) = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2} \quad (1.25)$$

Es mayor que la distancia que pueda recorrer algo que se mueve lo más rápidamente posible para ir desde P_1 hasta P_2 a la velocidad máxima c :

$$d(P_1, P_2) > c (t_2 - t_1) \quad (1.26)$$

Entonces, los eventos no pueden tener una relación de causa-efecto, ya que *el evento en P_2 ocurriría antes de que le llegue ninguna información de que algo haya ocurrido en P_1* . Éste, es uno de los resultados más resonantes de la Teoría de Relatividad de Einstein, ya que abrió una nueva forma de entender también a las interacciones. Antes de ella, se trataba a las *interacciones a distancia*, como *instantáneas*. Interacciones a distancia son, por ejemplo, la fuerza de Coulomb entre dos cargas eléctricas q_1 y q_2 separadas una distancia d (Ec. (1.5)), o también la interacción gravitatoria entre dos masas separadas. Hasta lo que se sabía anteriormente, si la carga q_1 comenzaba a moverse, digamos, para hacerlo simple, en la dirección de q_2 , esta última comenzaba a sentir el aumento en la fuerza de Coulomb correspondiente, *en forma instantánea*, como si, por algún mecanismo de intercambio de información desconocido, la carga q_2 pudiera “saber” en todo instante dónde se encuentra q_1 . Hoy, sabemos que esto no es así: las interacciones viajan a la velocidad de la luz, y, por ende, la carga q_2 se “entera”, por medio de comenzar a sentir el correspondiente aumento en la fuerza de Coulomb, que la carga q_1 cambió de posición, *un tiempo d/c después del comienzo del movimiento*, al igual que nos enteramos

de que amaneció, ocho minutos después de que el borde del sol se posiciona geoméricamente por encima del horizonte. *La luz y las interacciones viajan a la misma velocidad en el vacío c .*

Para determinar las regiones de causalidad, dijimos que la condición es que, en la Ec. (1.23), Δt y Δx sean tales que no hagan que $\Delta t'$ cambie de signo. Tomaremos $\Delta t > 0$ ya que buscamos eventos causales. Para ello se debe cumplir:

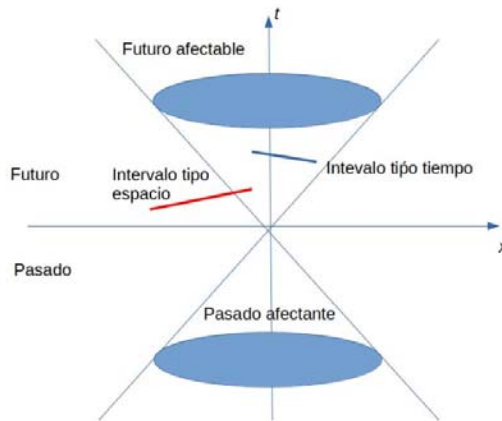
$$\Delta t \geq \frac{V\Delta x}{c^2}, \text{ o bien } c^2\Delta t \geq V\Delta x \quad (1.27)$$

Como esto debe valer para todos los SR posibles, tomaremos el caso más extremo en el que S' viaja respecto de S a la máxima velocidad posible: $V = \pm c$. El límite de la región se obtendrá tomando el signo “=” en la desigualdad (1.27). Entonces:

$$c^2\Delta t = \pm c\Delta x, \text{ o bien: } c\Delta t = \pm \Delta x \quad (1.28)$$

Si hacemos una gráfica de ct vs. x , obtendremos dos rectas a 45° . A la Fig. 1.9 se la llama “el cono de luz”.

Figura 1.9



Nota. El cono de luz. Delimita las regiones del espacio que determinan cuáles sucesos pueden o no estar relacionados por causalidad.

La región por encima del eje x representa el futuro ($t > 0$) y por debajo el pasado ($t < 0$). Se la llama cono porque, si se pudieran graficar en forma cartesiana también los ejes y y z , lo que veríamos serían dos conos cuatridimensionales opuestos por su vértice. No podemos imaginarnos un cono en cuatro dimensiones, pero sí podríamos en dos. Esta figura divide el espacio en tres regiones: dos comprendidas dentro de los conos superior e inferior, y la tercera toda la región externa a los conos. Podemos decir que tal como obtuvimos los límites de las regiones poniendo el signo igual, dos puntos dentro del cono superior o dentro del cono inferior, pueden corresponder a eventos causa-efecto, es decir, satisfacen la Ec. (1.27) (por supuesto que no necesariamente son causales, podrían también ser eventos totalmente independientes, como por ejemplo que una persona pida una cerveza en la barra de un bar, y otra en una mesa

de otro bar cercano pida la cuenta). Dos eventos como estos que se pueden representar dentro de uno de los conos, se dice que están separados por un *intervalo tipo tiempo*. Mientras que, un punto fuera de los conos, y un punto dentro de alguno de ellos, determinan dos eventos para los cuales es imposible que haya una relación de causalidad. Se dice para ellos, que están separados por un *intervalo tipo espacio*. Por último, dos puntos sobre la superficie de los conos están relacionados con eventos que, si guardan relación causal, lo fueron a través de interacciones que viajan a la velocidad de la luz. El origen de este gráfico representa el “*aquí y ahora*”: $x = 0$ y $t = 0$. Con respecto al “*aquí y ahora*”, a la región del cono inferior se lo llama el *pasado afectante*, ya que representa el lugar geométrico de eventos ocurridos con anterioridad, y que podrían tener una relación causal con lo que ocurre “*aquí y ahora*”. A su vez, a la región comprendida dentro del cono superior, se la llama “*futuro afectable*”, porque cualquier evento perteneciente a esta región, podría ser consecuencia de alguna acción realizada “*aquí y ahora*”. El conocido desaire, entre personas que pretenden ignorarse o insultarse: *¡no estás dentro de mi cono de luz!* (ver la serie televisiva “*The Big Bang Theory*”), tiene su origen, justamente, en la interpretación de esta figura.

La transformación de las velocidades

Hasta ahora analizamos cómo se transforman las coordenadas y el tiempo. Una vez resuelto esto, podemos analizar cómo se transformarán las velocidades, de manera de satisfacer las transformaciones de Lorentz. En las transformaciones de Galileo, las velocidades se transformaban de una manera simple, dado que, en ellas, el tiempo era igual para todos los SR: $dt = dt'$. Así, calculamos las Ecs. (1.2), que representan la simple regla de adición de velocidades. En el caso de la relatividad de Einstein, resulta un poco más complejo porque aquí $dt \neq dt'$, por lo cual, las derivadas temporales para calcular las velocidades deben tener en cuenta esto. Tomando incrementos diferenciales de las Ec. (1.20) resulta:

$$\begin{cases} dx' = \gamma(dx - Vdt) \\ dy' = dy \\ dz' = dz \\ dt' = \gamma\left(dt - \frac{Vdx}{c^2}\right) \end{cases} \quad \text{con } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}$$

Ahora, definiendo $v_x = \frac{dx}{dt}$ y $v'_x = \frac{dx'}{dt'}$ las velocidades en la dirección del movimiento entre los SR S y S' respectivamente, queda:

$$v'_x = \frac{dx'}{dt'} = \frac{\gamma(dx - Vdt)}{\gamma\left(dt - \frac{Vdx}{c^2}\right)} = \frac{dx - Vdt}{dt - \frac{Vdx}{c^2}}$$

Despejando:

$$v'_x = \frac{dx - Vdt}{dt - \frac{Vdx}{c^2}} = \frac{dx}{dt - \frac{Vdx}{c^2}} - \frac{Vdt}{dt - \frac{Vdx}{c^2}} = \frac{1}{\frac{1}{v_x} - \frac{V}{c^2}} - \frac{V}{1 - \frac{Vv_x}{c^2}} = \frac{c^2 v_x}{c^2 - v_x V} - \frac{c^2 V}{c^2 - v_x V} = \frac{c^2 (v_x - V)}{c^2 - v_x V} = \frac{v_x - V}{1 - \frac{Vv_x}{c^2}}$$

Por otro lado, las velocidades en las direcciones y y z perpendiculares a la dirección del movimiento V se calculan diferente, ya que, de la Ec. (1.20) podemos decir: $dy' = dy$ y $dz' = dz$
Entonces:

$$v_{y'}' = \frac{dy'}{dt'} = \frac{dy}{\gamma(dt - \frac{Vdx}{c^2})} = \frac{dy/dt}{\gamma(dt - \frac{Vdx}{c^2})/dt} = \frac{v_y}{\gamma(1 - \frac{Vv_x}{c^2})}$$

Un análisis similar para $v_{z'}'$ resultará:

$$v_{z'}' = \frac{v_z}{\gamma(1 - \frac{Vv_x}{c^2})}$$

En resumen, se obtienen las transformaciones de las velocidades conforme a las Transformaciones de Lorentz, que son:

$$\left\{ \begin{array}{l} v_x' = \frac{v_x - V}{1 - \frac{Vv_x}{c^2}} \\ v_y' = \frac{v_y}{\gamma(1 - \frac{Vv_x}{c^2})} \\ v_z' = \frac{v_z}{\gamma(1 - \frac{Vv_x}{c^2})} \end{array} \right\} \quad (1.29)$$

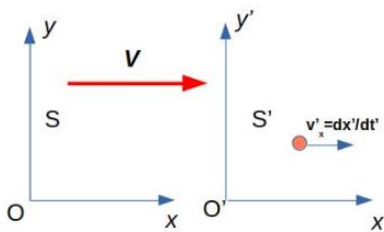
$$\left\{ \begin{array}{l} v_x' = \frac{v_x - V}{1 - \frac{Vv_x}{c^2}} \\ v_y' = \frac{v_y}{\gamma(1 - \frac{Vv_x}{c^2})} \\ v_z' = \frac{v_z}{\gamma(1 - \frac{Vv_x}{c^2})} \end{array} \right\} \quad (1.30)$$

Las transformaciones inversas, se calculan simplemente intercambiando las velocidades primadas con las no primadas y recíprocamente, y reemplazando V por $-V$.

Nuevamente, se obtienen resultados *nuevos y diferentes a los que veníamos utilizando*. En primer lugar, la transformación de la componente de la velocidad en la dirección del movimiento entre SRs, Ec. (1.29), sería igual a la transformación de Galileo (Ec. (1.2)) si no fuera por la presencia del denominador $1 - \frac{Vv_x}{c^2}$. Veamos en el siguiente ejemplo, que este denominador cumple un rol sorprendente y fundamental en dicha transformación:

Sean dos SR S y S' , con movimiento relativo a velocidad V en la dirección de las x , como hemos hecho anteriormente (Fig. 1.10). El sistema S' observa una partícula que viaja en la misma dirección a la velocidad v_x' :

Figura 1.10



Nota. Una partícula se mueve con velocidad v_x' en un SR S' , quien a su vez viaja a velocidad V respecto de S .

El cálculo de la velocidad v_x en el SR S, usando la Ec. (1.29) invertida es:

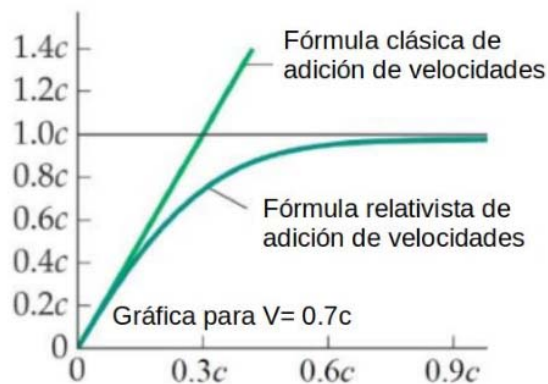
$$v_x = \frac{v'_x + V}{1 + \frac{Vv'_x}{c^2}}$$

Imaginemos las distintas situaciones siguientes y calculemos para cada una de ellas el valor de v_x :

- Si $Vv_x \ll c^2$, a velocidades bajas, $1 + \frac{Vv_x}{c^2} \approx 1$, con lo que queda $v_x = v'_x + V$, igual que la suma habitual de velocidades de Galileo.
- Si S' se mueve con respecto a S a la velocidad de la luz c ($V = c$), la velocidad $v_x = c$ independientemente de v'_x (resultado clásico: $v_x = v'_x + c$, mayor que la velocidad de la luz).
- Si S' se mueve con respecto a S a la velocidad de la luz c ($V = c$), y la partícula además se mueve también a la velocidad c respecto a S' ($v'_x = c$), despejando nos queda que $v_x = c$ (resultado clásico: $v_x = c + c = 2c$, mayor que la velocidad de la luz).
- Si $v'_x = c$, entonces $v_x = c$, independientemente del movimiento entre S y S'. (resultado clásico: $v_x = V + c$, mayor que la velocidad de la luz)

En estos ejemplos podemos comprobar que, la presencia del denominador en Ec. (1.29) hace que no haya forma de sumar dos velocidades de manera tal que la resultante nos dé una velocidad mayor que la de la luz c . *Las transformaciones de Lorentz son tales que nada puede moverse a una velocidad mayor que c , ni siquiera visto desde otro SR en movimiento.* En la Fig. 1.11 se observa un ejemplo de este comportamiento asintótico como el del ejemplo cuando $V = 0.7c$.

Figura 1.11



Nota. Comparación de los resultados de las fórmulas de la relatividad de Galileo vs. la relatividad de Einstein para un caso en que la velocidad entre S y S' es de $0.7c$.

En segundo lugar, de las Ecs. (1.30), se puede observar que las velocidades en el sistema S' que son perpendiculares a la dirección de la velocidad V entre S y S', los cuales tal vez hubiéramos esperado que no se alteren, como es en la relatividad de Galileo, sí se alteran. Y no sólo eso, sino que el cambio depende de V y de v_x a través del denominador y del factor γ . El origen de ello es que, si bien las coordenadas y' y z' son las mismas que las y y las z en S' y S respectivamente, para el cálculo de las velocidades interviene el tiempo, el cual no es el mismo en S' que en S. Y, justamente el cambio en t' con relación a t queda en función de V , γ y v_x , de acuerdo con la Ec. (1.20).

Cambio en la dinámica Newtoniana

Expresión de la cantidad de movimiento relativista

La segunda Ley de Newton, para situaciones en las que la masa no varía durante el movimiento, la escribimos (Ec. (1.6)):

$$\mathbf{F} = \frac{d}{dt} (m\mathbf{v}) = m \frac{d}{dt} \mathbf{v} = m\mathbf{a}$$

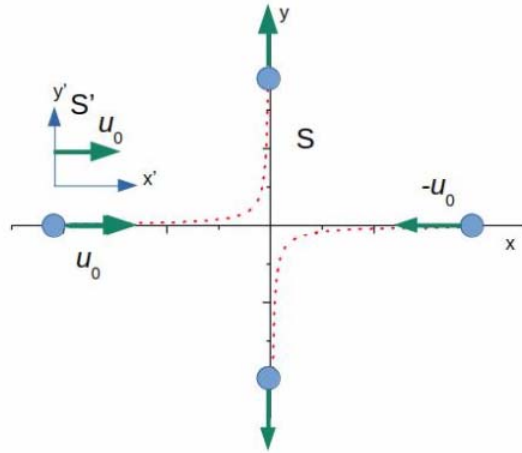
Como dijimos antes, esta fórmula resulta invariante frente a transformaciones de Galileo, con lo cual, frente a las transformaciones de Lorentz es de esperarse que presente problemas.

Con respecto a la tercera Ley de Newton, en su formulación usual: "todo cuerpo que ejerce una fuerza sobre otro recibe a su vez, una fuerza igual y opuesta, ejercida por el otro sobre él", no funciona bien para las fuerzas de origen electromagnético, aún dentro de las transformaciones de Galileo en SR inerciales. Efectivamente, no cuesta mucho calcular la fuerza de Lorentz entre dos cargas en movimiento, usando las ecuaciones clásicas, para darse cuenta de que las fuerzas mutuas *no son exactamente iguales y opuestas*. Esta tercera ley, resulta de fundamental importancia, ya que con ella se deduce el *Principio de Conservación de la Cantidad de Movimiento*, por lo que su formulación habitual debe ser modificada para incluir las fuerzas de origen electromagnético. En el electromagnetismo, la cantidad de movimiento en una colisión de partículas cargadas se conserva, pero *solo si se incluye, además de la cantidad de movimiento de las partículas que colisionan, dada por sus masas y sus velocidades, la cantidad de movimiento que transportan por las ondas de radiación que surgen de la aceleración de las cargas inherentes a la colisión*. Como la radiación electromagnética en general se la estudia en cursos avanzados, es probable que no se haya mencionado este asunto en los cursos anteriores.

Veamos entonces, qué ocurre en una simple colisión elástica entre dos partículas con la misma masa, para ver dónde aparecen las dificultades, y entonces poder solucionarlas. Imaginemos la situación como la de la Fig. 1.12. En ella se plantea una situación lo más simétrica posible para facilitar los cálculos: En un SR S se observa una colisión de dos partículas iguales que vienen viajando con módulo de velocidad u_0 en direcciones opuestas, sobre el eje horizontal.

Como resultado de la colisión, las partículas finalmente se desvían asintóticamente sobre el eje vertical en direcciones opuestas.

Figura 1.12



Nota. Colisión elástica entre dos partículas idénticas que viajan inicialmente con velocidades horizontales y opuestas u_0 y $-u_0$. Como resultado de la colisión, las partículas se desvían alcanzando, a tiempos largos, direcciones verticales, también con sentidos opuestos.

En S, las componentes iniciales y finales de las velocidades para las partículas A y B son:

$$v_{Axi} = u_0, v_{Axf} = 0, v_{Ayi} = 0, v_{Ayf} = u_0$$

$$v_{Bxi} = -u_0, v_{Bxf} = 0, v_{Byi} = 0, v_{Byf} = -u_0$$

donde los subíndices i y f se refieren a inicial y final (antes y después de la colisión), respectivamente.

De acuerdo con la fórmula clásica la cantidad de movimiento se conserva en S:

$$P_{xi} = mu_0 - mu_0 = 0 = P_{xf}$$

$$P_{yi} = 0 = mu_0 - mu_0 = P_{yf}$$

Veamos ahora la colisión desde otro sistema SR S' que viaja con respecto a S en la dirección x también con velocidad $V = u_0$, acompañando el movimiento inicial de la partícula A, por ende, estando esta última inicialmente en reposo en S' . Si utilizáramos las transformaciones de galileo para la velocidad, veríamos que en S' la cantidad de movimiento inicial P_{xi} no sería cero ($P_{xi} = -2mu_0$), pero coincide con la final, así que esto no genera problemas, y la cantidad de movimiento se conserva (*¡atención!*: la cantidad de movimiento, así como la energía cinética, por sus propias fórmulas, *son dependientes del SR*. De ahí que en física hablamos de los *cambios* de estas cantidades, por ejemplo, antes y después de un evento como un choque. *Los cambios, a diferencia de las cantidades mismas, no dependen del SR*).

Sobre el eje y , la ecuación queda igual a la de más arriba. Sin embargo, si utilizamos las Ecs. (1.29) y (1.30) para calcular las velocidades en S' conforme las transformaciones de Lorentz:

$$v'_x = \frac{v_x - V}{1 - \frac{Vv_x}{c^2}} \quad v'_y = \frac{v_y}{\gamma(1 - \frac{Vv_x}{c^2})}$$

Obtenemos:

$$v'_{Axi} = 0, v'_{Axf} = -u_0, v_{Ayi} = 0, v_{Ayf} = u_0 \sqrt{1 - \frac{u_0^2}{c^2}} \quad (1.31)$$

$$v_{Bxi} = \frac{-2u_0}{1 + \frac{u_0^2}{c^2}}, v_{Bxf} = -u_0, v_{Byi} = 0, v_{Byf} = -u_0 \sqrt{1 - \frac{u_0^2}{c^2}} \quad (1.32)$$

Así, si con ellas calculamos nuevamente las cantidades de movimiento inicial y final usando la fórmula clásica $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, en componentes tendremos:

$$P_{xi} = 0 + m \frac{-2u_0}{1 + \frac{u_0^2}{c^2}} = \frac{-2mu_0}{1 + \frac{u_0^2}{c^2}} \neq P_{xf} = -mu_0 - mu_0 = -2mu_0$$

$$P_{yi} = 0 = mu_0 \sqrt{1 - \frac{u_0^2}{c^2}} - mu_0 \sqrt{1 - \frac{u_0^2}{c^2}} = P_{yf}$$

La componente P_y se sigue conservando, ya que da cero antes y después de la colisión, pero, la componente P_{xf} irremediamente con las transformaciones de Lorentz es diferente a P_{xi} y es dependiente de la velocidad entre S y S' . Esto representa un severo problema, aunque esperado.

Dada la importancia fundamental del concepto “cantidad de movimiento \mathbf{P} ” en la Mecánica, que *radica justamente en su conservación en sistemas aislados*, necesitamos hallar una expresión nueva para la Relatividad de Einstein que satisfaga:

- A velocidades bajas, $\mathbf{P} \rightarrow m\mathbf{v}$, de acuerdo con la mecánica clásica Newtoniana.
- \mathbf{P} se conserve en las colisiones

Sea:

$$\mathbf{P} = m\mathbf{v} / \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (1.33)$$

En esta nueva definición de \mathbf{P} , la velocidad \mathbf{v} es la velocidad de la partícula en el sistema de referencia en el que esté parado el observador, y m es su masa clásica. Por simple inspección nos damos cuenta de que la condición (a) *queda automáticamente satisfecha*, ya que a velocidades bajas $\frac{v^2}{c^2} \ll 1$, entonces $\mathbf{P} \rightarrow m\mathbf{v}$. Para ver si también satisface (b), calculemos cuánto valen las componentes de \mathbf{P} en S y en S' usando esta nueva definición (Ec. (1.33)), junto con el cálculo de las velocidades en S' de las Ecs. (1.31) y (1.32):

En S :

$$P_{xi} = mu_0 / \sqrt{1 - \frac{u_0^2}{c^2}} - mu_0 / \sqrt{1 - \frac{u_0^2}{c^2}} = 0 = P_{xf}$$

$$P_{yi} = 0 = mu_0 / \sqrt{1 - \frac{u_0^2}{c^2}} - mu_0 / \sqrt{1 - \frac{u_0^2}{c^2}} = P_{yf}$$

En S':

Antes de realizar los cálculos, debemos conocer los módulos al cuadrado de las velocidades iniciales y finales usando las Ecs. (1.31) y (1.32):

$$v'_{Ai}{}^2 = 0 \quad v'_{Bi}{}^2 = \frac{4u_0^2}{(1 + \frac{u_0^2}{c^2})^2} \quad v'_{Af}{}^2 = u_0^2 + u_0^2(1 - \frac{u_0^2}{c^2}) \quad v'_{Bf}{}^2 = u_0^2 + u_0^2(1 - \frac{u_0^2}{c^2})$$

Entonces:

$$P'_{xi} = \frac{mv'_{Axi}}{\sqrt{1 - \frac{v'_{Ai}{}^2}{c^2}}} + \frac{mv'_{Bxi}}{\sqrt{1 - \frac{v'_{Bi}{}^2}{c^2}}} = 0 - \frac{2mu_0}{1 + \frac{u_0^2}{c^2}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{4u_0^2}{c^2(1 + \frac{u_0^2}{c^2})^2}}} \Rightarrow \text{reacomodando: } P'_{xi} = -\frac{2mu_0}{1 - \frac{u_0^2}{c^2}}$$

$$P'_{xf} = \frac{mv'_{Axf}}{\sqrt{1 - \frac{v'_{Af}{}^2}{c^2}}} + \frac{mv'_{Bxf}}{\sqrt{1 - \frac{v'_{Bf}{}^2}{c^2}}} = -\frac{mu_0}{\sqrt{1 - \frac{u_0^2 + u_0^2(1 - \frac{u_0^2}{c^2})}{c^2}}} - \frac{mu_0}{\sqrt{1 - \frac{u_0^2 + u_0^2(1 - \frac{u_0^2}{c^2})}{c^2}}} \Rightarrow \text{reacomodando:}$$

$$P'_{xf} = -\frac{2mu_0}{1 - \frac{u_0^2}{c^2}} =: P'_{xi}$$

Similarmente para las componentes verticales:

$$P'_{yi} = \frac{mv'_{Ayi}}{\sqrt{1 - \frac{v'_{Ai}{}^2}{c^2}}} + \frac{mv'_{Byi}}{\sqrt{1 - \frac{v'_{Bi}{}^2}{c^2}}} = 0 + 0 = 0$$

$$P'_{yf} = \frac{mu_0 \sqrt{1 - \frac{u_0^2}{c^2}}}{\sqrt{1 - \frac{u_0^2 + u_0^2(1 - \frac{u_0^2}{c^2})}{c^2}}} - \frac{mu_0 \sqrt{1 - \frac{u_0^2}{c^2}}}{\sqrt{1 - \frac{u_0^2 + u_0^2(1 - \frac{u_0^2}{c^2})}{c^2}}} = 0$$

La nueva definición de cantidad de movimiento es tal que sus componentes son iguales antes y después de una colisión, vale decir, con la nueva definición *la cantidad de movimiento se conserva en sistemas aislados, dónde el único mecanismo de intercambio es a través de colisiones.*

Concepto de masa relativista

En sentido coloquial, la palabra *inercia* se refiere a la “*resistencia al cambio*”. En general, se utiliza este vocablo en un sentido no cuantificable, en cuestiones no necesaria relacionadas con la física o las matemáticas. En el diccionario de la Real Academia Española aparece como “desidia”, “rutina”, pero aún en su acepción física, reza: “Propiedad de los cuerpos de mantener su estado de reposo o movimiento si no es por la acción de una fuerza”. Así, escuchamos frases

como “la inercia de las monarquías”, la inercia de los alumnos frente a un cambio en el nivel de dificultad, la inercia de los procesos inflacionarios en la economía, o mismo como cita la RAE, la inercia a mantener el estado de movimiento. Sin embargo, ninguna de estas acepciones es cuantitativa: sólo cualitativamente *dan una vaga idea de una situación*. En el curso inicial de Física, donde aprendimos las leyes de movimiento, ahí sí, el vocablo “*inercia*” cobró pleno sentido mensurable y comparativo: *la inercia es la masa*, y se mide en kilogramos (kg) en el Sistema Internacional de Pesas y Medidas. Esto es así, porque conforme a la Segunda Ley de Newton, *la masa aparece como constante de proporcionalidad entre la fuerza y la aceleración*: si mantenemos en distintos experimentos siempre la misma fuerza, si aumenta la masa disminuye la aceleración (el cambio en el estado de movimiento) y recíprocamente. Y la masa y la aceleración se pueden medir. Se pensó, que la masa era una propiedad que dependía de alguna forma, de los elementos con los que el cuerpo estaba constituido: sus partículas elementales. Así, si dividimos un cuerpo en varias partes, la masa original sería igual a la suma de las masas de cada una de las partes. Tanto fue así, que en el ámbito de la química se estableció tempranamente la Ley de conservación de la Materia o Ley de Conservación de la Masa (Lavoisier-Lamonósov, 1748): “*En un sistema aislado, durante toda reacción química ordinaria, la masa total en el sistema permanece constante, es decir, la masa consumida de los reactivos es igual a la masa de los productos obtenido*”. Todo esto está de acuerdo con lo dicho anteriormente, sobre que la masa era una *propiedad intrínseca*, al no depender ni del observador, ni de las interacciones, como indirectamente dice la ley de Lavoisier. Sin embargo, como ya seguramente nos vamos acostumbrando, en el marco de la teoría de la relatividad de Einstein algunos fortalecidos conceptos deben ser revisados, en el marco de experimentos de altísima precisión. En virtud de la nueva definición de la cantidad de movimiento \mathbf{P} (Ec (1.33)):

$$\mathbf{P} = m\mathbf{v}/\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

Vamos a hacer un *cambio de notación*: si de ahora en más, llamamos m_0 a lo que antes llamábamos m (la masa) podemos decir:

$$\mathbf{P} = \gamma m_0 \mathbf{v} \text{ con } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (1.39)$$

¡Pero cuidado! Antes, usamos γ con una fórmula similar, donde v era la velocidad de un SR S' con respecto de otro S (ver las transformaciones de Lorentz). Ahora, v es la velocidad de la partícula a la que se le calcula la cantidad de movimiento \mathbf{P} en el sistema de referencia del observador, *¡que no es lo mismo!* A este m_0 que antes llamábamos “*masa*”, a secas, de ahora en más lo llamaremos “*masa en reposo*”. Y esto porque, aparece un nuevo concepto: la palabra “*masa*” a secas, junto con su símbolo m , ahora se la asignamos a:

$$m(v) = \gamma m_0 \quad (1.40)$$

En la Ec. (1.40) se puso explícitamente la dependencia de la “nueva” masa con la velocidad, implícitamente a través del factor γ , para ponerla más en evidencia, a diferencia de la anterior,

que era una propiedad intrínseca. En cuanto a la masa en reposo, como sabemos esta no depende del SR, y es una característica distintiva de cada tipo de partícula elemental.

Este incómodo cambio en la notación se ve justificado porque, con él nos queda:

$$\mathbf{P} = \gamma m_0 \mathbf{v} = m \mathbf{v} \quad (1.41)$$

Es decir, la fórmula relativista para el vector *cantidad de movimiento* queda en la nueva notación *igual que la que escribió el mismo Isaac Newton*. En particular, se observa que:

- a) Para una partícula de masa m vista en un SR en la que está en reposo ($\mathbf{v} = 0$):
 $m(\mathbf{v}) = \gamma m_0 = m_0$ ya que si $\mathbf{v} = 0 \Rightarrow \gamma = 1$, es decir, en esta situación la masa coincide exactamente con la masa en reposo. De ahí el nuevo nombre para m_0 .
- b) Para una partícula de masa m vista en un SR en la que está con una velocidad pequeña comparada con c ($\mathbf{v} \ll c$):

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\mathbf{v}^2}{c^2}}} \approx 1 \Rightarrow m \approx m_0$$

Esta situación es la que se corresponde con la mayoría de las situaciones de la ingeniería en problemas macroscópicos.

- c) Para una partícula de masa m vista en un SR en la que tiene una velocidad comparable con c ($\mathbf{v} \approx c$):

$$\lim_{v \rightarrow c} m = \lim_{v \rightarrow c} \gamma m_0 = m_0 \lim_{v \rightarrow c} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\mathbf{v}^2}{c^2}}} = \infty$$

La masa crece con la velocidad, pero lo hace en la misma forma asintótica que la función γ : cuando la velocidad de la partícula se acerca a la de la luz, la masa crece indefinidamente. ¡Y la masa es la medida de la inercia! A fuerza constante (como la que puede dar el motor de un cohete) cuánto mayor masa, menor aceleración. Para un cuerpo de masa m que parte del reposo:

$$\mathbf{F} = \frac{d}{dt} (m\mathbf{v}) = \mathbf{v} \frac{d}{dt} m + m \frac{d}{dt} \mathbf{v} = \frac{m_0 \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{a}}{(1 - \frac{\mathbf{v}^2}{c^2})^{3/2}} + m \mathbf{a} \quad (1.42)$$

$$\Rightarrow \mathbf{F} = m \gamma^2 v^2 \mathbf{a} + m \mathbf{a} = m \mathbf{a} (1 + \gamma^2 v^2)$$

Ambos sumandos en la Ec. (1.42) tienden a infinito cuando $v \rightarrow c$, por lo tanto, la aceleración tiende a cero. En módulo:

$$a = F / (m(1 + \gamma^2 v^2))$$

Por lo anterior, *¡resulta imposible acelerar a un cuerpo con masa hasta llevarlo a la velocidad de la luz!* Cualquier motor de propulsión que podamos construir, generará una fuerza finita. Aunque fuera enorme, en su máxima potencia, y asumiendo que además pueda mantener la fuerza en el tiempo, la aceleración irá disminuyendo a medida que v se aproxime a c . El cuerpo se pondrá cada vez más difícil de acelerar, tendrá más *inercia*. *Éste es uno de los resultados de mayor impacto en la ciencia producido por la teoría de la relatividad de Einstein.*

Energía relativista

En el Teorema del Trabajo y la Energía Cinética, nos dice que, el trabajo realizado sobre una partícula por la fuerza neta es igual al cambio en su energía cinética. Si pensamos en una partícula sometida a una fuerza F partiendo del reposo desde el origen de coordenadas de un SR S hasta una posición final x a donde arriba con una velocidad v (para facilitar el análisis haremos el tratamiento en una dimensión):

$$E_c = \int_0^x F * ds = \int_0^v \frac{dP}{dt} ds = \int_0^v u dP \text{ con } u = \frac{ds}{dt}$$

$$\text{Si } P = \gamma m_0 u \Rightarrow dP = d \frac{m_0 u}{(1 - \frac{u^2}{c^2})^{1/2}} = \frac{m_0}{(1 - \frac{u^2}{c^2})^{3/2}} du$$

$$\Rightarrow E_c = \int_0^v \frac{m_0 u}{(1 - \frac{u^2}{c^2})^{3/2}} du = m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} - 1 \right)$$

O bien:

$$E_c = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} - m_0 c^2 = \gamma m_0 c^2 - m_0 c^2 = mc^2 - m_0 c^2 \quad (1.43)$$

A la magnitud: $m_0 c^2$ se la denomina “Energía en reposo” de la partícula, ya que no depende de su velocidad, y es el producto de una propiedad intrínseca, con una constante universal al cuadrado. La energía cinética puede escribirse entonces:

$$E_c = c^2(m - m_0) \quad (1.44)$$

Recordemos que la energía cinética clásica ($E_c = \frac{1}{2} m v^2$) dependía solamente del estado de movimiento. En su fórmula relativista también, dado que, si la partícula estuviera en reposo, $m(0) = m_0 \Rightarrow E_c = 0$ en la Ec. (1.44).

Llamaremos Energía relativista total, a la suma de la energía en reposo más la energía cinética:

$$E = m_0 c^2 + E_c = m_0 c^2 + (m c^2 - m_0 c^2) \\ \Rightarrow E = m c^2$$

A esta fórmula, se la conoce como la “*equivalencia entre masa y energía de la Teoría de Relatividad de Einstein*”. Analicemos esta fórmula: La energía total tiene un valor mínimo, ya que es el producto de una constante por la masa relativista. Este valor mínimo se dará cuando la partícula esté en reposo, ya que ahí la masa $m(v)$ alcanza su mínimo valor m_0 . ¿Por qué entonces a este valor residual $m_0 c^2$ de una partícula libre y en reposo la llamamos energía? ¿No habíamos definido al concepto de energía como la capacidad de hacer trabajo? ¿Qué capacidad de hacer trabajo tiene una partícula libre de interacciones y en reposo? La respuesta a esta pregunta se conoció con el descubrimiento de las emisiones radioactivas. Reacciones químicas

espontáneas violaban la Ley de conservación de la masa de Lavoisier, por la aparición de nuevas partículas que provenían de la desintegración de algunos núcleos. A partir de ese hallazgo, se encontró que el proceso de creación o aniquilación de partículas no era un fenómeno exclusivo de los núcleos atómicos, *sino que es un fenómeno generalizado y frecuente*, en el cual una partícula con masa puede “desaparecer” espontáneamente, generando en consecuencia radiación electromagnética (¡sin masa!) u otros tipos de partículas (¡con o sin masa!) o una combinación de ellos, y recíprocamente: radiación electromagnética puede generar partículas con masa (el ejemplo más frecuente es la generación de un par simultáneo electrón-positrón). En estos procesos, entre otras propiedades físicas de las que no hablaremos aquí, *se conservan la carga eléctrica, la cantidad de movimiento y la energía*. Por lo tanto, la energía en reposo es una verdadera energía, ya que la partícula puede generar trabajo aun estando en reposo y sin interacciones con el medio, al aniquilarse y generar radiación electromagnética (entre otros muchos ejemplos), que, como sabemos, transportan energía y cantidad de movimiento. La masa y la energía no son dos conceptos distintos, *¡sino que son magnitudes intercambiables!*: $E = mc^2$.

Por último, así como en la física clásica habíamos encontrado una relación entre la energía cinética K y la cantidad de movimiento p :

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

En la física relativista encontramos la relación de uso frecuente:

$$E^2 = (mc^2)^2 = (pc)^2 + (m_0c^2)^2$$

Resumen final

Para finalizar, en este capítulo hemos analizado la validez de las leyes aprendidas en los cursos de Mecánica y Electromagnetismo, desde un punto de vista diferente. La búsqueda de la necesaria uniformidad de las leyes de la física con independencia de los observadores nos llevó a cuestionamientos sobre la estructura misma de las leyes. A lo largo del desarrollo pudimos ver que el concepto de espacio-tiempo intuitivo con el que nos hemos manejado desde el mismo comienzo del aprendizaje, sólo es aproximado, a velocidades bajas comparadas con la de la luz. Nuevas formulaciones nos llevaron a extender la validez de las leyes al concepto general, justamente cambiando las reglas de transformación de coordenadas y tiempo entre sistemas de referencia inerciales. En este proceso, aparecieron nuevos fenómenos y límites, *de origen puramente relativistas*, es decir, que no se predicen en los modelos utilizados para explicar las interacciones como por ejemplo el electromagnetismo, o el estudio del movimiento a través de las Leyes de Newton, sino que son fenómenos inherentes a las transformaciones de las coordenadas y el tiempo, transformaciones que también debemos tomarlas como una *ley natural*. Las ideas de Einstein cambiaron el mundo de la Física y de la Ciencia en general, junto a la otra gran revolución del siglo XX: la Mecánica Cuántica.

Problemas resueltos

Problema 1: Una nave interestelar viaja a velocidad $V = 0,6c$ alejándose de la tierra. En su punto de máxima aproximación, sincronizo su reloj con el de un laboratorio terrestre. En ese laboratorio trabaja un astrónomo con un telescopio capaz de ver la nave, incluso su reloj a través de una de sus ventanillas. ¿Qué hora lee el astrónomo en su propio reloj cuando el reloj de la nave marca una hora?

Solución: Llamemos S' al SR fijo a la nave, y S al SR del laboratorio. Así, cuando en la nave el tiempo marca una hora, sus coordenadas espacio-temporales serán $t' = 1h$, y $x' = 0$.

Aplicando la Ec. (1.20): $t' = \gamma \left(t - \frac{Vx}{c^2} \right)$ y su inversa $t = \gamma \left(t' + \frac{Vx'}{c^2} \right)$

Tenemos: $t = \gamma t'$ ya que $x' = 0$. Hasta aquí tenemos simple dilatación del tiempo. Sin embargo, a este tiempo debemos añadirle el tiempo que tarda la luz que sale del reloj de la nave en llegar al telescopio terrestre. Este tiempo extra $\tau = r/c$, siendo r la posición de la nave al tiempo t .

Entonces: $r = Vt = V\gamma t'$ y de aquí $\tau = \frac{r}{c} = \frac{V\gamma t'}{c}$

El tiempo total será entonces: $t = \gamma t' + \frac{V\gamma t'}{c} = \gamma t' \left(1 + \frac{V}{c} \right)$

Reemplazando $t' = 1h$ y $V = 0,6c$ nos queda $t = 2h$.

Problema 2: Una astronave de longitud L_0 en su sistema de referencia, parte de la Tierra con velocidad V . Más tarde, se emite tras ella una señal luminosa que llega a la cola del cohete. Determinar cuánto tiempo tarda en llegar la señal a la cabeza del cohete desde la cola, según los relojes de éste y según los relojes de la Tierra. Luego, la señal se refleja en un espejo situado en la cabeza del cohete y se dirige en sentido contrario hacia la cola del cohete nuevamente. Determinar cuándo alcanza la cola del cohete según ambos relojes, y el tiempo total de vuelo en ambos relojes.

Solución:

Con respecto al SR ligado al cohete que llamaremos S' , la distancia que debe recorrer para llegar a la cabeza es L_0 , ya que ésta es la longitud propia, y el cohete se mantiene en reposo con respecto a su propio SR. Recordemos que, de acuerdo con el segundo postulado de Einstein, la luz viaja en todos los SR a la misma velocidad c . El tiempo necesario es $t' = L_0/c$. Además, después de reflejarse, el tiempo que tarda la señal en volver a la cola es nuevamente $t' = L_0/c$. El tiempo total será: $\tau' = 2L_0/c$.

Respecto al sistema de la Tierra, que llamaremos S , el cohete tiene una longitud contraída $L = L_0/\gamma$. El recorrido del pulso de luz para llegar de la cola a la cabeza del cohete es esa longitud, más lo que desplazó la cabeza durante ese tiempo de vuelo:

$$ct = L + Vt = \frac{L_0}{\gamma} + Vt$$

Despejando: $t = \frac{L_0}{\gamma(c-V)}$

Por otro lado, una vez que se refleja la luz en el espejo de la cabeza, el recorrido del pulso de luz para llegar de la cabeza a la cola del cohete es su longitud, menos lo que avanzó la cola durante ese tiempo de vuelo:

$$ct = L - Vt = \frac{L_0}{\gamma} - Vt$$

Despejando: $t = \frac{L_0}{\gamma(c+V)}$

Y el tiempo total es: $\tau = \frac{L_0}{\gamma(c-V)} + \frac{L_0}{\gamma(c+V)} = \frac{L_0}{\gamma} \left(\frac{1}{c-V} + \frac{1}{c+V} \right) = 2c \frac{L_0}{\gamma} \frac{1}{c^2 - v^2}$

Problema 3: si el sol irradia energía en forma de ondas electromagnéticas a razón de $3,8 \cdot 10^{26}$ J/s, i siendo la masa aproximada del sol $2 \cdot 10^{30}$ kg.

a) ¿A qué velocidad disminuye la masa del sol?

b) ¿Cuál es el cambio fraccionario en la masa del sol en mil millones de años? (Se calcula que la edad aproximada del universo es de 15.000 millones de años)

Solución:

a) El cambio de masa por segundo será:

$$\frac{\Delta m}{\Delta t} = \frac{\Delta E}{c^2} = \frac{3,8 \cdot 10^{26} \text{ W}}{9 \cdot 10^{16} \frac{\text{m}^2}{\text{s}^2}} = 4,2 \cdot 10^9 \frac{\text{kg}}{\text{s}} = 1,32 \cdot 10^{17} \text{ kg/año}$$

b) El cambio de masa a lo largo de 10^9 años será: $1,32 \cdot 10^{26}$ kg

La fracción de masa convertida en radiación electromagnética será:

$$(1,32 \cdot 10^{26} \text{ kg}) / 2 \cdot 10^{30} \text{ kg}$$

Así, durante mil millones de años, la pérdida porcentual de masa solar será del 0,0066 %.

Problemas propuestos

Problema 1: Un pasajero que viaja en un tren a $0,1 c$ prende una linterna y el haz de luz de propaga en la misma dirección y sentido que se mueve el tren ¿A qué velocidad viaja la luz para el pasajero? ¿Y para un observador en el andén?

Problema 2: En Mecánica Clásica la masa inercial de un cuerpo se definió como la propiedad física que tiene un cuerpo de oponerse a un cambio en su estado de movimiento y la misma era constante ($p/v = m_0$). En el marco de la Mecánica Relativista, analice el cociente p/v para los casos límites $v \ll c$ y $v \leq c$.

Problema 3: ¿La siguiente afirmación contradicen el segundo postulado de Einstein? “Cuando se propaga en un vidrio lo hace con más lentitud que en el vacío”. Justificar la respuesta

Problema 4: ¿Cuánta energía se requerirá para acelerar una partícula de masa en reposo m_0 desde ese estado hasta las siguientes velocidades: a) 300 m/s, b) 0,5 c, c) 0,9 c, d) 0,99 c ?.

Problema 5: ¿Qué porcentaje de error se comete al utilizar la expresión $(1/2)mv^2$ para calcular la energía cinética de la partícula si su velocidad es: a) 300 m/s b) 10% c y c) 90% c?.

Problema 6: Un protón con energía en reposo 938,28 MeV se mueve con una velocidad igual al 75% de la velocidad de la luz en el vacío. Hallar su energía total, su energía cinética y su cantidad de movimiento.

Problema 7: a) Calcule la velocidad de los electrones en el sincrotrón de Campinas, Brasil, cuyo potencial de aceleración es 1,37GV (1GV=10⁹V). Exprese el resultado como un porcentaje de la velocidad de la luz en el vacío. b) ¿Cuál es el factor gamma de los electrones? (Recordar: Cuando una partícula de carga Q es acelerada a través de una diferencia de potencial V, la energía cinética que gana es de Q.V)

Problema 8: Una nave se mueve a gran velocidad en la dirección +x de un sistema de referencia inercial (S_1) fijo a la tierra desde donde un observador realiza mediciones. En el sistema fijo a la nave (S_2), una varilla mide 1 m de largo y forma un ángulo de 30° con respecto a la dirección de su movimiento. En esas condiciones: (a) ¿A qué velocidad deberá moverse la nave para que su inclinación medida en S_1 sea 45°? (b) ¿Cuál es la longitud de la varilla en este sistema de coordenadas?

Problema 9: El período de un péndulo es $T_0 = 2s$. ¿Cuál es el período de este péndulo para un observador en un sistema de referencia inercial que se mueve respecto del sistema del inercial del péndulo con velocidad relativa de 90%c?

Problema 10: Un cubo está moviéndose en dirección paralela a uno de sus aristas. Mostrar que el volumen del cubo y su densidad satisfacen $(V_0/V)^2 = \delta/\delta_0 = \gamma^2$, donde V_0 y δ_0 son su volumen y densidad en reposo.

Problema 11: Un cohete se mueve a 0,7 c respecto a la Tierra. Un segundo cohete lo sobrepasa viajando a 0,95 c según observadores terrestres. Calcular la velocidad relativa entre ambos cohetes.

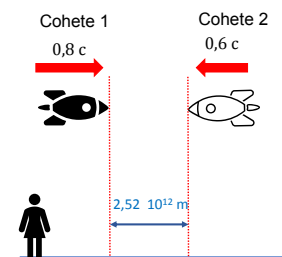
Problema 12: La vida media de los muones (en reposo) es 2,2 ms. Esto significa que una cantidad determinada de muones disminuye a $1/e$ de su valor en 2,2 ms o que la cantidad de muones en el tiempo t se puede escribir como: $N(t) = N_0 e^{-t/2,2\text{ms}}$, donde N_0 es la cantidad inicial.

(a) Calcular la vida media de los muones que se mueven con una velocidad de 0,95 c.

(b) Si se generan 50.000 muones en un punto alto de la atmósfera terrestre ¿Cuántos quedan después de viajar 3 km (para un observador en la superficie), con la velocidad mencionada?

Problema 13: Un cohete de 60 m de largo se aleja de la Tierra con un espejo en cada extremo. En un instante se envía desde la tierra un destello de luz y se recibe la reflexión en cada espejo, 200 segundos después la que proviene del espejo más cercano y luego de otros 1,74 microsegundos, la del más alejado. (a) ¿A qué velocidad se desplaza en ese instante? (b) ¿A qué distancia de la tierra se encuentra la nave en el momento de llegar cada destello?

Problema 14: En la figura adjunta se esquematizan dos cohetes a punto de chocar. María observa la escena desde la tierra y según sus mediciones los dos cohetes miden 50 m. (a) ¿Cuáles son las longitudes de cada cohete cuando están en el hangar?, (b) ¿Cuál es la velocidad relativa de acercamiento de los cohetes medida desde cualquiera de ellos? (c) Según María, ¿cuánto tiempo falta para que choquen? (d) ¿Y cuánto falta para colisionar según un observador en uno de los cohetes? ¿Encuentra diferencias? ¿Quién tiene más chance de evitar chocar a la otra nave? (Ayuda: tenga en cuenta que los procesos que son simultáneos para Liz no lo son para el observador en el cohete).



Problema 15: Supongamos que la mayor longitud de onda visible para el ojo humano, en el límite hacia el infrarrojo, es de 650 nm. Un cohete de última generación despegue alejándose de la tierra a gran velocidad emitiendo luz verde ($\lambda = 500 \text{ nm}$). Cierta tiempo después del despegue, un observador terrestre afirma que la señal luminosa emitida por la nave ha desaparecido repentinamente. Al aterrizar, se comprueba que la fuente luminosa de la nave nunca dejó de funcionar ¿Cómo podrías explicar esto?

CAPÍTULO 2

Radiación de cuerpo negro

Introducción

El trabajo presentado en el año 1900 por el físico alemán Max Planck (1858-1947) sobre la radiación emitida por un cuerpo como consecuencia de su temperatura y la teoría especial de la relatividad desarrollada por el físico alemán Albert Einstein (1879-1955) son considerados los orígenes de la física moderna. La publicación de Planck representó el ladrillo inicial para la construcción de la teoría mecánica cuántica que desarrollaron en forma paralela el físico austriaco Erwin Schrödinger (1887-1961) y físico alemán Werner Heisenberg (1901-1976). Esta teoría se constituyó en la mayor revolución en la física desde que el multifacético científico italiano Galileo Galilei (1564-1642) y luego el científico inglés Issac Newton (1643-1727) establecieron las bases de los que hoy llamamos física clásica.

La radiación térmica del cuerpo negro

La radiación de ondas electromagnéticas es un proceso de transmisión de energía. Los cuerpos emiten y absorben radiación electromagnética. Al aumentar la temperatura de su superficie la cantidad de radiación emitida crece rápidamente. Cuando la temperatura sea mayor que la de su entorno entonces emitirá más radiación que la que absorbe y así, mientras pierde energía, se enfriará hasta que el cuerpo y su entorno alcancen el equilibrio térmico.

El espectro de la energía radiada es continuo y los detalles dependen de las propiedades físicas y químicas de la superficie tales como su rugosidad superficial, su composición química, la presencia de óxidos o suciedad. Este tipo de radiación emitida por la superficie de cuerpos como consecuencia de su temperatura se conoce con el nombre de *radiación térmica*.

Del mismo modo que para entender la naturaleza de los gases reales se comenzó con el estudio del "gas ideal", para comenzar con el estudio de la radiación térmica es útil el concepto "radiador ideal". Un *radiador ideal* es una superficie que emite radiación electromagnética con un espectro de emisión que es independiente del material y del estado de su superficie, solo depende de su temperatura. Este tipo de cuerpo ideal se denomina *cuerpo negro*. La radiación electromagnética emitida por un cuerpo negro se conoce como *radiación de cuerpo negro*. Todos los cuerpos negros a una misma temperatura tienen el mismo espectro de emisión de radiación térmica. En la práctica, la superficie de un pequeño orificio en un horno de barro que se encuentra caliente, vacío y con la puerta cerrada se comportará casi como la superficie del cuerpo negro,

emitiendo radiación que depende de la temperatura de las paredes del horno y absorbiendo toda la radiación incidente.

Al final del siglo XIX, motivados por la necesidad de obtener patrones de fuentes luminosas, muchos físicos se dedicaron a estudiar las propiedades del espectro de emisión del cuerpo negro. Todos los trabajos mostraron la incapacidad de las diferentes áreas de la física clásica para abordar con éxito el desafío. En el año 1900, Max Planck presentó su trabajo denominado “La ley de la distribución de las energías del espectro normal” que explicaba la forma del espectro continuo de emisión del cuerpo negro con argumentos que no podían deducirse a partir de las leyes de la física clásica. El mismo autor consideró que en su trabajo había un “acto desesperado” al proponer la hipótesis que la radiación emitida o absorbida por un cuerpo negro no era continua, sino discreta. La cantidad de energía térmica que una superficie es capaz de absorber o emitir es un múltiplo de un valor mínimo denominado *cuanto de energía*. Por su extraña fundamentación, se le concedió poca importancia a esta nueva teoría hasta el año 1905 cuando Albert Einstein extendió la hipótesis de Planck a la radiación electromagnética al considerar la luz estaba formada por cuantos de energía, que luego serían llamados *fotones*.

Nomenclatura radiométrica y sistema de unidades

La nomenclatura que utilizan los libros de texto para las magnitudes radiométricas no es única y esto, muchas veces, genera errores. En este capítulo utilizaremos la nomenclatura que establece el *International Lighting Vocabulary* (IVL), un estándar internacional de la CIE (*International Commission on illumination*). Éste ha sido adoptado por numerosas agencias de estandarización internacionales, entre ellas la argentina (Normas IRAM-AADL), por asociaciones americanas (*Illuminating Engineering Society*, *American Society of Mechanical Engineering*) y por la revista científica americana de la OSA (*Optical Society of America*), *Applied Optics*.

En la Fig. 2.1 se muestra un esquema del ángulo $d\Omega$ sólido del flujo radiante saliente en la dirección (θ, ϕ) y la proyección del elemento de superficie sobre un plano perpendicular a la dirección de la radiación dA_{\perp} .

Veamos algunas magnitudes físicas adimensionales de uso frecuente en el estudio de problemas sobre radiación térmica.

- *Poder reflectivo o coeficiente de reflexión* (r): es la fracción de la potencia radiante incidente que es reflejada por la superficie del cuerpo.
- *Poder absorbente o coeficiente de absorción* (a): es la fracción de la potencia radiante incidente que es absorbida por la superficie del cuerpo.
- *Poder transmisor o coeficiente de transmisión* (t): es la fracción de la potencia radiante incidente que es transmitida a través del cuerpo.

Los valores que pueden tomar estas magnitudes para diferentes tipos de cuerpos se indican en la Tabla 2.2:

Tabla 2.1.

Magnitudes, símbolos y unidades radiométricas

Magnitud	Descripción	Símbolo y definición	Unidades (SI)
Energía radiante	Energía emitida, transferida o recibida en forma de ondas electromagnéticas debido a todo el espectro ⁽¹⁾ .	Q	J
Densidad de energía radiante ⁽²⁾	Energía radiante por unidad de volumen.	$\rho = \frac{dQ}{dV}$	$\frac{J}{m^3}$
Flujo radiante o potencia radiante	Energía radiante por unidad de tiempo.	$\Phi = \frac{dQ}{dt}$	W
Irradiancia	Flujo radiante incidente en todas las direcciones por unidad de área A de la superficie irradiada.	$E = \frac{d\Phi}{dA}$	$\frac{W}{m^2}$
Exitancia radiante, emitancia ⁽²⁾ o poder emisivo ⁽²⁾ .	Flujo radiante saliente en todas las direcciones por unidad de área A de la fuente.	$M = \frac{d\Phi}{dA}$	$\frac{W}{m^2}$
Intensidad radiante	Flujo radiante saliente de una fuente puntual ⁽³⁾ por unidad de ángulo sólido Ω . Expresa la distribución angular de la radiación de la fuente.	$I = \frac{d\Phi}{d\Omega}$	$\frac{W}{sr}$
Radiancia	Flujo radiante saliente de una fuente extendida ⁽⁴⁾ por unidad de ángulo sólido y por unidad de área de la superficie (θ es el ángulo cenital medido desde la normal a la superficie hasta la dirección de observación).	$L = \frac{d^2\Phi}{d\Omega dA \cos\theta}$	$\frac{W}{m^2 sr}$

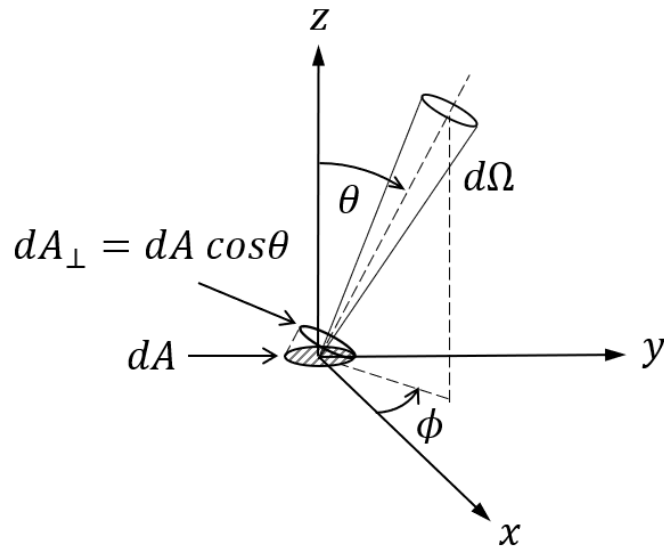
(1) El *espectro de una radiación electromagnética* es la visualización o especificación de los componentes monocromáticos de la radiación en términos de la frecuencia o la longitud de onda.

(2) Términos no incluidos en el estándar internacional IVL de la CIE. En este libro utilizaremos el término emitancia, sin embargo, en varios textos actuales lo utilizan como sinónimo de emisividad (ver 2.2).

(3) Una *fente puntual* es una fuente con dimensiones geométricas suficientemente pequeñas, en comparación con la distancia entre la fuente y la superficie irradiada, de modo que puedan ser consideradas insignificantes en los cálculos. Ejemplo, el sol visto desde la tierra.

(4) Una fuente extendida es aquella que no puede considerarse como puntual.

Figura 2.1



Nota. Ángulo sólido $d\Omega$ en la dirección (θ, ϕ) y área proyectada dA_{\perp} .

Tabla 2.2.

Valores típicos de coeficientes de reflexión (r), absorción (a) y transmisión (t)

Tipo de cuerpo	Valor característico
Cuerpo negro (ideal)	$a \equiv 1, r \equiv 0$
Cuerpo reflector perfecto	$r \equiv 1, a \equiv 0$
Cuerpo gris (real)	$0 < a < 1, 0 < r < 1$
Cuerpo transparente perfecto	$t \equiv 1$
Cuerpo opaco (real)	$t = 0$

A partir del principio de conservación de la energía, es fácil comprobar que todas estas magnitudes cumplen la relación:

$$r + a + t = 1 \quad (2.1)$$

Esta igualdad se satisface cuando las cantidades se promedian sobre un intervalo conveniente del espectro electromagnético, no se verifica necesariamente para cada una de las longitudes de onda del espectro. Por ejemplo, una superficie puede absorber radiación del visible (luz) y radiar en la región del infrarrojo.

La *emisividad* (ϵ) es una propiedad que caracteriza la capacidad de una superficie de emitir radiación electromagnética. Los materiales con alta emisividad intercambian calor con el entorno principalmente por radiación, los de baja emisividad lo hacen, preferentemente, a través de los fenómenos de conducción o convección del calor.

Se define a la *emisividad* (ε) como la emitancia relativa a la de un cuerpo negro a la misma temperatura. Su valor se calcula como el cociente entre la emitancia del cuerpo ($M(T)$) y la correspondiente a un cuerpo negro ($M_{CN}(T)$):

$$\varepsilon \equiv \frac{M(T)}{M_{CN}(T)} \quad (2.2)$$

La emisividad es una magnitud adimensional que toma valores entre 0 y 1. Las superficies radiantes reciben diferentes nombres según el valor de su emisividad, según se muestra en la Tabla 2.3:

Tabla 2.3.

Emisividades de diferentes tipos de superficies

Tipo de superficie	Emisividad
Cuerpo negro (absorbente ideal)	$\varepsilon \equiv 1$
Cuerpo blanco (reflector ideal)	$\varepsilon \equiv 0$
Cuerpo gris (superficie real)	$0 < \varepsilon < 1$
Cuerpo de color (superficie real)	$0 < \varepsilon(\lambda) < 1$

Toda superficie de un cuerpo real con valor de emisividad entre cero y uno que es independiente de la longitud de onda de la radiación emitida se denomina *cuerpo gris*. Los cuerpos reales para los cuales la emisividad varía con la longitud de onda reciben el nombre de *cuerpo de color*. Para la mayoría de las superficies metálicas, el valor de emisividad publicada es la correspondiente a la longitud de onda de máxima emisión. Experimentalmente, al ir aumentando la temperatura de la superficie, la máxima emisión de radiación ocurre para longitudes de onda cada vez menores, consecuentemente el valor de emisividad asignado a los metales varía con la temperatura superficial. Otras cuestiones de importancia son la presencia de óxidos y el valor de la rugosidad superficial, ambos son factores incrementan el valor de la emisividad. Por estas cuestiones, las tablas de emisividades presentan valores correspondientes a una dada temperatura y para una condición superficial particular.

El espectro de radiación de cuerpo negro

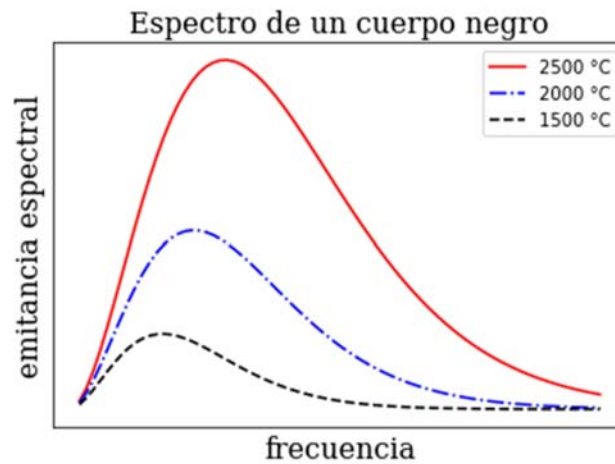
La cantidad de radiación térmica emitida por una superficie varía con su temperatura. La *emitancia* $M(T)$ y la *radiancia* $L(T)$ son magnitudes que se utilizan para caracterizar la potencia radiante de una superficie a la temperatura absoluta T .

La *emitancia espectral* $M(\nu, T)$ es una magnitud que permite caracterizar al espectro de emisión de ondas electromagnéticas de un cuerpo que se halla a la temperatura T . Esta magnitud se define de modo que $M(\nu, T) d\nu$ represente la cantidad de potencia electromagnética emitida, en todas las direcciones por unidad de área de la superficie radiante, con frecuencias en el intervalo $[\nu; \nu + d\nu]$. En el SI su valor se expresa en $(W/m^2) s$.

En la Fig. 2.2 se muestra el espectro en frecuencia de emisión térmica de una superficie a la temperatura T (constante). Según aumente la temperatura de la superficie, mayor será la radiación emitida y el punto máximo de la curva se desplazará hacia frecuencias mayores.

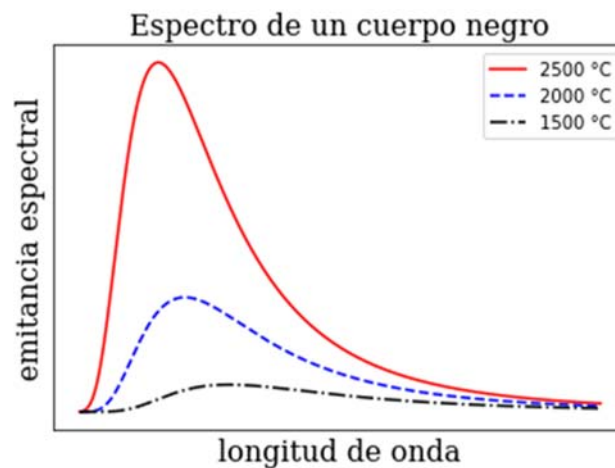
En muchos estudios la emitancia espectral se expresa en términos de la longitud de onda $M(\lambda, T)$ y en este caso su valor en el SI se expresa en unidades de $(W/m^2)/nm$ (Fig. 2.3).

Figura 2.2



Nota. Espectro de emisión en frecuencia de un cuerpo negro

Figura 2.3



Nota. Espectro de emisión en longitud de onda de un cuerpo negro

Las leyes de la radiación de Kirchhoff

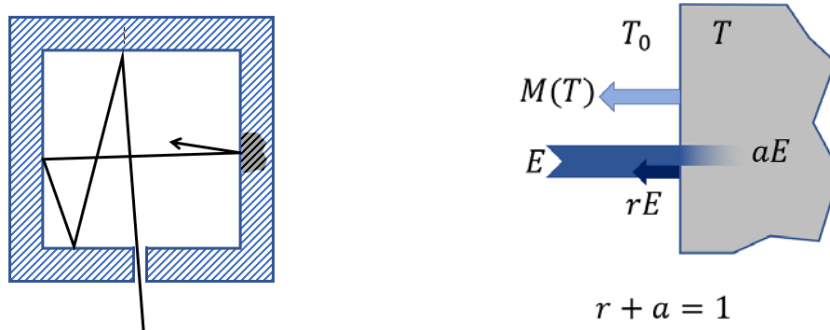
Consideremos una cavidad llena de radiación electromagnética con paredes opacas ($t = 0$) a una temperatura T constante y uniforme. La cantidad de radiación electromagnéticas que incide sobre la superficie de la cavidad la podemos caracterizar con la *irradiancia* ($E, W/m^2$) que representa la potencia de la radiación incidente en todas las direcciones por unidad de área de la superficie irradiada. Una fracción del flujo radiante incidente será absorbida por la superficie, el resto se reflejará.

Si conocemos el valor del coeficiente de absorción (a) podremos calcular la potencia que absorbe un área unitaria de la superficie haciendo el producto $a E$. La energía que absorba la pared incrementará su energía interna y entonces la temperatura de la cavidad se elevará. Si la temperatura de la superficie permanece constante, entonces radiará ondas electromagnéticas con la misma rapidez con que las absorbe, es decir:

$$M(T) = a E \text{ (en equilibrio térmico)} \quad (2.3)$$

En la Fig. 2.4 mostrada a continuación se indican los fenómenos de reflexión, absorción y emisión de radiación térmica que ocurren en la superficie de una cavidad opaca.

Figura 2.4

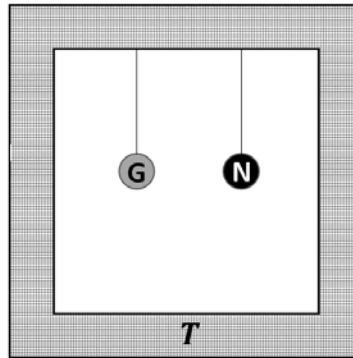


Nota. Fenómenos de reflexión, absorción y emisión de radiación térmica en la superficie de una cavidad opaca. La figura de la derecha es un detalle de los procesos que tienen lugar en la pared de la cavidad.

El físico Alemán Gustav Kirchhoff (1824-1887) enunció el siguiente teorema general: “Si un cuerpo está en equilibrio térmico con su entorno, la emisividad (ϵ) y el coeficiente de absorción (a) de su superficie poseen el mismo valor”.

Para comprobarlo, consideraremos una gran cámara en la que se ha hecho vacío, con sus paredes a la temperatura T . En la cámara hay un cuerpo gris y un cuerpo negro en equilibrio térmico, colgados por delgados hilos aislantes térmicos del techo (Fig. 2.5).

Figura 2.5



Nota. Cavidad conteniendo un cuerpo gris y un cuerpo negro en equilibrio térmico a la temperatura T

Los cuerpos y las paredes intercambian energía solamente emitiendo o absorbiendo ondas electromagnéticas. La irradiancia (W/m^2) sobre las superficies es E . En estas condiciones, cada cuerpo emite la misma potencia que absorbe:

$$\begin{aligned} A_{CN} M_{CN}(T) &= A_{CN} E \\ A M(T) &= A aE \end{aligned} \quad (2.4)$$

A_{CN} y A son las áreas (m^2) de las superficies de los cuerpos negro y gris respectivamente y $M_{CN}(T)$ y $M(T)$ sus correspondientes emitancias (W/m^2).

A partir de la definición de emisividad (Ec.2.2) tenemos que $M(T) = \varepsilon M_{CN}(T)$, entonces:

$$\varepsilon = a \quad (2.5)$$

Entonces podemos afirmar que, en condiciones de equilibrio térmico, una superficie opaca que refleja fuertemente la radiación electromagnética de una región del espectro ($r \cong 1$), es un mal absorbente de este tipo de radiación ($a = 1 - r \cong 0$), y a la vez, un pobre emisor ($\varepsilon = a \cong 0$).

Supongamos ahora que en la cámara hay N cuerpos de diferentes materiales en equilibrio térmico en las condiciones anteriores. La fracción de la irradiancia (E) que es absorbida varía según el tipo de superficie, pero por estar todos los cuerpos en equilibrio térmico, la potencia que cada uno radia es igual a la que absorbe:

$$M_1(T) = a_1 E, \quad M_2(T) = a_2 E, \dots \quad M_N(T) = a_N E \quad (2.5)$$

De lo anterior resulta que, en condiciones de equilibrio térmico, los cocientes entre la emitancia y el coeficiente de absorción de cada una de las superficies son iguales, independientes del material y solo dependen de la temperatura T :

$$\frac{M_1(T)}{a_1} = \frac{M_2(T)}{a_2} = \dots = \frac{M_N(T)}{a_N} = M_{CN}(T) \quad (2.6)$$

Esta relación se conoce como la *ley de la radiación de Kirchoff*.

De estas leyes concluimos que las superficies de los cuerpos con mayor capacidad de absorción de radiación térmica son a la vez las mejores emisoras de radiación térmica.

A continuación, se discuten varios modelos que se desarrollaron para intentar explicar el espectro del cuerpo negro en base a las teorías de la física clásica. Finalmente, se describe el modelo vigente desarrollado por Max Planck.

Las leyes empíricas de la radiación térmica

Las siguientes leyes son de naturaleza empírica, es decir son generalizaciones de los resultados obtenidos en muchas observaciones directas o a través de mediciones simples. Las leyes empíricas permiten describir y predecir el comportamiento de un fenómeno, pero no permiten conocer las causas que los provocan.

Ley de Stefan-Boltzmann (1879)

En 1879 el físico austriaco Jožef Stefan (1835-1893) basándose en mediciones publicadas halló una expresión para calcular el flujo radiante saliente por unidad de área de una superficie a la temperatura absoluta T . Luego, en 1884, la expresión fue deducida teóricamente aplicado la teoría termodinámica por el físico austriaco Ludwig Boltzmann (1844-1906):

$$M(T) = \varepsilon \sigma T^4 \quad (W/m^2) \quad (2.8)$$

donde $\sigma = 5,6703 \times 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$ es la constante de Stefan-Boltzmann.

Esta expresión es la ley de Stefan-Boltzmann.

La potencia radiada o flujo radiado por una superficie de área A se calcula como el producto del área A radiante por su emitancia $M(T)$:

$$P(T) = A M(T) \quad (W) \quad (2.9)$$

Ley de desplazamiento de Wien (1893)

En 1893, el físico alemán Wihelm Wien (1864-1928) determinó experimentalmente la relación entre la temperatura absoluta T (K) de una superficie radiante con la longitud de onda para la cual su emitancia espectral $M(\lambda, T)$ alcanza su valor máximo o pico λ_p (m):

$$\lambda_p \cdot T = C_{Wien} \quad (2.10)$$

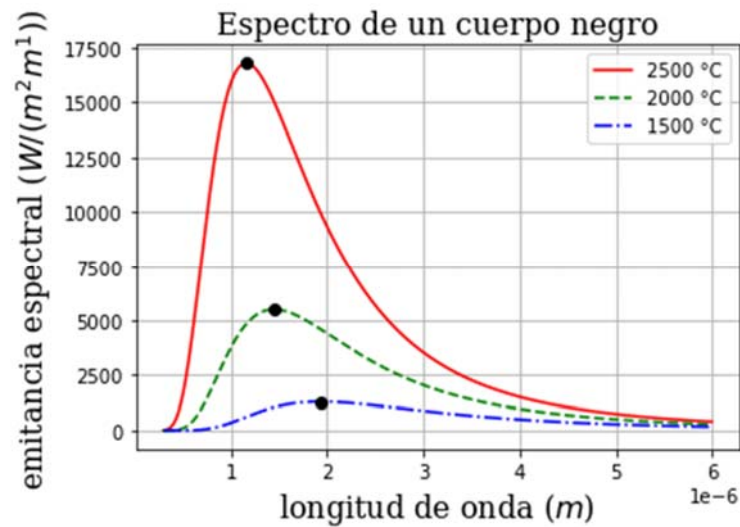
donde $C_{Wien} = 2,898 \times 10^{-3} m K$ es la constante de Wien.

Una expresión más práctica para esta ley resulta expresando la longitud de onda en μm :

$$\lambda_p \cdot T = 2898 \mu m \cdot K \quad (2.11)$$

Como se puede ver en la Fig. 2.6, a medida que aumenta la temperatura absoluta del cuerpo negro, el máximo de la emitancia se presenta para longitudes de onda cada vez menores.

Figura 2.6



Nota. Máximos de radiancia espectral para tres valores de temperatura de un cuerpo negro. Un aumento de la temperatura va acompañado por un desplazamiento del pico de la emitancia espectral hacia menores valores de longitud de onda.

La física clásica y la forma del espectro de cuerpo negro

A continuación, se presentan los principales modelos basados en la teoría clásica de la física que buscaban explicar la forma del espectro continuo de la radiación térmica.

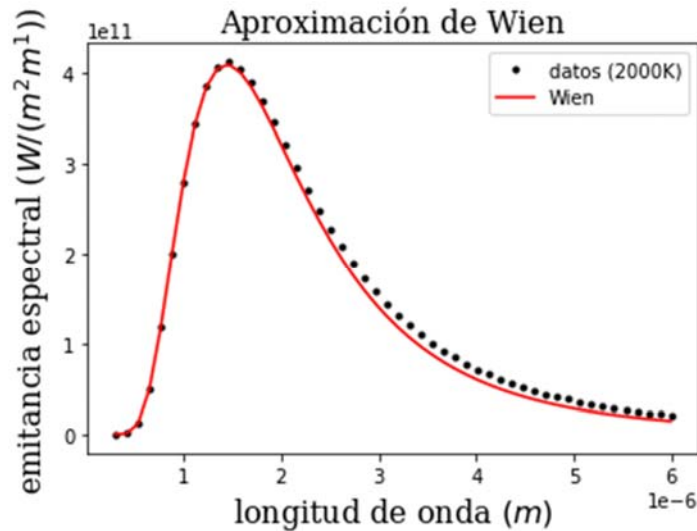
La aproximación de Wien (1896)

El físico alemán Wihelm Wien (1864-1928) propuso una función empírica que ajustó a los datos experimentales. La ecuación para calcular la emitancia espectral que obtuvo es:

$$M(\lambda, T) = \frac{c_1}{\lambda^5} \exp\left(-\frac{c_2}{\lambda T}\right) \quad (c_1 \text{ y } c_2 \text{ constantes ajustadas}) \quad (2.12)$$

En la Fig. 2.7 se halla graficada esta expresión para $T = 2000 \text{ K}$. Se puede notar que la curva reproduce muy bien los valores del flujo radiante para longitudes de onda menores a la correspondiente al pico de emitancia, en cambio, para valores mayores la curva pasa por debajo de los datos experimentales. No obstante, su principal inconveniente es que no aporta información sobre las causas físicas de la forma de la curva.

Figura 2.7



Nota. Aproximación de Wien para la radiación del cuerpo negro

La teoría clásica de Rayleigh-Jeans de la cavidad radiante (1899)

Los científicos ingleses John William Strutt (1842-1919), más conocido como Lord Rayleigh, y James Jeans (1877-1946) fueron los primeros en tratar de deducir las leyes empíricas de radiación del cuerpo negro. Ellos asumieron las siguientes consideraciones para elaborar su teoría:

- La distribución espectral de radiación emitida por un cuerpo negro es descrita teóricamente usando las leyes de la física clásica.
- Una cavidad metálica conteniendo radiación electromagnética en equilibrio térmico con sus paredes a la temperatura T es considerada un cuerpo negro.
- La radiación térmica dentro de la cavidad es generada a causa de la agitación térmica de los electrones de los átomos de su superficie. Estos electrones oscilan alrededor de sus posiciones de equilibrio y entonces, de acuerdo con la teoría electromagnética clásica, estas cargas aceleradas emiten radiación de igual frecuencia a la de su oscilación.
- Cada uno de los electrones de las paredes de la cavidad se comporta como oscilador armónico con la capacidad de absorber y emitir ondas electromagnéticas de cualquier frecuencia.

La teoría electromagnética de Maxwell permite demostrar que dentro de la cavidad se establecen ondas electromagnéticas estacionarias con nodos en las paredes. Un análisis geométrico es necesario para calcular la cantidad de ondas estacionarias que pueden establecerse con frecuencias permitidas dentro del intervalo $[\nu, \nu + d\nu]$. En base a la *ley de*

equipartición de la energía, podemos asignar a la energía promedio de cada onda la cantidad kT , independientemente de la frecuencia de la onda. Finalmente, la energía promedio en la cavidad por unidad de volumen en el intervalo de frecuencias $[\nu, \nu + d\nu]$ resulta ser igual al producto de la cantidad de ondas estacionarias por su energía promedio, dividido por el volumen de la cavidad. Rayleigh y Jean procedieron de manera similar a la descrita aplicando rigurosamente las teorías de la física clásica y hallaron la siguiente expresión (no deducida aquí) para la densidad de energía espectral en la cavidad:

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \left(\frac{J \cdot s}{m^3} \right) \quad (2.13)$$

donde $k = 1,380649 \cdot 10^{-23}$ J/K : constante de Boltzmann.

Esta expresión recibe el nombre de *ley de Rayleigh-Jeans* expresada en términos de la frecuencia. Podemos expresar esta ley en términos de la longitud de onda a partir de la condición siguiente:

$$\rho(\nu, T) d\nu = -\rho(\lambda, T) d\lambda \quad (2.14)$$

El signo menos indica que un incremento de la longitud de onda corresponde a una disminución de la frecuencia, $d\lambda = -d\nu$, entonces: $\rho(\lambda, T) = -\rho(\nu, T) \frac{d\nu}{d\lambda} = -\rho\left(\frac{c}{\lambda}, T\right) \left(-\frac{c}{\lambda^2}\right)$

$$\rho(\lambda, T) = 8\pi \frac{kT}{\lambda^4} \left(\frac{J}{m^3 \cdot m} \right) \quad (2.15)$$

Esta es la expresión de *ley de Rayleigh-Jeans* como función de la longitud de onda.

Un pequeño orificio en la pared de esta cavidad por donde escape parte de la radiación puede ser considerado como la superficie de un cuerpo negro. Entonces, el espectro de emisión del cuerpo negro a la temperatura T puede ser caracterizado a partir de la densidad de energía espectral en la cavidad. Pero tenemos un inconveniente: ¿Cuál es la relación entre la emitancia espectral del orificio de la pared y la energía espectral por unidad de volumen de la cavidad? Resolvamos esto para poder continuar con la descripción del modelo.

Consideremos una cavidad radiante con un pequeño orificio en una de sus paredes, tal como se muestra en la Fig. 2.8.

En la cavidad de un cuerpo negro la densidad espectral de energía $\rho(\lambda, T)$ es isotrópica, entonces:

$$\frac{d\rho(\lambda, T)}{d\Omega} = \frac{\rho(\lambda, T)}{4\pi}$$

Podemos calcular a la distribución de la energía espectral por unidad de ángulo sólido que durante un intervalo de tiempo t sale del orificio de área A de la pared como:

$$\frac{dQ(\lambda, T)}{d\Omega} = \frac{\rho(\lambda, T)}{4\pi} V = \frac{\rho(\lambda, T)}{4\pi} ct A \cos\theta$$

$$dQ(\lambda, T) = \frac{\rho(\lambda, T)}{4\pi} ct A \cos\theta d\Omega = \frac{\rho(\lambda, T)}{4\pi} ct A \cos\theta \sin\theta d\theta d\phi$$

$$Q(\lambda, T) = \frac{c}{4\pi} \rho(\lambda, T) t A \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos\theta \sin\theta d\theta = \frac{c}{4} \rho(\lambda, T) t A$$

$$\Phi(\lambda, T) = \frac{dQ(\lambda, T)}{dt} = \frac{c}{4} \rho(\lambda, T) A$$

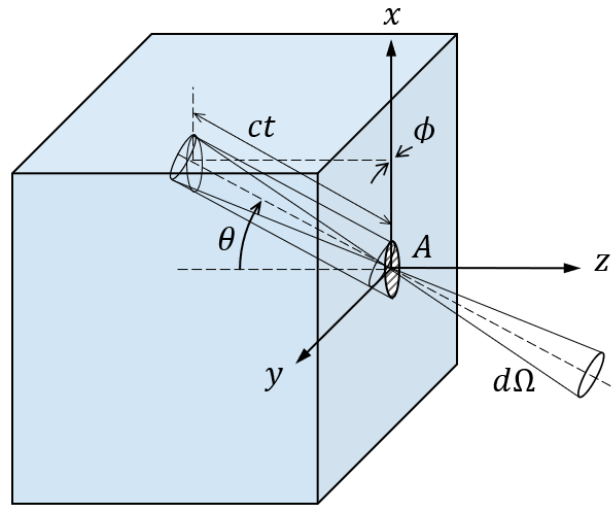
A partir de la expresión anterior para el flujo espectral, podemos calcular la emitancia espectral:

$$M(\lambda, T) = \frac{d\Phi(\lambda, T)}{dA}$$

$$M(\lambda, T) = \frac{c}{4} \rho(\lambda, T) \left(\frac{W}{m^2 m} \right) \quad (2.16)$$

Esta es la relación entre la emitancia y la energía por unidad de volumen para un cuerpo negro.

Figura 2.8

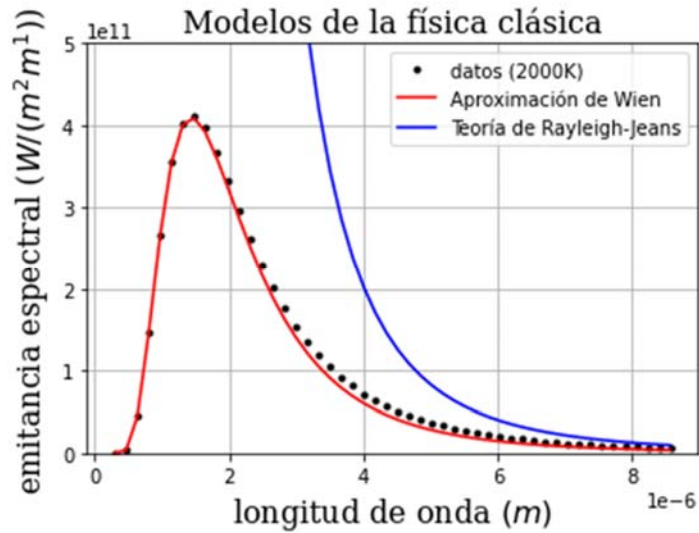


Nota. Cavidad radiante con un orificio de área A. El esquema mostrado corresponde a una dirección arbitraria de emisión de radiación. Los ángulos θ, ϕ son los ángulos esféricos. $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$.

Finalmente, aplicado la relación anterior a la densidad de energía espectral de la teoría de Rayleigh-Jeans, la emitancia espectral del orificio es:

$$M(\lambda, T) = 2\pi c \frac{kT}{\lambda^4} \left(\frac{W}{m^2 m} \right) \quad (2.17)$$

Figura 2.9



Nota. Modelos del espectro del cuerpo negro elaborados basados en la física clásica

La gráfica de la ley de Rayleigh-Jeans mostrada en la Figura 2.9 permite observar que reproduce bien la forma del espectro de emisión del cuerpo negro para largas longitudes de onda (bajas frecuencias), pero para longitudes de onda menores la expresión comienza a apartarse de los resultados experimentales. Este modelo se torna inaceptable porque predice que el cuerpo a una dada temperatura T podría radiar cantidades infinitas de energía, resultado que carece de sentido físico.

$$\int_0^{\infty} \rho(\lambda, T) d\lambda = \int_0^{\infty} 8\pi \frac{kT}{\lambda^4} d\lambda \rightarrow \infty \quad (2.18)$$

Esta gran falla del modelo se la conoció como la “catástrofe ultravioleta”.

Las leyes de la física clásica, que con gran éxito se habían aplicado para resolver problemas de cuerpos macroscópicos, no resultaron ser correctas para resolver el problema de la radiación térmica del cuerpo negro.

La teoría cuántica de Planck de la cavidad radiante (1900)

El 19 de octubre del año 1900 el físico alemán Max Planck (1858-1947) presentó en la reunión de la Sociedad de Física en Berlín la siguiente expresión empírica para la distribución espectral de la energía por unidad de volumen dentro de la cavidad:

$$\rho(\nu, T) = b_1 \frac{\nu^3}{e^{\frac{b_2}{T}} - 1} \quad (b_1 \text{ y } b_2 \text{ constantes}) \quad (2.19)$$

Al enterarse que su curva concordaba satisfactoriamente con las medidas experimentales más precisas del momento, se ocupó en encontrar el fundamento teórico de su ley. En 1901

publica en la revista *Annalen der Physik* su trabajo titulado “*On the Law of Distribution of Energy in the Normal Spectrum*” donde justifica teóricamente su ecuación.

Max Planck planteó como causa de la falla del modelo de Rayleigh-jeans que la energía promedio que se le asignó a cada oscilador de la cavidad era proporcional a la temperatura absoluta de la pared, en su lugar él consideró que debía depender de la frecuencia. Aceptó la hipótesis del modelo de Rayleigh-Jeans de considerar que cada uno de los electrones de las paredes de la cavidad se comporta como oscilador armónico emitiendo y absorbiendo radiación, pero descartó el principio de equipartición de la energía de la teoría clásica para estimar la energía promedio de cada uno de ellos.

A continuación, describiremos los postulados teóricos de Planck para demostrar su ley de distribución de energía en un cuerpo negro.

La Ley de Planck

Postulados de Planck:

1. La superficie de un cuerpo radiante a la temperatura T puede ser considerada como compuesta por un gran número de osciladores armónicos cada uno con una frecuencia característica de oscilación. La energía de un oscilador debe ser siempre un múltiplo entero de una cantidad mínima de energía $h\nu$ (Fig. 2.10):

$$E_n = n h\nu \quad (2.20)$$

$n = 0,1,2, \dots$: Número cuántico del estado del oscilador

$$h = 6,62607015 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}: \text{ Constante de Planck} \quad (2.21)$$

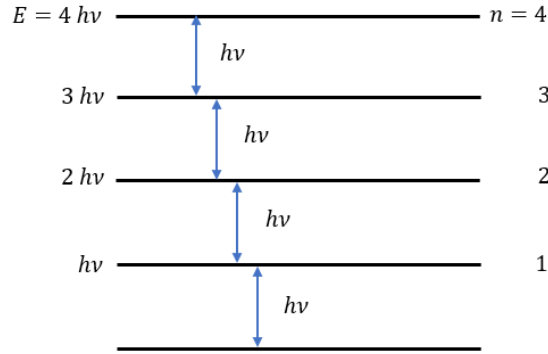
2. Un oscilador emite energía cuando realiza una transición de un estado n hacia otro n' de menor energía ($n > n'$):

$$\Delta E = E_n - E_{n'} = (n - n') h\nu: \text{ Energía emitida por el oscilador} \quad (2.22)$$

Si la transición ocurre desde el estado n' hacia n ($n > n'$), el oscilador absorbe energía.

Si el oscilador permanece en un estado estacionario, no absorbe ni emite energía.

Figura 2.10



Nota. Niveles de energía permitidos para un oscilador cuántico de frecuencia ν

El primer postulado de Planck que establece que la energía de los electrones del material es una magnitud discreta, y no continua como se considera en física clásica para los cuerpos macroscópicos, fue en germen del nacimiento de una nueva teoría que se desarrolló 25 años después, la teoría cuántica.

A partir de estos postulados y aplicando la teoría termodinámica (desarrollos no mostrados aquí) obtiene la siguiente expresión para la energía promedio de un oscilador de frecuencia ν :

$$\overline{\epsilon(\nu, T)} = \frac{h\nu}{e^{kT} - 1} \quad (2.23)$$

Finalmente, obtuvo la siguiente expresión para la densidad de energía espectral:

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{kT} - 1} \left(\frac{W s}{m^3} \right) \quad (2.24)$$

Esta expresión es la *ley de Planck* para la distribución de energía por unidad de volumen en la cavidad de un cuerpo negro expresada términos de la frecuencia.

Podemos expresar esta ley en términos de la longitud de onda a partir de la Ec. (2.14):

$$\rho(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\lambda kT} - 1} \left(\frac{W}{m^3 m} \right) \quad (2.25)$$

Sabemos, a partir de la Ec. (2.16) que la emitancia espectral se calcula multiplicando energía espectral por unidad de volumen por $c/4$. Luego, las expresiones para las emitancias en términos de la frecuencia y de la longitud de onda son:

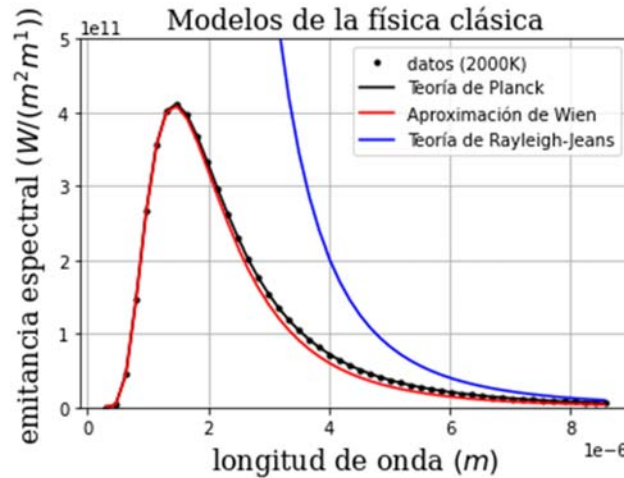
$$M(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{kT} - 1} \left(\frac{W s}{m^2} \right) \quad (2.26)$$

$$M(\lambda, T) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\lambda kT} - 1} \left(\frac{W}{m^2 m} \right) \quad (2.27)$$

Esta expresión se conoce con el nombre de *ley de radiación de Planck* y representa la emitancia espectral de un cuerpo negro a la temperatura T . Esta expresión se ajusta

perfectamente a la curva experimental y permite explicar las leyes empíricas conocidas: la ley de desplazamiento de Wien y la ley de Stefan-Boltzmann.

Figura 2.11



Nota. Modelo cuántico de Planck y modelos clásicos del espectro del cuerpo negro

Deducción de las leyes empíricas de la radiación térmica

La ley del desplazamiento de Wien también puede deducirse a partir de la *ley de Planck* hallando el máximo de la curva:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} (M(\lambda, T)) = 0 \rightarrow \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\frac{1}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1} \right) = 0$$

$$\lambda_{m\acute{a}x} \cdot T = C_{Wien} = \frac{hc}{4,965 \cdot k} = 2,898 \cdot 10^{-3} \text{ m K} \quad (2.28)$$

La expresión empírica para emittancia hallada por Stefan Boltzmann puede obtenerse integrando la *ley de Planck* sobre todas las frecuencias

$$\int_0^{\infty} M(\lambda, T) d\lambda = 2\pi hc^2 \int_0^{\infty} \frac{1}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1} d\lambda = \dots = \frac{2\pi^5 k^4}{15 h^3 c^2} T^4 = \sigma T^4 \quad (2.29)$$

Notemos que ley de Stefan-Boltzmann es el área bajo la curva de Planck y, además, hemos obtenido la expresión teórica de la constante empírica de Stefan-Boltzmann: $\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15 h^3 c^2}$

La constante h que Planck halló elaborando su modelo para explicar la radiación térmica es tan importante que aparece en todas las leyes de los fenómenos físicos subatómicos. En noviembre de 2018 se redefinieron varias unidades de medida del SI de modo que todas se basen en constantes de la naturaleza. Una de las unidades redefinidas fue el kilogramo que

desde 1889 estuvo definido por la masa de un cilindro de platino-iridio. La nueva definición de la unidad de masa se basa en una constante universal, la constante de Planck: $h = 6,62607015 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

Max Planck fue galardonado con el Premio Nobel de Física 1918 por sus descubrimientos sobre los cuantos de energía.

Aplicaciones y cuestiones prácticas

La Teoría presentada por Planck para la descripción y análisis de la radiación del cuerpo negro marcó una revolución dentro de la Física, pero a su vez los desarrollos posteriores implicaron un impacto tecnológico de gran magnitud con múltiples aplicaciones prácticas.

A continuación, se presentan algunos ejemplos de aplicación tecnológica de esta teoría.

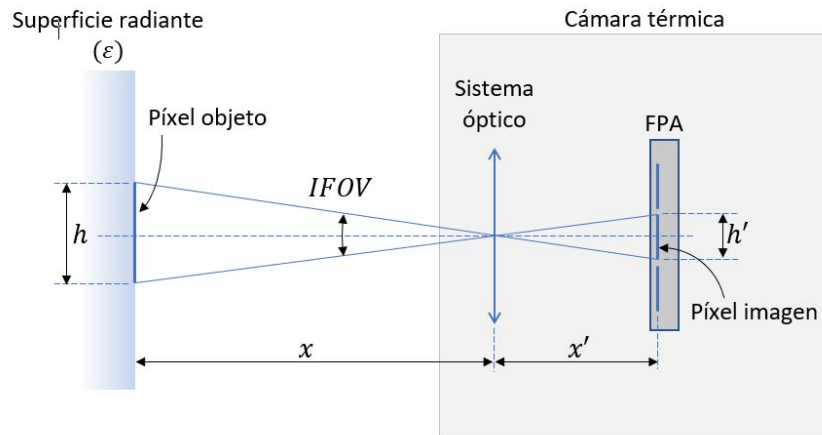
Cámaras y pistolas térmicas

Las cámaras térmicas (o cámaras infrarrojas) son equipos portátiles para la medición de temperatura sin contacto. Básicamente están formados por un sistema óptico, detectores de radiación sensibles en el intervalo de longitudes de onda $[3.5 \mu\text{m}, 14 \mu\text{m}]$, módulos de electrónica para el procesamiento de la señal, una fuente de alimentación y una pantalla. En cambio, las pistolas térmicas (o termómetros infrarrojos) son equipos más simples, ya que tienen un único sensor sin óptica.

Ambos tipos de equipos son de gran utilidad en muchos ámbitos, por ejemplo se utilizan para determinar soldaduras en mal estado en electrónica y electricidad, detectar componentes con fallas en su funcionamiento, realizar seguimientos de procesos térmicos, determinar las pérdidas de calor a través de muros, identificar superficies húmedas que se mantienen frías debido a la evaporación del agua o medir la temperatura de las personas.

En la Fig. 2.12, se presenta un esquema de las principales partes de una cámara térmica. La cámara posee una cuadrícula de sensores de radiación infrarroja (IR) ubicada en el plano focal del sistema óptico, conocido como FPA (*focal plane array*). Cada elemento del detector (“pixel imagen”) es un sensor de flujo radiante (W), todos estos con un mismo valor de campo de visión instantánea $IFOV$ ($mrad$). La porción de superficie del cuerpo cuya potencia radiante es registrada por un único pixel del detector la denominaremos “pixel objeto”. El tamaño de un píxel objeto (h) está determinado por la distancia de la superficie a la óptica (x) y por el $IFOV$, $h = \frac{IFOV}{1000} x$. Un valor de $IFOV = 1,5 \text{ mrad}$ significa que la cámara puede detectar detalles de un tamaño mínimo de $1,5 \text{ mm}$ a 1 m de distancia. Las cámaras disponen de distanciómetros láser para medir la distancia x .

Figura 2.12



Nota. Esquema geométrico de la radiación incidente en un pixel del sensor de la cámara térmica

Despreciando las aberraciones, absorciones y reflexiones en el sistema óptico y las radiaciones reflejadas en la superficie del cuerpo que ingresan a la cámara, podemos considerar que el flujo registrado por cada pixel sensor del FPA es igual al flujo saliente del pixel objeto de la superficie radiante. La salida de cada sensor digital es convertida a un nivel de potencia (pW).

Por otro lado, para calcular la temperatura debemos expresar la potencia registrada por cada píxel imagen en términos de la radiancia de la superficie del cuerpo $L(T)$ la cuál varía con su temperatura, su emisividad y la distancia a la cámara. Igualando la expresión teórica de la potencia incidente en cada pixel al valor medido podremos calcular la temperatura correspondiente de cada pixel objeto. El módulo de la electrónica es el encargado de realizar la conversión de potencia a temperatura. Este valor de temperatura se presenta en un píxel de la pantalla, codificado con una escala de falsos colores o con una escala de grises. De este modo, la imagen generada por las medidas simultáneas de todos los pixeles conforma la imagen en temperatura de la escena.

La imagen de la Fig. 2.13 corresponde a una termografía mostrada en niveles de grises. Las zonas oscuras corresponden a objetos que emiten relativamente poca radiación térmica como consecuencia de su baja temperatura. Las zonas claras corresponden a superficies de gran emisión de radiación infrarroja, éstas son superficies calientes que se están enfriando radiando calor. Podemos notar que las narices de casi todos es la parte del rostro de menor temperatura. También es sencillo notar que uno de los integrantes está perdiendo calor a través de la trama de la ropa de lana.

Figura 2.13



Nota. Termografía junto a varios compañeros tomada un día de invierno con una cámara de infrarrojo del Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp) en las instalaciones del Grupo de Ensayo de Materiales (GEMA) del Departamento de Aeronáutica de la Facultad de Ingeniería (UNLP).

Formas de determinar el valor de emisividad de una superficie

En la práctica el valor de la emisividad de una superficie se puede determinar de diferentes formas:

1) Estimar el valor a partir de una tabla de emisividades típicas de diferentes materiales. Estos valores son orientativos y corresponden a valores medidos a una temperatura determinada y con una condición superficial particular.

2) Medir la temperatura de la superficie del objeto con un termómetro de contacto. Luego, con una cámara térmica se deberá apuntar a la superficie y ajustar el valor de emisividad en el instrumento hasta que el valor de temperatura registrado con la cámara coincida con la medida obtenida con el termómetro de contacto. . El valor de emisividad ajustado en la cámara es una estimación de la emisividad de la superficie radiante.

3) Adherir a la superficie un trozo de cinta adhesiva con emisividad ε_{cinta} conocida. Esperar unos minutos hasta que la cinta alcance el equilibrio térmico con la superficie del material. Con una cámara térmica, y habiendo ajustando en el equipo la emisividad al valor ε_{cinta} , medir la temperatura de la cinta. Finalmente, se procede a medir la temperatura de la superficie del material sin cinta con la cámara térmica ajustando el valor de emisividad en el instrumento hasta

la medida coincide con la temperatura medida anteriormente con la cinta adhesiva. El valor de la emisividad adoptado es una estimación de la emisividad de la superficie radiante que queríamos determinar (ϵ_{sup})

Aplicaciones de materiales con baja emisividad

En general, se observa que los materiales que son buenos conductores de la electricidad son malos absorbentes y emisores de radiación infrarroja, por lo tanto, son muy buenos reflectores de este tipo de radiación. En tecnología, esta propiedad es la base para fabricar los espejos de los láseres industriales de CO₂ de alta potencia que emiten en el infrarrojo (10,6 μm). Los espejos de estos equipos son fabricados con un sustrato de cobre para favorecer la conducción el calor lejos de la superficie especular y evitar deformaciones térmicas. La superficie de cobre se mecaniza con la forma deseada y se pule hasta que la rugosidad es inferior a la longitud de onda de trabajo. Luego se deposita sobre ella una delgada capa de aluminio, de plata o de oro. La reflectancia de los espejos metálicos con recubrimientos de oro es del 99% a 10,6 μm y se mantiene por encima del 97% en el intervalo de longitudes de onda entre 2 μm y 20 μm . La fracción restante de la potencia incidente sobre el espejo ($a = 1 - r$) es absorbida y convertida en calor.

Problemas resueltos

Problema 1: a) Sabiendo que la temperatura del Sol es aproximadamente de 6000 K, estimar el poder emisivo del Sol en su superficie si el radio solar es 6,96 $\cdot 10^8 m$.
b) Si la distancia promedio entre Mercurio y el Sol es de 5,79 $\cdot 10^{10} m$, determinar la irradiancia solar incidente en cualquier punto de la órbita de Mercurio.

Solución:

a) Para calcular el poder emisivo por la superficie del sol utilizaremos la Ley de Stefan-Boltzmann:

$$M(T) = \epsilon \sigma T^4$$

donde $M(T)$ es la emitancia o potencia radiada por unidad de superficie, ϵ la emisividad, σ la constante de Stefan-Boltzmann y T la temperatura del Sol. Si consideramos al Sol como un cuerpo negro, entonces su emisividad será $\epsilon = 1$.

Reemplazando los valores en la expresión anterior y obtenemos:

$$M = \epsilon \sigma T^4 = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4} \cdot (6000 K)^4 = 73.483.200 \frac{W}{m^2}$$

b) La irradiancia solar (E) sobre un punto en la órbita de Mercurio es igual a la potencia radiada (P) por el Sol, dividida por el área de la superficie esférica centrada en el sol de radio igual a la distancia entre el Sol y Mercurio ($A = 4\pi r^2$). Matemáticamente esto puede escribirse como:

$$E_{\text{mercurio}} = \frac{P_{\text{sol}}}{4\pi(D_{\text{mercurio-sol}})^2}$$

donde E_{mercurio} es la irradiancia en un punto de la órbita de Mercurio, P_{sol} la potencia total radiada por el Sol y $D_{\text{mercurio-sol}}$ es la distancia entre Mercurio y el Sol.

La potencia emitida por el Sol, la podemos calcular a partir del poder emisor o emitancia del Sol obtenida en el inciso anterior y del área de la superficie esférica solar:

$$P_{\text{sol}} = M \cdot A_{\text{sol}} = M \cdot (4\pi R_{\text{sol}}^2) = 4,47 \cdot 10^{26} \text{ W}$$

con $R_{\text{sol}} = 6,96 \cdot 10^8 \text{ m}$. Entonces:

$$E_{\text{mercurio}} = \frac{4,47 \cdot 10^{26} \text{ W}}{4\pi (5,79 \cdot 10^{10} \text{ m})^2} \approx 1,06 \cdot 10^4 \frac{\text{W}}{\text{m}^2}$$

Problema 2: Se tiene un cuerpo opaco de área A y poder reflectante r sobre el cual incide una irradiancia E .

- Calcule la potencia absorbida por el cuerpo en función de los datos del enunciado.
- Considerando al cuerpo en equilibrio térmico, calcule la emitancia (o poder emisor M) del cuerpo opaco y la potencia emitida en función de los datos.
- Determine la temperatura T_1 del cuerpo en función de los datos del enunciado y las constantes que correspondan.
- Considere ahora que la irradiancia incidente aumenta de manera que la nueva temperatura del cuerpo es $T_2 = 2 T_1$. Calcule la nueva emitancia, la potencia emitida por el cuerpo opaco y compare los resultados con el valor calculado en b).

Solución:

- a) Debemos expresar la potencia absorbida por el cuerpo en función de los datos:

$$P_{\text{abs}} = aEA$$

Pero el poder absorbente no es dato y sí lo es el poder reflectante, así que sabiendo que se debe cumplir $a + r = 1$ podemos expresar la potencia absorbida en función de r :

$$P_{\text{abs}} = aEA = (1 - r)EA$$

- b) Como el cuerpo se halla en equilibrio térmico, La potencia emitida será igual a la potencia absorbida, luego

$$P_{\text{emitida}} = P_{\text{abs}} = (1 - r)EA$$

y la emitancia (o poder emisor M) la calculamos sabiendo que $P_{\text{emitida}} = MA$

$$M = \frac{P_{\text{emitida}}}{A} = (1 - r)E$$

- c) En equilibrio térmico, la emisividad es igual al poder absorbente $\varepsilon = a$. Luego a partir de la Ley de Stefan-Boltzmann podemos determinar la temperatura del cuerpo opaco:

$$M_1 = \varepsilon\sigma T_1^4 = a\sigma T_1^4 = (1 - r)\sigma T_1^4$$

Además, en el inciso anterior hallamos que $M_1 = (1 - r)E$. De ambas expresiones resulta que

$$T_1 = \sqrt[4]{E/\sigma}$$

- d) Si la irradiancia aumenta de manera que la nueva temperatura del cuerpo es $T_2 = 2T_1$, la emitancia del cuerpo calculada a partir de la Ley de Stefan-Boltzmann será:

$$M_2 = \varepsilon\sigma T_2^4 = \varepsilon\sigma(2T_1)^4 = 2^4 M_1 = 2^4(1-r)E$$

La potencia emitida en este caso será:

$$P_2 = M_2 A = (2^4 M_1) A = 16 P_1 = 16(1-r)EA$$

Notar que, si la temperatura del cuerpo aumenta en un factor 2, la potencia emitida aumentará en un factor 16 (2^4).

Problema 3: Los radiadores de calefacción de una estufa eléctrica de 1 kW se encuentran al rojo vivo a una temperatura de 900 °C. Suponiendo que el 100% del calor emitido es debido a la radiación y que los radiadores actúan como cuerpos negros, responder:

a) ¿Cuál es el área efectiva de la superficie radiante? (Suponer que la temperatura ambiente es de 20 °C).

b) ¿Cuál es la longitud de onda para la cual la energía radiada por unidad de tiempo es máxima?

c) Diga si la siguiente afirmación es verdadera o falsa justificando su respuesta: "La radiación electromagnética emitida por esta estufa eléctrica se encuentra mayoritariamente en el rango del visible".

Solución:

La ley de Stefan-Boltzmann nos permite calcular la densidad de potencia radiada por la estufa:

$$M(T) = \varepsilon\sigma T^4$$

$M(T)$ es la emitancia o potencia radiada por unidad de superficie de la estufa eléctrica, ε la emisividad de la superficie, σ la constante de Stefan-Boltzmann, T la temperatura de la superficie y T_0 la temperatura ambiente.

Debido a que debemos considerar al radiador como un cuerpo negro tenemos que $\varepsilon = 1$.

Por razones de sencillez, consideraremos válida para este problema la hipótesis que el entorno también se comporta como un cuerpo negro a una temperatura uniforme T_0 . Luego, la densidad de potencia neta radiada por la estufa podrá ser expresada del siguiente modo:

$$\frac{P}{A} = \sigma(T^4 - T_0^4)$$

Entonces:

$$A = \frac{P}{\sigma(T^4 - T_0^4)}$$

Notemos que las temperaturas de la estufa y del ambiente están expresadas en grados centígrados. Debemos convertir estos valores a Kelvin:

La temperatura de la estufa es $T = 900^\circ\text{C} = 1.173,15\text{ K}$

La temperatura ambiente es $T_0 = 20^\circ\text{C} = 293,15\text{ K}$

Finalmente, sabiendo que la potencia del radiador es 1 kW, al reemplazar todo en la expresión anterior obtenemos el valor de superficie del radiador:

$$A = \frac{1 \times 10^3\text{ W}}{5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}^4} ((1173,15\text{ K})^4 - (293,15\text{ K})^4)} \approx 9,35 \cdot 10^{-3}\text{ m}^2$$

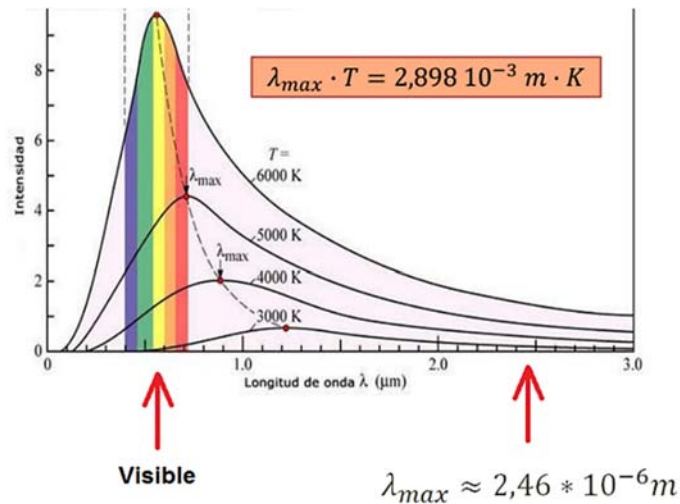
b) Usando la Ley de Wien:

$$\lambda_{max} \cdot T = 2,9 \cdot 10^{-3} m K$$

donde λ_{max} es la longitud de onda correspondiente a la máxima emitancia espectral y T la temperatura de la superficie. Si el cuerpo está a $1.173,15 K$, tenemos que:

$$\lambda_{max} = \frac{2,9 \cdot 10^{-3} m K}{T} = \frac{2,9 \cdot 10^{-3} m K}{1.173,15 K} \approx 2,47 \cdot 10^{-6} m$$

c) A la temperatura de la estufa ($900^{\circ}C = 1.173,15 K$), la mayor parte de la radiación electromagnética radiada por la estufa no se encuentra dentro del rango del visible por lo que la afirmación del enunciado es falsa.



Problemas propuestos

Problema 1: ¿A qué longitud de onda radiará más una cavidad que se encuentra a $6.000 K$? ¿A qué longitud de onda el cuerpo humano emite más radiación térmica?

Problema 2: Un pequeño agujero circular de diámetro es $10 mm$ con su máxima emitancia espectral para $\lambda = 550 nm$ baja su temperatura de modo que ahora la máxima emisión de radiación ocurre para $\lambda = 551 nm$. ¿En cuánto disminuyó la potencia radiada desde el agujero?

Problema 3: La radiación que incide sobre la superficie de cierto cuerpo opaco es de $50 W/m^2$. La superficie absorbe $20 W/m^2$.

- ¿Cuál es la reflectancia (poder reflectante) de la superficie?
- ¿Cuál es la absorbancia (poder absorbente)?
- Si el área de la superficie del cuerpo es $100 cm^2$ ¿Cuál es su irradiancia (flujo radiante total incidente)?

d) Si el cuerpo se encuentra en equilibrio térmico y sólo puede intercambiar energía por emisión y absorción de energía radiante, ¿cuál será la emitancia (poder emisivo) de su superficie?

e) ¿Cuál será la temperatura del cuerpo?

f) ¿Cuál sería la emitancia de un cuerpo negro a la misma temperatura?

Problema 4: Una esfera de radio 250 mm tiene una capa de humo en su superficie (considerar $\varepsilon = 1$). Determinar la potencia radiada si su temperatura superficial es: a) 300 K y b) 1500 K .

Problema 5: El radio del Sol es de $7 \cdot 10^8\text{ m}$ y el radio medio de la órbita terrestre es $1,5 \cdot 10^{11}\text{ m}$. Tratando al Sol como un cuerpo negro a una temperatura de 6000 K , estimar la intensidad total de la radiación solar incidente sobre la Tierra.

Problema 6: La potencia emitida por un cuerpo negro en forma de radiación infrarroja es de 400 W . La máxima radiación ocurre para $\lambda = 1000\text{ nm}$

a) Determinar la temperatura del objeto.

b) Suponiendo que la temperatura aumenta al doble de su valor original, determinar la longitud de onda del máximo de emisión y la nueva potencia radiada.

c) ¿Por qué los objetos a temperaturas ambiente no se ven incandescentes?

Problema 7: Calcular la pérdida neta de energía radiante de una persona desnuda en una habitación a $20\text{ }^\circ\text{C}$. Suponiendo que la persona se comporta como un cuerpo negro, con una superficie de área igual a $1,4\text{ m}^2$ y temperatura superficial de $33\text{ }^\circ\text{C}$ (la temperatura superficial es menor a la temperatura interna debido a la resistencia térmica de la piel).

Problema 8: La radiación emitida por la superficie del Sol presenta su máximo en una longitud de onda de 500 nm . Suponiendo que el Sol se comporta como un cuerpo negro, estimar la temperatura de su superficie.

Problema 9: Los radiadores de calefacción de una estufa eléctrica de 1 kW se encuentran al rojo vivo a una temperatura de $900\text{ }^\circ\text{C}$. Suponiendo que el 100% del calor emitido es debido a la radiación, y que los radiadores actúan como cuerpos negros, ¿cuál es el área efectiva de la superficie radiante? Considerar que la temperatura ambiente es de $20\text{ }^\circ\text{C}$.

Problema 10: La temperatura superficial del filamento de una lámpara incandescente es de $1300\text{ }^\circ\text{C}$. ¿Cuál será su temperatura si se duplica la potencia eléctrica suministrada? Sugerencia: mostrar que puede despreciarse la temperatura del medio exterior.

Problema 11: Mediciones de la longitud de onda a la cual la emitancia espectral es máxima para una estrella indican que la superficie de la esfera está a 3000 K . Si además se sabe que la potencia radiada es 100 veces mayor a la del sol. ¿Cuál es el tamaño de la estrella? Datos: $T_{SOL} = 5800\text{ K}$, $r_{SOL} = 6,96 \cdot 10^8\text{ m}$.

Problema 12: Una lámpara incandescente de 100 W tiene un filamento cilíndrico de tungsteno de 30 cm de longitud, $0,4\text{ mm}$ de diámetro y emisividad $0,26$.

- ¿Cuál es la temperatura del filamento?
- ¿Para qué longitud de onda es máxima la emitancia espectral de radiación de la lámpara?
- Las lámparas incandescentes no son fuentes eficientes de luz visible. ¿Por qué? Justifique.

Problema 13: a) Si ves una estrella roja, podrías asegurar que su intensidad máxima está en la región del infrarrojo. ¿Por qué?

b) Si ves una estrella "violeta", puedes estar seguro de que su intensidad máxima está en el ultravioleta. ¿Por qué?

c) Las estrellas "verdes" no se ven verdes, sino blancas. ¿Por qué? Sugerencia: observe la curva de radiación de un cuerpo negro.

Problema 14: Se analiza luz procedente de un cuerpo negro ideal, esférico de 15 cm de diámetro, mediante una red de difracción de 3.850 líneas/cm . Cuando se hace pasar a través de una red la luz que emite, se observa que la longitud de onda de máxima intensidad forma una franja brillante de primer orden a $61,6^\circ$ con respecto a la franja brillante central. ¿Cuál es la temperatura del cuerpo negro?

CAPÍTULO 3

Efecto fotoeléctrico

Introducción

Los fenómenos luminosos maravillaron a la humanidad desde los tiempos más remotos. La sucesión de los días y las noches, el sol, la luna, las estrellas, el fuego, los rayos en las tormentas, siempre fueron fuente de inspiración y de temor, al punto tal que los antiguos egipcios convirtieron al Sol (Ra) en su máxima divinidad.

Con la evolución de las civilizaciones, los conocimientos se fueron profundizando. Las culturas más antiguas entendieron que el sol tenía fuerte influencia en las cosechas y para ello diseñaron observatorios astronómicos para estudiar la posición del sol y las estaciones del año. También comprendieron que las estrellas eran una buena referencia para orientarse en los viajes nocturnos y que el fuego era fundamental en la cocción de los alimentos y en proveer calor en el invierno.

Sin embargo, pasaron siglos, milenios y la humanidad nunca había podido responder a una pregunta tan simple como extraordinariamente complicada: *¿QUÉ ES LA LUZ?*

Probablemente esta pregunta ni siquiera había sido formulada hasta que la evolución de las ideas tuvo un impulso decisivo luego del Renacimiento. Galileo (1564-1642) fracasó en su intento de medir su velocidad emitiendo luz y tratando de detectar el destello entre dos colinas ubicadas al sur y al norte de la ciudad de Florencia, Italia. Fue el genio de Isaac Newton (1642-1727) el que por primera vez dio una respuesta a la inquietante pregunta. Encerrado en su granja de Woolsthorpe, Inglaterra, refugiado después del incendio de 1666 que azotó Londres y la epidemia que sobrevino luego, realizó experimentos decisivos para el conocimiento de la naturaleza de la luz. Allí descubrió el espectro de colores que se forma cuando luz blanca pasa a través de un prisma, diseñó un telescopio, observó con detalle las sombras de distintos objetos, etc. Luego publicó sus trabajos en su libro *Opticks* donde además formula su teoría que la luz está compuesta por corpúsculos muy pequeños que se propagan en línea recta y se mueven a una velocidad muy grande (que no logró medir).

Simultáneamente había otras ideas...el científico holandés Christian Huygens (1629-1695) estaba convencido que la luz no estaba constituida por partículas, sino que era un fenómeno ondulatorio. Formuló el principio que lleva su nombre para explicar la propagación en el espacio y demostrar la reflexión y la refracción de la luz.

El peso científico de Newton resultó excluyente y sus teorías se impusieron a lo largo del Siglo XVIII.

Sin embargo, en 1801 sucedió un acontecimiento que cambiaría radicalmente el enfoque sobre la naturaleza de la luz. El médico británico Thomas Young (1773-1829) realizó un experimento seminal, iluminó una doble rendija y observó en una pantalla franjas brillantes y oscuras. Esta interferencia luminosa es típica de un fenómeno con propiedades ondulatorias y no corpusculares.

Los trabajos teóricos y experimentales del francés Augustin-Jean Fresnel (1788-1827) y del alemán Joseph Fraunhofer (1787-1826) contribuyeron a reforzar la teoría ondulatoria. Finalmente, el escocés James Clerk Maxwell (1831-1879) cerró la discusión al establecer y demostrar, a través de sus célebres ecuaciones, la naturaleza de la luz como la propagación de ondas electromagnéticas.

Sin embargo, la historia de la luz no terminaría allí....

El alemán Heinrich Hertz (1857-1894) fue quien logró producir y detectar por primera vez ondas electromagnéticas en un laboratorio en 1885. Trabajando en su experimento, observó accidentalmente que la descarga eléctrica en un tubo aumentaba si éste era iluminado por luz ultravioleta. Los alemanes Wilhelm Hallwachs (1859-1922) y Philipp Lenard (1862-1947) realizaron y analizaron el experimento con mayor detalle y precisión en los años siguientes, pero no lograron dar una explicación consistente a este fenómeno con las teorías conocidas en su época.

Hubo que esperar 20 años y una revolución en la Física para comprender lo que estaba sucediendo. El descubrimiento del electrón en 1897 debido al inglés Joseph J. Thomson (1856-1940) y la formulación de las hipótesis de la Mecánica Cuántica en 1900 por parte del alemán Max Planck (1858-1947) permitieron en 1905 al científico alemán, Albert Einstein (1879-1955), encontrar las ecuaciones y las leyes que rigen el experimento de Hertz/Hallwachs/Lenard.

Para ello formuló una hipótesis muy audaz.... “olvidó” las evidencias ondulatorias y volvió a las ideas corpusculares de Newton sobre la luz, contradiciendo a los físicos más renombrados de su época. Propuso la existencia de partículas luminosas (cuantos), las que posteriormente fueron llamadas “**fotones**”, y con ellas estableció sin fisuras la teoría sobre el **Efecto Fotoeléctrico**, del cual nos ocuparemos a continuación.

Efecto Fotoeléctrico: esquema experimental

Luego que se conociera el experimento de Hertz, y al no poder explicar satisfactoriamente sus observaciones con la teoría electromagnética de Maxwell recientemente desarrollada, la comunidad científica comenzó a sospechar que se había cometido algún error experimental o, peor aún, que la teoría presentaba alguna inconsistencia que la hacía incompleta para comprender el fenómeno de la circulación de corriente en el circuito de Hertz al iluminar uno de los electrodos de un tubo al vacío con radiación luminosa ultravioleta.

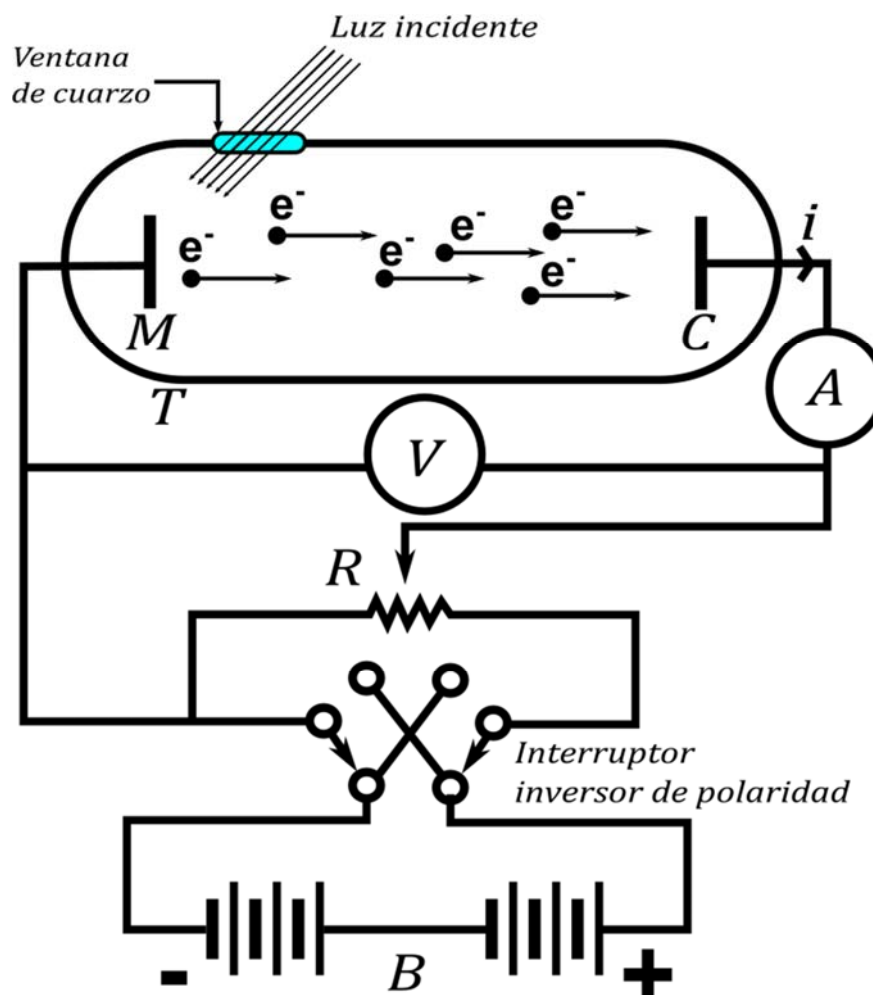
Un discípulo de Hertz, Wilhelm Hallwachs se propuso reproducir el experimento y trabajó con sumo cuidado durante varios años ajustando una a una todas las variables para descartar

cualquier error experimental. En forma independiente, otro de sus colaboradores, Philipp Lenard reprodujo a su vez el experimento.

A continuación discutiremos en detalle estos trabajos.

La Fig. 3.1 muestra el esquema experimental utilizado por Hallwachs. Un tubo de vidrio (T) donde se ha hecho vacío, contiene dos electrodos (M y C). Los mismos se conectan a una batería (B) a través de una resistencia variable (R). En la batería se puede variar la tensión en forma continua e incluso es posible intercambiar su polaridad. El tubo T contiene una ventana de cuarzo que permite iluminar uno de los electrodos con radiación ultravioleta (UV) proveniente de una fuente externa (S) cuya intensidad (I) y frecuencia (ν) se pueden variar. Un voltímetro (V) y un amperímetro (A) son los instrumentos empleados para medir la diferencia de potencial entre los electrodos y la corriente en el circuito respectivamente.

Figura 3.1



Nota. Esquema experimental de Hallwachs para el estudio del efecto fotoeléctrico

Resultados experimentales obtenidos por Hallwachs

Se conecta el electrodo M al borne negativo de la batería y el electrodo C al borne positivo. La tensión en la batería se fija en 10 V . El amperímetro A marca cero, lo cual indica que no hay corriente en el circuito.

Cuando se enciende la lámpara externa (S) iluminando el electrodo M con luz ultravioleta ($\lambda < 400\text{ nm}$), el amperímetro (A) marcará un valor distinto de cero, indicando que hay una corriente (i) en el circuito. Si se ilumina con luz visible ($400\text{ nm} < \lambda < 700\text{ nm}$), el amperímetro no registra corriente. Por lo tanto, es evidente que el fenómeno depende de la frecuencia ν de la luz incidente sobre el electrodo (donde $\nu = c/\lambda$, siendo ν la frecuencia, c la velocidad de la luz y λ la longitud de onda).

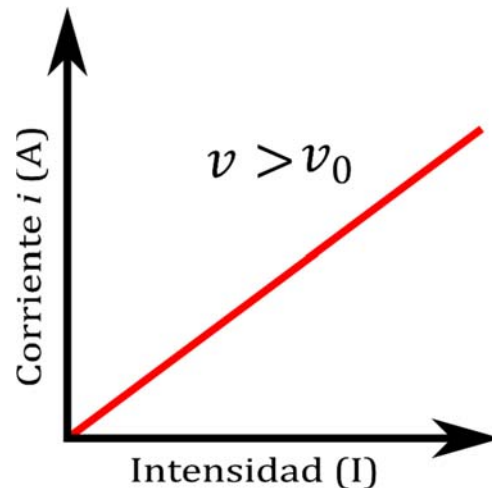
Hallwachs repitió el experimento numerosas veces manteniendo algunas magnitudes constantes y midiendo la variación de las otras. Veremos los resultados que obtuvo

a) Se mantienen la tensión (V) y la frecuencia (ν) de la fuente ultravioleta (S) constantes. Variando la intensidad (I) de la fuente luminosa se mide la corriente (i) en el circuito.

El gráfico con los valores obtenidos se muestra en la Fig. 3.2. La corriente (i) se incrementa en forma lineal a medida que aumenta la intensidad (I) de la fuente. En el origen cuando la intensidad es cero la corriente es nula, como ya se había observado en ausencia de la fuente UV externa.

Si se cambia la frecuencia de la fuente o el material del electrodo M , se obtiene un gráfico similar donde solo varía la pendiente de la recta.

Figura 3.2



Nota. Corriente (i) en el circuito en función de la intensidad (I) de la fuente luminosa ultravioleta.

Como veremos a continuación, esto sucede solo si la frecuencia de la fuente UV (ν) es mayor que una cierta frecuencia umbral (ν_0).

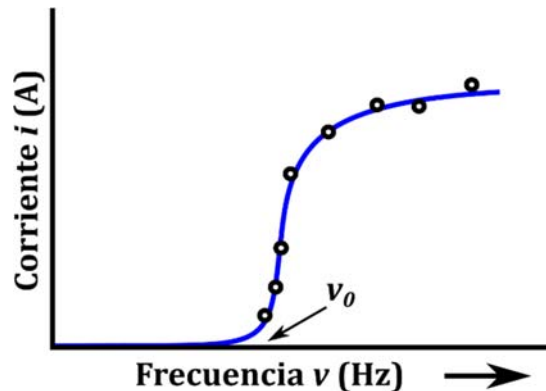
b) Se mantiene la tensión en la batería constante en 10 V y la intensidad (I) de la fuente luminosa también constante.

Variando la frecuencia (ν) de la luz ultravioleta se mide la corriente (i) en el circuito.

El gráfico con los valores obtenidos se muestra en la Fig. 3.3.

Se observa que la corriente (i) medida en el amperímetro es distinta de cero a partir de una cierta frecuencia umbral (ν_0). La corriente en el circuito se establece en forma inmediata cuando la frecuencia de la luz incidente supera el umbral (ν_0). Para valores mayores a esa frecuencia, circula corriente en el circuito y ésta se mantiene prácticamente constante cuando la frecuencia aumenta. Para todos los materiales con que se pueden construir los electrodos siempre existe un valor umbral de la frecuencia (ν_{0A}), (ν_{0B}), etc. por debajo de la cual no se detecta corriente en el circuito.

Figura 3.3



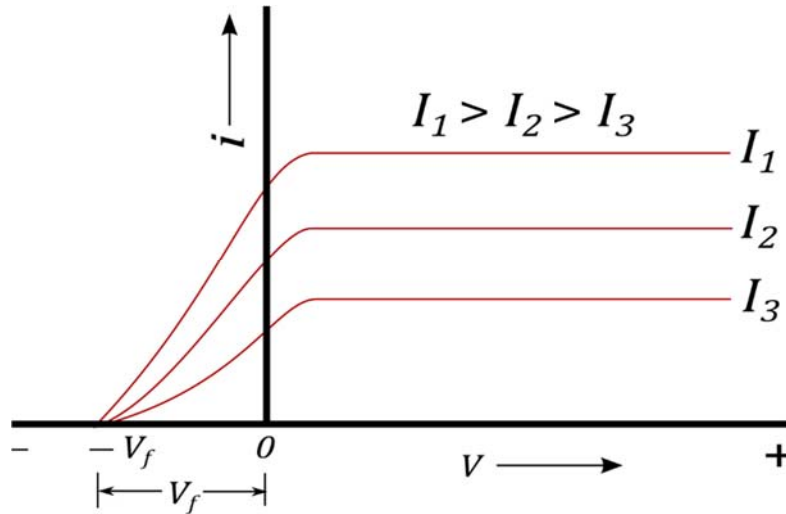
Nota. Corriente (i) en el circuito en función de la frecuencia (ν) de la fuente luminosa ultravioleta.

c) Se mantienen constantes los parámetros que caracterizan la fuente luminosa ultravioleta: la intensidad (I) y la frecuencia (ν).

Variando la tensión de la batería en forma continua para valores de V positivos y negativos (cambiando su polaridad), se mide la corriente (i) en el circuito.

El gráfico con los valores de la corriente (i) obtenidos en función de la tensión aplicada se muestra en la Fig. 3.4. Existe un valor límite V_f para el cual la corriente es cero. A V_f se lo denomina “potencial de frenado”, es decir ese potencial negativo impide la circulación de corriente en el circuito.

Figura 3.4



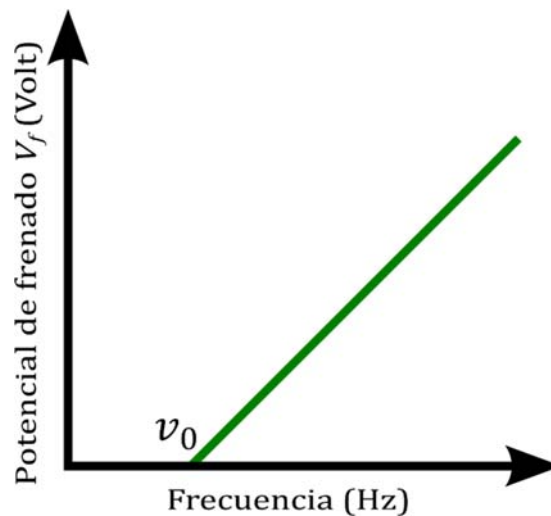
Nota. Corriente (i) en el circuito en función de la tensión (V) aplicada.

d) En la misma Fig. 3.4 se muestran los gráficos para tres valores diferentes de la intensidad (I) luminosa de la fuente UV, manteniendo su frecuencia (ν) constante. Si bien la corriente aumenta en función de intensidades cada vez mayores, el valor del potencial de frenado es el mismo para todos los casos ($V_f = \text{constante}$)

e) Se repite la experiencia variando en forma continua la frecuencia (ν) de la fuente UV y se estudian los potenciales de frenado (V_f) correspondientes.

La Fig. 3.5 muestra que el potencial de frenado aumenta en función de la frecuencia, pero por debajo de la frecuencia umbral (ν_0) (encontrada en el caso b), el potencial de frenado es cero.

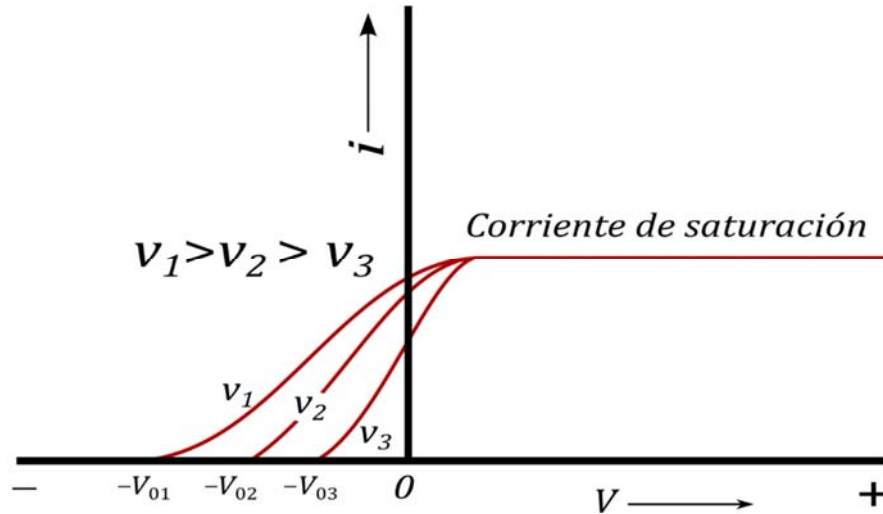
Figura 3.5



Nota. Potencial de frenado (V_f) en función de la frecuencia (ν) de la fuente luminosa ultravioleta.

La Fig. 3.6 muestra el valor de la corriente en el circuito y los potenciales de frenado para tres frecuencias diferentes de la fuente UV. Para mayores frecuencias, es necesario incrementar el potencial de frenado para detener la corriente en el circuito.

Figura 3.6



Nota. Corriente (i) en el circuito en función de diferentes potenciales de frenado (V_f).

En todos los experimentos descritos anteriormente se observó que la corriente en el circuito se establece en forma prácticamente instantánea, sin un retraso dependiente de las magnitudes (I) y (ν) de la fuente luminosa o de las variaciones de la tensión de la batería. Tampoco se registran retrasos apreciables cuando se prueban con electrodos de distintos materiales.

Además de los trabajos de Hallwachs, contribuciones decisivas para la interpretación del efecto fotoeléctrico fueron realizadas por J. J. Thompson y P. Lenard.

Thompson descubrió el electrón en 1897, pudiendo establecer la relación entre su masa y su carga. También demostró que estas cargas negativas elementales emitidas por el electrodo M , eran las responsables de la corriente en el circuito. Lenard en 1902 pudo calcular la velocidad con que se movían estos electrones y con ello su Energía cinética. Asimismo, observó que la energía cinética máxima no depende de la intensidad de la fuente UV y que aumenta con su frecuencia.

$$E_{c_{max}} = \frac{1}{2} m_e v^2 = e V_f \quad (3.1)$$

donde $E_{c_{max}}$ es la Energía cinética máxima del electrón, m_e es la masa del electrón, v su velocidad, e es la carga del electrón y V_f el potencial de frenado. Es decir, cuando la energía potencial (eV_f) de frenado provisto por la batería es igual a la $E_{c_{max}}$ de los electrones, impide que éstos lleguen al electrodo C y se establezca la corriente en el circuito.

Dificultades para la explicación del Efecto Fotoeléctrico con la teoría electromagnética clásica de Maxwell

Teniendo en cuenta el éxito de las ecuaciones de Maxwell, publicadas en 1865, para comprender todos los fenómenos electromagnéticos conocidos hasta esa época, los científicos intentaron abordar el estudio del efecto fotoeléctrico utilizando esta teoría. Consideraron la luz incidente como una onda electromagnética de intensidad y frecuencia conocidas y que la energía que transportaba era transferida a los electrones que constituían el material del electrodo.

Sin embargo, pronto concluyeron que existían dificultades insalvables que impedían este tratamiento de la Física Clásica de Maxwell para explicar los resultados obtenidos en el experimento del efecto fotoeléctrico.

Veamos por qué:

- Una onda electromagnética está constituida por campos eléctricos y magnéticos oscilantes que se propagan a través del vacío o de un medio determinado. Su intensidad se obtiene calculando el promedio del vector de Poynting y mide la energía promedio por unidad de tiempo y unidad de área. Se demuestra que la intensidad es proporcional al cuadrado del campo eléctrico.

$$\vec{S} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B} \quad (3.2)$$

$$I = \langle \vec{S} \rangle = \frac{c \epsilon_0}{2} E_0^2 \quad (3.3)$$

donde \vec{S} es el vector de Poynting, \vec{E} campo eléctrico, \vec{B} campo magnético, μ_0 la permeabilidad magnética del vacío, I la intensidad de la onda electromagnética, c la velocidad de la luz en el vacío, ϵ_0 la constante dieléctrica del vacío, E_0 la amplitud del campo eléctrico.

Por lo tanto, si aumenta la intensidad (y en consecuencia la energía) de la luz incidente, su campo Eléctrico también aumenta. Si esa energía se transfiere a los electrones, éstos serán eyectados del electrodo con una energía cinética proporcional a la energía (intensidad) incidente.

Asimismo, la fuerza sobre los electrones es $F = e E$, donde e es la carga del electrón y E el campo eléctrico de la onda incidente. La fuerza que permite “arrancar” a los electrones del material será mayor si el campo E aumenta.

Esta previsión de la teoría no se verifica experimentalmente, ya que como se observa en la Fig. 3.4 y se deduce de la Ec. (3.1), el potencial de frenado es independiente de la intensidad de la onda UV incidente sobre el electrodo. Esto se ha medido con posterioridad en un amplísimo rango de intensidades con similares resultados.

- De acuerdo al razonamiento desarrollado en el párrafo anterior, la energía cinética de los fotoelectrones dependería solo de la intensidad de la onda incidente y no de su frecuencia. Sin embargo, como se observa en la Fig. 3.6, el potencial de frenado y por lo tanto la energía dependen de la frecuencia UV incidente. Es decir, cuanto mayor es la frecuencia, mayor es la energía cinética de los electrones y por lo tanto será necesario un potencial mayor para frenarlos.

- De acuerdo a la teoría clásica de Maxwell debería haber un cierto lapso para que el electrón absorba la energía proveniente de la onda luminosa incidente y luego ser eyectado del electrodo. Si la intensidad fuese muy débil, el tiempo de retardo para la emisión sería mayor, pero siempre se produciría esperando el tiempo suficiente.

Sin embargo, tampoco esa previsión de la teoría se verifica experimentalmente en el caso del efecto fotoeléctrico. La emisión de los electrones siempre se produce en forma casi instantánea (tiempos $\sim 10^{-9}$ segundos) independientemente de la intensidad incidente y solo si la frecuencia es mayor que la frecuencia umbral.

Teoría Cuántica de la Luz (Einstein, 1905)

El desconcertante desafío planteado por el efecto fotoeléctrico dejó perplejos a los científicos que encontraron fisuras en la bien establecida teoría electromagnética de la luz debida a Maxwell. En 1905, un joven físico alemán, radicado en Suiza, desconocido y de solo 26 años llamado Albert Einstein fue quien resolvió el acertijo.

Einstein descartó la teoría de Maxwell y dio un enfoque completamente novedoso al tratamiento del efecto fotoeléctrico basado en las recientes ideas de la Mecánica Cuántica desarrolladas por Planck en 1900.

Planck planteó la cuantización de la energía del electrón oscilante en las paredes de una cavidad para explicar la radiación del cuerpo negro y de los sólidos incandescentes. Sin embargo, no analizó la energía fuera de la cavidad, considerando que una vez irradiada ésta se propagaba en el espacio en una onda electromagnética según el modelo de Maxwell. Einstein sí estudió la energía radiante y propuso que también ésta estaba cuantizada en pequeños “paquetes” concentrados que fueron llamados *fotoes*. Luego hizo un análisis detallado de la interacción entre la luz y la materia.

La propuesta de Einstein fue exitosa en la interpretación del efecto fotoeléctrico, pero planteaba una seria contradicción con los bien conocidos fenómenos de interferencia y difracción debidos a la naturaleza ondulatoria de la luz. La controversia fue superada algunos años después por el físico francés Louis de Broglie (1892-1987) introduciendo la hipótesis de la dualidad onda-partícula, que será estudiada en los capítulos siguientes.

Veamos la generalización de Einstein a la teoría de Planck incluyendo la hipótesis de cuantización de la energía radiada y como a través de ella logró una explicación satisfactoria del efecto fotoeléctrico.

Propuesta de Einstein:

- La luz está formada por partículas (fotoes), que no tienen masa en reposo ($m_0 = 0$), se mueven a una velocidad constante c (en el vacío es de $\cong 3 \cdot 10^8$ m/s), cuya energía depende de la frecuencia y está cuantizada de acuerdo a la expresión:

$$E = h \nu \quad (3.4)$$

donde E es la energía del fotón, h es la constante de Planck ($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Joule · segundo) y ν la frecuencia.

- Cuando un fotón incide sobre una superficie entrega instantáneamente toda su energía a un solo electrón y es absorbido por el material.

- El electrón se mantiene ligado al material con una energía característica propia denominada “función trabajo” ϕ . Esta energía es la mínima necesaria para que el electrón venza las fuerzas atractivas y pueda escapar del material. Por lo tanto, si recibe una energía igual a ϕ , el electrón quedará libre.

- Si el electrón recibe una energía mayor a ϕ , ese exceso de energía constituirá la energía cinética con la cual se moverá el electrón.

En el caso del experimento de Hertz/Hallwachs, si la energía del fotón UV incidente sobre el electrodo negativo M es menor que la función trabajo ϕ del material del electrodo, el electrón continuará ligado. Si la energía incidente es igual a ϕ , el electrón quedará libre abandonando la superficie del electrodo. Finalmente, si es mayor a ϕ , parte de la energía incidente se emplea en vencer la energía de ligadura y el resto en proporcionar energía cinética al electrón que se moverá hacia el electrodo positivo C y luego viajará por el circuito estableciendo la corriente (i).

Como se deduce de la Ec. (3.4), la función trabajo se puede expresar como:

$$\phi = h \nu_0 \quad (3.5)$$

siendo ν_0 la frecuencia umbral de la radiación incidente para la cual el electrón queda libre.

Con las consideraciones anteriores, se puede escribir la *Ecuación de Einstein para el efecto fotoeléctrico*:

$$h \nu = \phi + E_{c_{max}} = h \nu_0 + E_{c_{max}} \quad (3.6)$$

Es decir, la energía del fotón incidente ($h \nu$) que se transfiere instantáneamente al electrón, es igual a la suma de la función trabajo ($\phi = h \nu_0$) más la energía cinética máxima que adquiere el electrón ($E_{c_{max}}$). Básicamente, es una *ley de conservación de la energía*.

Esta sencilla ecuación resume todos los resultados obtenidos experimentalmente en el efecto fotoeléctrico. La energía de los fotoelectrones no depende de la intensidad, pero sí de la frecuencia de la luz ultravioleta incidente y de la función trabajo del material. Por lo tanto, es proporcional a una frecuencia umbral con energía suficiente para liberar los electrones. Esto explica los gráficos de la Fig. 3.3. La energía de frenado (eV_f) detiene a los electrones haciendo su Energía cinética igual a cero impidiendo el paso de la corriente por el circuito como lo muestra las Figs. 3.4, 3.5 y 3.6.

En la Tabla 1 se muestran la función trabajo, longitud de onda y frecuencia umbral para distintos materiales.

Tabla 3.1
Parámetros efecto fotoeléctrico para distintos materiales

Elemento	Función trabajo Φ		Longitud de onda umbral λ_0	Frecuencia umbral (ν_0)
	(eV)	(Joule)		
Plata (Ag)	4,73	$7,58 \cdot 10^{-19}$	262	$1,14 \cdot 10^{15}$
Aluminio (Al)	4,08	$6,54 \cdot 10^{-19}$	304	$9,87 \cdot 10^{14}$
Oro (Au)	5,10	$8,20 \cdot 10^{-19}$	243	$1,20 \cdot 10^{15}$
Berilio (Be)	4,98	$7,98 \cdot 10^{-19}$	249	$1,20 \cdot 10^{15}$
Carbono (C)	5,00	$8,00 \cdot 10^{-19}$	248	$1,20 \cdot 10^{15}$
Calcio (Ca)	2,87	$4,60 \cdot 10^{-19}$	432	$6,94 \cdot 10^{14}$
Cesio (Cs)	2,14	$3,43 \cdot 10^{-19}$	579	$5,17 \cdot 10^{14}$
Cobre (Cu)	4,70	$7,50 \cdot 10^{-19}$	264	$1,10 \cdot 10^{15}$
Hierro (Fe)	4,81	$7,71 \cdot 10^{-19}$	258	$1,16 \cdot 10^{15}$
Potasio (K)	2,29	$3,67 \cdot 10^{-19}$	541	$5,54 \cdot 10^{14}$
Níquel (Ni)	5,35	$8,57 \cdot 10^{-19}$	232	$1,29 \cdot 10^{15}$
Plomo (Pb)	4,25	$6,81 \cdot 10^{-19}$	292	$1,03 \cdot 10^{15}$
Silicio (Si)	4,85	$7,77 \cdot 10^{-19}$	256	$1,17 \cdot 10^{15}$
Titanio (Ti)	4,33	$6,94 \cdot 10^{-19}$	286	$1,05 \cdot 10^{15}$
Tungsteno (W)	5,22	$8,36 \cdot 10^{-19}$	238	$1,26 \cdot 10^{15}$
Zinc (Zn)	4,30	$6,9 \cdot 10^{-19}$	288	$1,00 \cdot 10^{15}$

Obsérvese que los metales (plata, cobre, hierro, plomo, zinc, etc.) con los que Hertz y Hallwachs hicieron sus experimentos tienen la longitud de onda y la frecuencia umbral en la región ultravioleta del espectro. Sin embargo, otros materiales (cesio, potasio) tienen su longitud de onda y frecuencia umbral en la región visible.

NOTA: equivalencia entre unidades energía (función trabajo): 1 electronvolt = $1,602 \cdot 10^{-19}$ joule.

Por otro lado, para frecuencias mayores que la frecuencia umbral, podemos calcular la relación existente entre la corriente en el circuito i y la intensidad I de la luz UV incidente.

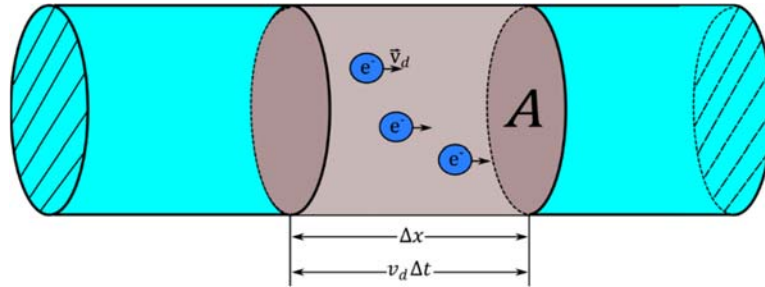
La Fig. 3.7 muestra un segmento del cable conductor de sección A y longitud Δx , que forma parte del circuito de Hallwachs. Supongamos que los electrones se mueven con una velocidad de desplazamiento v_d y n es el número de electrones con carga e presentes en ese segmento.

En consecuencia, la corriente promedio que circula por el cable es:

$$\langle i \rangle = \frac{\Delta Q}{\Delta t} = \frac{n A (v_d \Delta t) e^-}{\Delta t} = A n v_d e^- \quad (3.7)$$

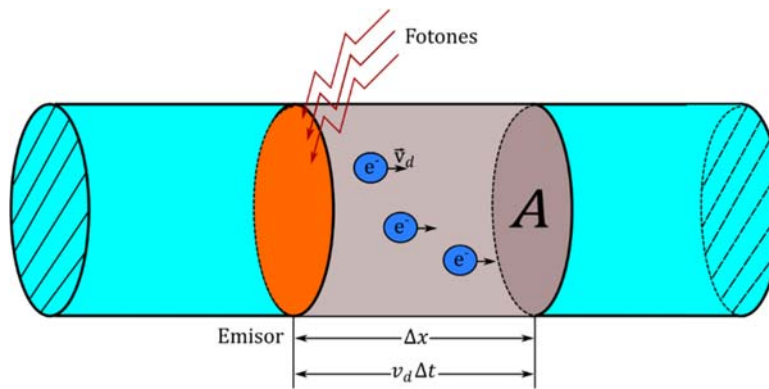
El caso de los fotoelectrones se muestra en la Fig. 3.8,

Figura 3.7



Nota. Segmento de cable del circuito de Hallwachs

Figura 3.8



Nota. Segmento de cable del circuito de Hallwachs iluminado por luz ultravioleta

La intensidad de la luz incidente sobre el electrodo (energía / área × tiempo) es proporcional al número N de fotones UV incidentes, cuya expresión es:

$$I = \frac{N h \nu}{A \Delta t} \quad (3.8)$$

siendo h la constante de Planck y (ν) la frecuencia.

Como en el modelo de Einstein cada fotón entrega su energía a un solo electrón, el número N de fotones incidentes es igual al número n de fotoelectrones emitidos. En consecuencia, la corriente que circula por el circuito es proporcional a la intensidad del haz luminoso incidente, de acuerdo a la siguiente expresión:

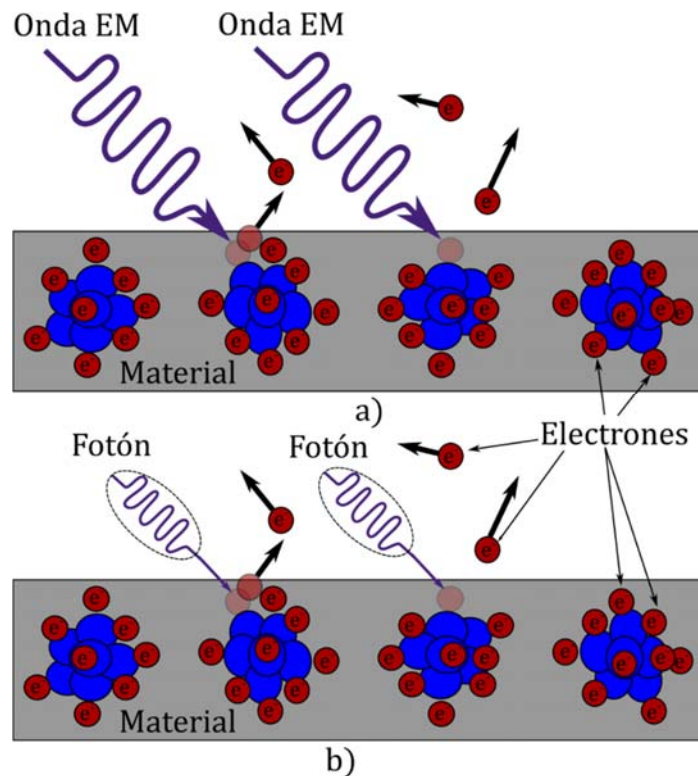
$$\langle i_p \rangle = \frac{\Delta Q}{\Delta t} = \frac{N e^-}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \frac{A I \Delta t e^-}{h \nu} = A \frac{I}{h \nu} e^- \quad (3.9)$$

Es decir, cuanto mayor es la intensidad incidente I , mayor es el número de fotones que impactan en el electrodo. En consecuencia, será mayor el número de fotoelectrones que constituyen los portadores de carga en el circuito y por lo tanto mayor la corriente promedio $\langle i_p \rangle$ como se muestra en la Fig. 3.2. Idéntica conclusión se puede inferir de la Fig. 3.4, donde la corriente aumenta si aumenta la intensidad, pero el potencial de frenado se mantiene en el mismo valor ya que la energía cinética de los fotoelectrones depende de la frecuencia del haz incidente y de la función trabajo del material.

Finalmente, el modelo de Einstein que afirma que la interacción fotón/electrón es uno a uno explica por qué la corriente se establece inmediatamente sin tiempos de retardo. Es decir, cada fotón que impacta en el material entrega toda su energía a un electrón eyectándolo de la superficie.

La Fig. 3.9 a) muestra la interpretación del efecto fotoeléctrico según la teoría clásica de Maxwell suponiendo que el haz de luz incidente sobre el material es una onda electromagnética (EM). La Fig. 3.9 b) muestra la interpretación del efecto fotoeléctrico según la teoría cuántica de Einstein suponiendo que el haz incidente son cuantos de luz (fotones).

Figura 3.9



Nota. a) interpretación del efecto fotoeléctrico según la teoría clásica de Maxwell. b) interpretación del efecto fotoeléctrico según el modelo de Einstein.

Consecuencias de la cuantización de la luz

Einstein publicó su trabajo sobre el efecto fotoeléctrico en 1905 en un artículo en idioma alemán titulado "Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt" ("Un punto de vista heurístico sobre la generación y transformación de la luz") en la revista *Annalen der Physik*, 17(6): 132–148. (1905).

Según sus propias afirmaciones:

en la propagación de un haz luminoso la energía no está distribuida en forma continua en todo el frente de una onda electromagnética, sino que consiste en un número finito de cuantos de energía localizados en puntos del espacio, que se mueven sin dividirse y pueden ser absorbidos o generados como una única entidad. (Einstein, 1905, p.132)

Su propuesta no fue aceptada inmediatamente y por el contrario fue muy discutida por los círculos científicos de la época. Al igual que 200 años antes, en que la teoría ondulatoria de la luz debida a Huygens quedó opacada por la teoría corpuscular de Newton, el concepto de fotón y la cuantización de la luz de Einstein no eran comprensibles frente a la bien establecida teoría de las ondas electromagnéticas de Maxwell.

Entre los múltiples intentos de revisión del efecto fotoeléctrico, sobresale el del físico estadounidense Robert Millikan (1868-1953) que realizó un extenso estudio que publicó en 1915. Éste intentó infructuosamente refutar la propuesta de Einstein. Sin embargo, a partir de su propia verificación experimental, se vio forzado a admitir su validez aun cuando la consideraba poco razonable ya que parecía violar todo lo que se sabía acerca de la luz.

Además, con su trabajo, Millikan logró una determinación precisa de la constante h . Éste también es un aporte fundamental ya que confirmaba las hipótesis de Planck de 1900 y el nacimiento de la nueva Física Cuántica. En la siguiente Sección discutimos la medida de la constante h utilizando el efecto fotoeléctrico.

La teoría de Einstein sobre la cuantización de la luz no solo fue exitosa en la interpretación del efecto fotoeléctrico, sino que dio lugar a innumerables investigaciones y a múltiples aplicaciones que llegan a nuestros días y que comentaremos brevemente en la sección siguiente. Por ejemplo, en 1923 trabajando en forma independiente el físico estadounidense Arthur Compton (1892-1962) y el holandés Peter Debye (1884-1966) pudieron explicar la dispersión de Rayos X por una lámina de grafito al considerar la conservación de la energía y la cantidad de movimiento en un choque elástico entre un fotón incidente y un electrón del material. Trabajos posteriores demostraron que el retraso en la emisión de los fotoelectrones es menor que $3 \cdot 10^{-9}$ seg., es decir un tiempo prácticamente despreciable que confirma la observación de la circulación de corriente instantáneamente cuando se ilumina el electrodo.

El concepto de fotón se ha generalizado a todo el espectro electromagnético. Es válido decir fotones de rayos γ , rayos X, microondas, etc. Por ejemplo, para una longitud de onda típica de la región de microondas. $\lambda = 10$ cm, los fotones tienen una energía del orden de 10^{-5} eV.

El efecto fotoeléctrico constituye un ejemplo excepcional sobre la evolución de las ideas científicas y la complejidad de la naturaleza que intentan explicar. El trabajo de Hertz con la obtención experimental en un laboratorio de ondas electromagnéticas fue la confirmación de las predicciones de Maxwell que permitió establecer una teoría sólida del Electromagnetismo. Junto a las Leyes de Newton de la Mecánica marcan el punto culminante de la Física Clásica que logró sintetizar en pocas ecuaciones todos los conocimientos sobre los fenómenos físicos conocidos hasta la segunda mitad del Siglo XIX.

Sin embargo, el mismo experimento de Hertz y la incompreensión de la observación de corriente en el circuito cuando se iluminaba el electrodo con luz UV, generó nuevas preguntas

que obligaron a buscar respuestas novedosas que dieron lugar a una nueva Física, la Física Cuántica que permitió avanzar hasta límites insospechados en el conocimiento sobre la naturaleza.

Y el camino continúa... A su vez, el modelo de partículas (fotones) de Einstein del efecto fotoeléctrico y la contradicción con la teoría electromagnética (ondulatoria) de Maxwell plantearon nuevos desafíos para responder la pregunta inicial, *¿Que es la LUZ?* Louis de Broglie introduciendo la hipótesis de la dualidad onda-partícula, pudo finalmente dar una respuesta convincente al problema. Estudiaremos su aporte en los capítulos siguientes.

Aplicaciones

Comentaremos aquí algunos de los experimentos científicos fundamentales y de las múltiples aplicaciones tecnológicas que surgieron a partir del efecto fotoeléctrico y el modelo de Einstein de la cuantización de la luz.

Medida de la constante h de Planck

R. Millikan volvió a reproducir cuidadosamente el experimento del efecto fotoeléctrico y por supuesto halló los mismos resultados que Hallwachs y Lenard. Pero ahora pudo reinterpretar los mismos basándose en el modelo de Einstein.

La Ec. (3.6) de Einstein se puede reescribir:

$$E_{cmax} = h\nu - \Phi \quad (3.10)$$

Y utilizando la Ec. (3.1)

$$e V_f = h\nu - \Phi \quad (3.11)$$

Por lo tanto, la energía de frenado es la diferencia entre la energía del fotón incidente y la función trabajo para desprender los electrones del material como se muestra en la Fig. 3.10.

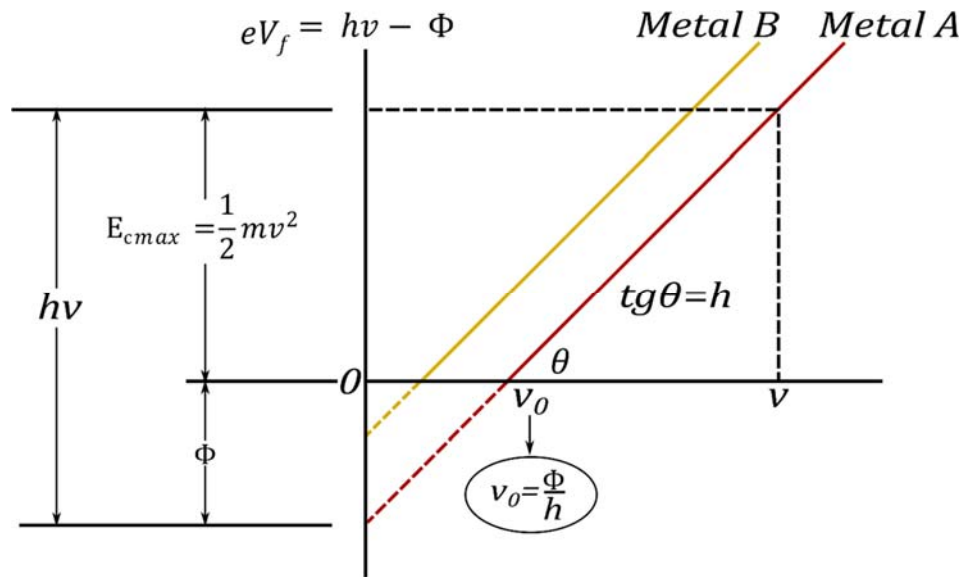
Se ve claramente la relación lineal que existe entre la energía de frenado y la frecuencia de la luz incidente. La Ec. (3.11) es una recta cuya pendiente es h .

Con los datos obtenidos experimentalmente, Millikan pudo calcular, en 1916, el valor de la constante h de Planck con un error menor al 0,5 % respecto a los valores calculados en la actualidad. Un resultado sorprendente que coincidía con el derivado de la fórmula de radiación del cuerpo negro y confirmaba la validez de las hipótesis cuánticas de Planck y Einstein.

Robert Millikan obtuvo el Premio Nobel de Física en 1923 por esta medición experimental de la constante de Planck y por la determinación de la carga del electrón.

Albert Einstein obtuvo el Premio Nobel de Física 1921. Según la Academia Sueca: "por sus aportaciones a la física teórica y, especialmente, por el descubrimiento de la ley del efecto fotoeléctrico"

Figura 3.10



Nota. Medida de la constante de Planck (h) obtenida por Millikan

Aplicaciones tecnológicas

El efecto fotoeléctrico se utiliza en múltiples dispositivos que transforman luz en electricidad y están incorporados extensamente a la vida cotidiana. Por ejemplo, en pantallas digitales de teléfonos y computadoras, en el encendido automático del alumbrado público y viviendas particulares, en cámaras fotográficas para regular tiempos de exposición, como regulador de tóner en fotocopiadoras; en componentes electrónicos como fotodiodos y fototransistores, en detectores de radiación, mecanismos de cierre de ascensores, detectores y alarmas de movimiento, detectores de llama en centrales termoeléctricas, etc.

Paneles solares

Una de las aplicaciones más extensamente difundidas del efecto fotoeléctrico es la construcción de celdas fotovoltaicas. Están compuestas por materiales que absorben fotones de luz y emiten electrones que generan una corriente eléctrica que puede ser utilizada como fuente de energía para abastecer diversos dispositivos eléctricos.

En un mundo preocupado por la preservación del medio ambiente, las celdas fotovoltaicas han alcanzado un inusitado auge en los últimos años por la posibilidad de generar energía "limpia" a partir de la radiación solar. En efecto, los paneles solares son arreglos de celdas dispuestas convenientemente para captar la luz del sol y convertir su energía en electricidad.

Si bien el principio de funcionamiento y la fabricación de celdas fotovoltaicas son conocidos desde hace muchos años, los estudios para mejorar su eficiencia y la estandarización de su

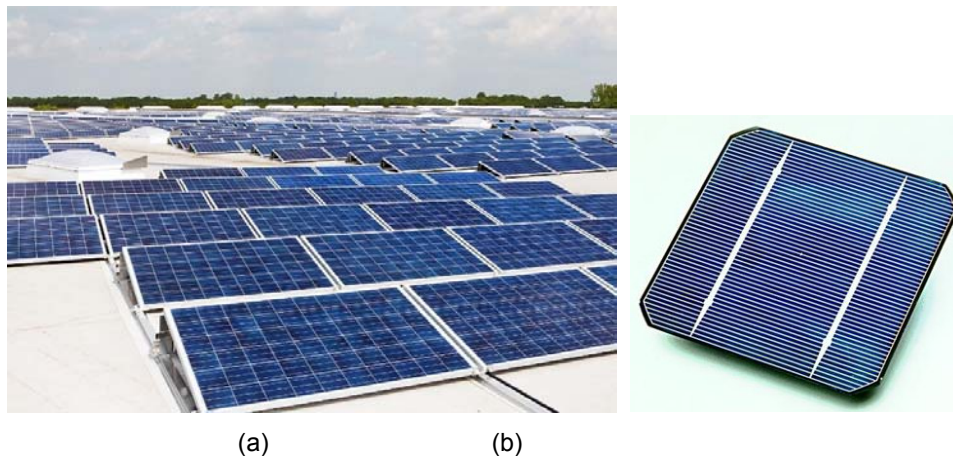
fabricación alcanzaron gran impulso en la década de 1960 con el desarrollo de la tecnología espacial ya que mostraron la factibilidad de proveer energía eléctrica de bajo costo a los satélites en sus viajes interestelares. Esa misma tecnología ahora se emplea para uso hogareño y de pequeñas comunidades.

Aunque la eficiencia de conversión de energía solar a energía eléctrica es relativamente baja (del orden del 20%), se han profundizado significativamente las investigaciones para mejorarla explorando nuevos materiales fotosensibles. Las celdas originales construidas a partir del cobre y sus aleaciones han sido reemplazadas por celdas de silicio monocristalino. Con otros materiales como el arseniuro de galio se han alcanzado eficiencias del 30 % y nuevos materiales experimentales, aún a nivel de laboratorio, pueden superar el 40 %. Estos valores cambian día a día debido al gran interés que ha despertado para la obtención de energía limpia y relativamente barata. Cabe señalar que las variables económicas juegan un rol importante en la producción de celdas y paneles solares. El silicio es uno de los elementos más abundantes en la naturaleza y la tecnología para su manipulación es bien conocida, lo cual abarata los costos de las celdas. En cambio, materiales fotosensibles más eficientes deben ser producidos con costos significativamente más elevados.... por ahora.

Las celdas solares proporcionan corriente continua, pero si es necesario puede convertirse a corriente alterna usando un inversor y se puede aumentar la tensión de operación con un convertidor de potencia.

La Fig. 3.11 muestra a) un panel solar b) una celda de silicio monocristalino.

Figura 3.11



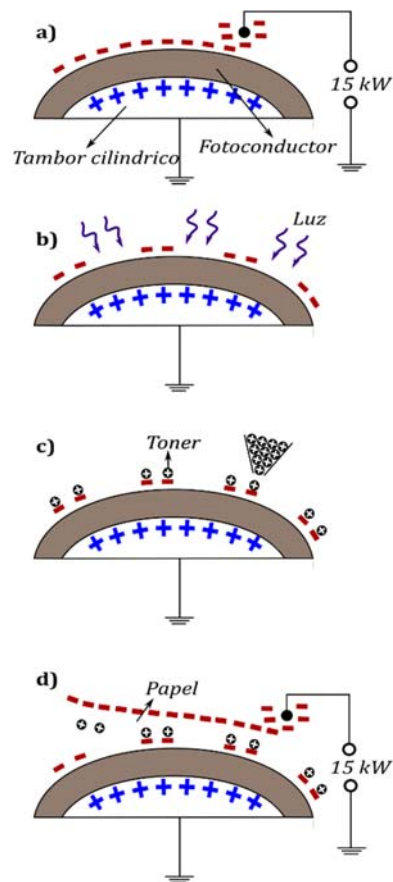
Nota. a) panel solar. Reproducido de *Deutsch: Photovoltaik Dachanlage Hannover - Schwarze Heide - Leistung 1 MW*, 10 July 2012, Autor: AleSpa Creative Commons bajo licencia CC BY-SA 3.0 (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Photovoltaik_Dachanlage_Hannover_-_Schwarze_Heide_-_1_MW.jpg); b) celda de silicio monocristalino. Reproducido de *Solar cell*, Autor: Desconocido, Fuente: United States Department of Energy, 17 August 2005, Creative Commons bajo licencia CC BY-SA 3.0 (https://es.wikipedia.org/wiki/C%C3%A9lula_fotoel%C3%A9ctrica#/media/Archivo:Solar_cell.png)

Fotocopiadora

La fotocopiadora es una máquina para el copiado de textos o imágenes de amplísima difusión en el mundo moderno. Quizás el grupo de usuarios más numeroso sean alumnos y docentes que la emplean masivamente para reproducir apuntes, libros, documentos, etc.

El proceso de impresión en fotocopiadoras más conocido se denomina “xerografía”, inventado en 1932 por Chester Carlson, utiliza cargas electrostáticas y materiales fotoconductores. El esquema de funcionamiento se muestra en la Fig. 3.12. Una superficie de un material fotoconductor se carga uniformemente con electricidad estática (a). Luego la superficie es expuesta a luz que remueve las cargas eléctricas, dejando cargadas solo las zonas más oscuras. (b). Pigmentos de tinta seca (tónér) se fijan en las áreas cargadas remanentes haciendo visible la imagen que se desea imprimir (c). Finalmente, la imagen se transfiere al papel mediante un campo electrostático utilizando calor y presión para fijar la tinta (d).

Figura 3.12



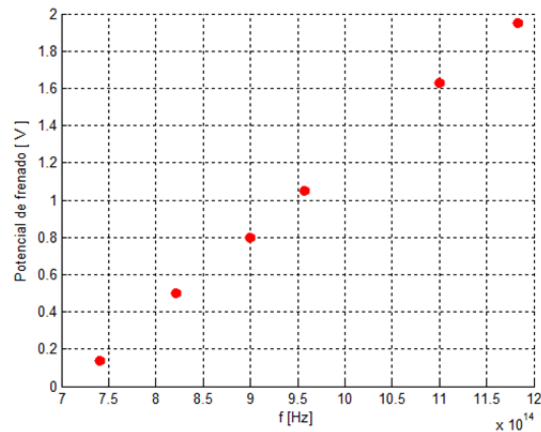
Nota. Esquema de funcionamiento de una fotocopiadora

Carlson hizo fortuna al negociar la patente de invención de la xerografía con una pequeña compañía que comenzó a fabricar y comercializar fotocopiadoras. La empresa se convirtió en un gigante mundial llamado *Xerox Corporation*.

Problemas resueltos

Problema 1: En la gráfica se muestran los potenciales de frenado y correspondientes frecuencias correspondientes a un experimento de efecto fotoeléctrico.

Elemento	Función Trabajo (eV)
Ca	2,9
Al	4,3
Ag	4,3
Cu	4,7
Si	4,8
Au	5,1



a) A partir de estas mediciones representadas gráficamente determine el valor de la constante de Planck y la función trabajo del material.

b) Analizando la tabla de los elementos y sus funciones trabajo, indique de qué material podría estar hecho la superficie emisora de los electrones.

Solución:

a) La gráfica nos brinda las medidas experimentales de los valores del potencial de frenado en función de la frecuencia. Para calcular la constante de Planck h y la función trabajo del material usaremos la ecuación de Einstein:

$$h\nu = \phi + E_{c_{max}} \quad (3-I)$$

ν : frecuencia del fotón

$h\nu$: energía de cada fotón E_f

ϕ : mínima energía de ligadura del electrón en el metal, se la denomina función trabajo y su valor solo depende del metal característico de la superficie.

$E_{c_{max}}$: energía cinética máxima con la que sale expulsado el electrón

Si reemplazamos $E_{c_{max}} = e V_f$ en (3-I) nos queda:

$$h\nu = \phi + eV_f \quad (3-II)$$

$e = 1,6 \cdot 10^{-19} C$ carga del electrón

V_f : potencial de frenado

En la ecuación (3-II) tenemos dos incógnitas que queremos calcular: la constante de Planck h y la función trabajo ϕ . Entonces podemos armar un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas. Para lo cual necesitaremos dos pares ordenados de datos de la gráfica: si bien se pueden elegir arbitrariamente, preferiremos utilizar aquellos puntos que se encuentran en los nodos (o lo más cercano a ellos) del mallado de la gráfica, para disminuir el error de apreciación.

Teniendo en cuenta lo anterior, los datos que elegimos utilizar son: $\nu_1 = 9 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$ con $V_1 = 0,8 \text{ V}$ y $\nu_2 = 11 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$ con $V_2 = 1,63 \text{ V}$. Reemplazando ambos datos en la ecuación (II) obtenemos un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas que deberemos resolver:

$$\begin{cases} h \cdot 9 \cdot 10^{14} \text{ Hz} = \phi + 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 0,8 \text{ V} \\ h \cdot 11 \cdot 10^{14} \text{ Hz} = \phi + 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 1,63 \text{ V} \end{cases}$$

Resolviendo este sistema de ecuaciones obtenemos:

$$h = 6,4 \times 10^{-34} \text{ Js} \text{ y } \phi = 4,7 \times 10^{-19} \text{ Js}$$

b) Habiendo calculado la función trabajo del material ϕ , podemos determinar de qué elemento se trata. En la tabla se disponen algunos materiales con sus energías de ligadura en unidades de eV. Debemos convertir el valor que tenemos de la función trabajo en joules a eV, sabiendo que $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$. De este modo obtenemos $\phi_o = 4,710^{-19} \text{ Js} = 2,93 \text{ eV}$ entonces

El material de la superficie emisora es Calcio

Problema 2: Se ilumina una superficie de material metálico con luz de $\lambda = 300 \text{ nm}$ y de intensidad I en un experimento de efecto fotoeléctrico. Midiendo la corriente con un amperímetro, se observa que el instrumento indica una corriente nula para un valor de potencial de frenado de $1,7 \text{ V}$.

- a) Determinar la función trabajo de la superficie metálica.
- b) Determinar la frecuencia umbral de emisión fotoeléctrica.
- c) Sin aplicar el potencial de frenado, indique si se producirá efecto fotoeléctrico al disminuir la intensidad de la luz a la mitad: $I' = I/2$. Justifique

Solución:

Datos: $\lambda = 300 \text{ nm}$: Longitud de onda de los fotones incidentes

I : Intensidad de la luz incidente

$\Delta V = 1,7 \text{ V}$: Potencial de frenado

La ecuación de Einstein para el efecto fotoeléctrico surge a partir de la aplicación del principio de conservación de la energía:

$$E_f = \phi + E_{c_{max}}$$

$$h\nu = h\nu_0 + E_{c_{max}}$$

donde $E_f = h\nu$ es la energía del fotón incidente; $E_{c_{max}}$ es la energía cinética máxima que adquieren los electrones una vez que fueron extraídos; $\phi = h\nu_0$ es la función trabajo y ν_0 la frecuencia umbral.

a) La función trabajo de la superficie metálica se puede calcular a partir de la ecuación de Einstein:

$$\phi = E - E_{c_{max}}$$

La energía asociada a los fotones incidentes la calculamos a partir de la longitud de onda de los fotones:

$$E = h \frac{c}{\lambda} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{300 \text{ nm}} = 6,626 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 4,14 \text{ eV}$$

La energía cinética máxima que adquieren los electrones la podemos calcular a partir del potencial de frenado:

$$E_{c_{max}} = e\Delta V = 1,7 \text{ eV}$$

Luego podemos obtener la función trabajo:

$$\phi = E - E_{c_{max}} = 4,14 \text{ eV} - 1,7 \text{ eV} = 2,44 \text{ eV}$$

b) La frecuencia umbral (frecuencia mínima que deben tener los fotones incidentes para que se produzca efecto fotoeléctrico) la podemos calcular a partir de la función trabajo, haciendo que la energía cinética de los electrones sea nula:

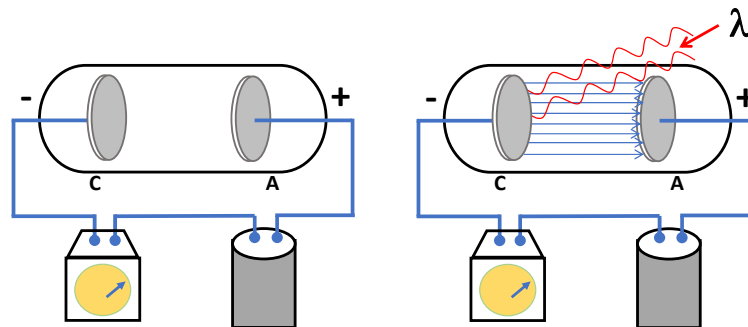
$$E_f = \phi + E_{c_{max}} \Rightarrow E_f = \phi \quad (E_{c_{max}} = 0 \text{ eV})$$

$$\Rightarrow \phi = h\nu_0 = 2,44 \text{ eV} \Rightarrow \nu_0 = 5,89 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

c) Sin aplicar potencial de frenado, el amperímetro mide una corriente de fotoelectrones producidos por efecto fotoeléctrico. Si mantenemos a los fotones incidentes con la misma frecuencia, pero disminuimos la intensidad, seguirá circulando una corriente debido al efecto fotoeléctrico, porque dicho efecto no depende de la intensidad de la radiación sino de la frecuencia de los fotones incidentes.

Para cada metal existe una frecuencia mínima o frecuencia umbral, por debajo de la cual no se produce emisión fotoeléctrica, por más intensa que sea la radiación. La energía cinética de los fotoelectrones es independiente de la intensidad de la luz. Si se produce efecto fotoeléctrico, la energía cinética de los fotoelectrones sólo dependerá de la frecuencia de la radiación incidente, como podemos observar de la ecuación de Einstein: $h\nu = h\nu_0 + E_{c_{max}}$

Problema 3: Dos placas de metal, C y A, están selladas dentro de un tubo de cuarzo en el que se ha hecho el vacío. Las dos placas están conectadas a una fuente continua de tensión eléctrica. En serie con estos elementos hay un amperímetro para medir la intensidad de la corriente eléctrica.



a) Si se hace incidir luz en la placa C, como en la Figura de la derecha, con luz violeta ($\lambda = 400 \text{ nm}$) se emiten electrones con un rango de energías cinéticas. Si el potencial de la placa A

es positivo en relación con la placa C, estos fotoelectrones emitidos se acelerarán hacia la placa A. La corriente eléctrica resultante la indica el amperímetro. Pero si se hace incidir luz verde ($\lambda = 560nm$) no se emiten fotoelectrones, y no se produce el efecto fotoeléctrico.

En base a lo observado experimentalmente, indique de cuál o cuáles de los tres materiales siguientes podrían estar hechas las placas A y C del dispositivo: cesio ($\phi_{Cs} = 2,1 eV$), cobre ($\phi_{Cu} = 4,7 eV$) o potasio ($\phi_K = 2,3 eV$). En el caso que corresponda, indique la velocidad máxima que tendrán los electrones al iluminar con luz violeta, cuando la diferencia de potencial en la fuente sea cero.

b) Si luego la batería se invierte, de modo que la placa A ahora tiende a repeler los fotoelectrones, la diferencia de potencial puede establecerse en un valor lo suficientemente grande hasta lograr que el amperímetro mida que la corriente es cero. Indique en ese caso cual será el valor de voltaje establecido en la fuente. Indique cuál será la frecuencia umbral del material de las placas.

Solución:

a) La energía de un fotón con longitud de onda $\lambda = 400 nm$ es:

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(6,626 \cdot 10^{-34} Js) (3 \cdot 10^8 m/s)}{400 nm} = 4,97 \cdot 10^{-19} J = 3,1 eV$$

y la energía de un fotón con longitud de onda $\lambda = 560 nm$:

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(6,626 \cdot 10^{-34} Js)(3 \cdot 10^8 m/s)}{560 nm} = 3,55 \cdot 10^{-19} J = 2,22 eV$$

Entonces, si las placas A y C del dispositivo son de potasio ($\phi_K = 2,3 eV$) y sobre el cátodo (placa C) inciden fotones de luz violeta ($\lambda = 400 nm$), como la energía de los fotones es mayor a la función trabajo del material, ($E = 3,1 eV > \phi_K = 2,3 eV$) se producirá efecto fotoeléctrico, mientras que si incide luz verde ($\lambda = 560nm$) la energía de los fotones es menor a la función trabajo del material ($E = 2,22 eV < \phi_K = 2,3 eV$) y, en esta caso, no se produce efecto fotoeléctrico:

En cambio, si las placas A y C del dispositivo fuesen de cesio ($\phi_{Cs} = 2,1 eV$) se produciría efecto fotoeléctrico para ambos tipos de fotones. Y en caso de ser de cobre ($\phi_{Cu} = 4,7 eV$), no se produciría efecto fotoeléctrico en ningún caso.

La velocidad máxima que tendrán los electrones al iluminar con luz violeta ($\lambda = 400 nm$) la podemos calcular a partir de la ecuación de Einstein:

$$E = \phi + E_{c_{max}} \quad (3-III)$$

E : Energía de los fotones incidentes

ϕ : Función trabajo del material

$E_{c_{max}}$: Energía cinética máxima de los electrones emitidos por efecto fotoeléctrico

Despejando de (3-III) podemos calcular la energía cinética:

$$E_{c_{max}} = E - \phi = 3,1 eV - 2,3 eV = 0,8 eV = 1,28 \cdot 10^{-19} J$$

Luego, podemos despejar la energía cinética máxima de los electrones:

$$E_{c_{max}} = \frac{1}{2} m (v_{max})^2 \Rightarrow v_{max} = \sqrt{\frac{2 E_{c_{max}}}{m}} = 5,3 \cdot 10^5 \text{ m/s}$$

b) El potencial de frenado para que la corriente se haga cero lo podemos calcular a partir de la energía cinética máxima de los electrones:

$$V_0 = \frac{E_{c_{max}}}{e} = \frac{1,28 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}} = 0,8 \text{ V}$$

o

$$V_0 = \frac{E_{c_{max}}}{e} = \frac{0,8 \text{ eV}}{e} = 0,8 \text{ V}$$

La frecuencia umbral del material la podemos calcular a partir de la función trabajo (recordemos que el material es potasio, $\phi_K = 2,3 \text{ eV}$):

$$\phi = h\nu_0 = 2,3 \text{ eV} = 3,68 \cdot 10^{-19} \text{ J} \Rightarrow \nu_0 = 5,55 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

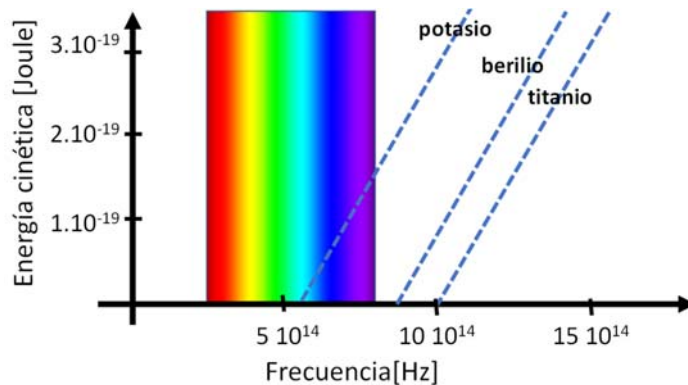
Problemas propuestos

Problema 1: En los experimentos de efecto fotoeléctrico la intensidad de la corriente (número de electrones que atraviesan el área transversal por unidad de tiempo) es proporcional a la intensidad de la luz. ¿Se puede usar este resultado para distinguir entre teoría clásica y cuántica?

Problema 2: ¿Cuánto tiempo le tomaría a un electrón en un átomo ligado a una superficie metálica, absorber una energía de 1 eV proveniente de una fuente luminosa de 1 W de potencia situada a 1 m de distancia, para poder salir eyectado de dicha superficie? ¿Qué puede concluir acerca de este tiempo y de la naturaleza instantánea del efecto fotoeléctrico? Sugerencia: suponga un radio atómico de 1 \AA .

Problema 3: ¿Por qué la existencia de una frecuencia de corte en el efecto fotoeléctrico es la objeción más fuerte a la teoría ondulatoria?

Problema 4: Analizar a partir de la figura la dependencia con el material. Estimar para cada uno la frecuencia de corte. ¿Qué fuente de luz utilizaría para estos casos?



Problema 5: El umbral fotoeléctrico de cierto metal es de 275 nm . Hallar:

- a) El trabajo necesario en eV para arrancar un electrón de ese metal.
- b) La velocidad máxima de los electrones arrancados por radiación de 180 nm .
- c) La diferencia de potencial necesaria para detenerlos.

Problema 6: a) Hallar la energía (en joule y en electronvolt) asociada a un fotón de $\lambda = 600\text{ nm}$.

b) Calcular (en J y eV) el trabajo de extracción de una superficie foto emisora si la longitud de onda umbral para esa superficie es 580 nm .

c) ¿A qué diferencia de potencial tendría que ser acelerado un electrón para adquirir la energía indicada a)?

d) En función de los órdenes de magnitud calculados, ¿cuál es la unidad de energía conveniente para expresar las energías involucradas en el efecto fotoeléctrico?

Problema 7: Cuando incide sobre una superficie emisora luz de $\lambda = 254\text{ nm}$, abandonan la superficie fotoelectrones que alcanzan velocidades de hasta 10^6 m/s .

a) ¿Cuál será el trabajo de extracción de la superficie emisora?

b) ¿Cuál es la mayor longitud de onda que puede expulsar electrones de la superficie?

Problema 8: Los electrones arrancados de la superficie de un metal por luz de frecuencia $2,2 \cdot 10^{15}\text{ Hz}$ son retenidos totalmente por un potencial retardador de $6,6\text{ V}$, mientras que los arrancados por la luz de frecuencia $4,6 \cdot 10^{15}\text{ Hz}$ lo son por un potencial de $16,5\text{ V}$. Calcular la constante de Planck a partir de estos datos.

Problema 9: Una célula fotoeléctrica de vacío consta de un cátodo central que es una esferita de wolframio, cuya función trabajo vale $4,58\text{ eV}$, y de un ánodo formado por la superficie interna plateada de la ampolla. Esta célula fotoeléctrica se ilumina con una longitud de onda de 230 nm .

a) ¿Qué potencial retardador habrá que aplicar entre los electrodos para que la corriente fotoeléctrica baje a cero?

b) ¿Qué velocidad alcanzarían los electrones al llegar al ánodo si entre el cátodo y el ánodo no se aplica una diferencia de potencial externa?

Problema 10: Considere luz incidiendo sobre una placa fotográfica. La luz será registrada si es capaz de disociar una molécula de AgBr en la placa. La energía mínima para disociar dicha molécula es $0,6\text{ eV}$. ¿Cuál será la longitud de onda máxima para que la luz sea registrada por la placa?

Problema 11: Para que el error en el uso de la energía cinética clásica en el efecto fotoeléctrico no supere el 1% , la velocidad de los fotoelectrones debe ser $v \leq 0,1c$. Para fotoelectrones arrancados de una placa de aluminio, cuya función trabajo es $4,2\text{ eV}$, ¿cuál será

la menor longitud de onda de fotón para que aún se pueda usar la expresión clásica de la energía cinética del fotoelectrón?

Referencias

Einstein, A. (1905). Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. *Annalen der Physik*. 322 (6): 132-148.

Deutsch: Photovoltaik Dachanlage Hannover - Schwarze Heide - Leistung 1 MW, 10 July 2012, Autor: AleSpa Creative Commons bajo licencia CC BY-SA 3.0 (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Photovoltaik_Dachanlage_Hannover_-_Schwarze_Heide_-_1_MW.jpg)

Solar cell, Autor: Desconocido, Fuente: United States Department of Energy, 17 August 2005, Creative Commons bajo licencia CC BY-SA 3.0 (https://es.wikipedia.org/wiki/C%C3%A9lula_fotoel%C3%A9ctrica#/media/Archivo:Solar_cell.png)

CAPÍTULO 4

Radiación X. Ley de Bragg. Efecto Compton

Introducción

A fines del siglo XIX, muchos científicos estudiaban la naturaleza de los rayos catódicos. El 8 de noviembre de 1895, el ingeniero mecánico y físico alemán Wilhelm C. Röntgen (1845-1923) se hallaba realizando experimentos en descargas eléctricas a través de gases utilizando un tubo de rayos catódicos al que le aplicaba grandes diferencias de potencial eléctrico. Accidentalmente observó luz proveniente de un papel pintado con platino cianuro de bario, una sustancia fluorescente al ser expuesta a la radiación luminosa. Notó que la luminiscencia continuaba luego de haber oscurecido completamente su laboratorio. También pudo observar que la luminiscencia del papel era mayor en las proximidades del tubo de rayos catódicos y continuaba aun después de cubrir el tubo con un cartón o de alejar el papel a casi dos metros. A partir de ese sorprendente hallazgo, se dedicó a estudiar este raro fenómeno que estaba relacionado con algún tipo de radiación no visible proveniente del tubo de rayos catódicos. Debido al desconocimiento de este fenómeno, a este misterioso rayo se lo identificó con el símbolo que representa una incógnita en matemática, la letra "X". Por este descubrimiento, Röntgen recibió en 1901 el primer premio Nobel de Física.

La realización de muchos experimentos con los rayos de Röntgen o rayos X permitió saber que estos rayos que no pueden ser percibidos por el sentido de la vista velan las placas fotográficas, pueden penetrar importantes distancias en los materiales con número atómico bajo, son absorbidos en materiales con alta densidad, se propagan en línea recta, pueden ionizar gases y matar células y no tienen carga eléctrica neta ya que no son desviados por campos eléctricos ni magnéticos

La naturaleza de los rayos X generó gran interés en la comunidad científica de la época. En ese momento, se estableció un gran debate sobre si la radiación X era una onda electromagnética como la que Maxwell propuso para la luz, pero de una longitud de onda mucho menor, o si debía ser tratada como un flujo de cuantos de alta energía, similares a los propuestos por Einstein en su teoría del efecto fotoeléctrico.

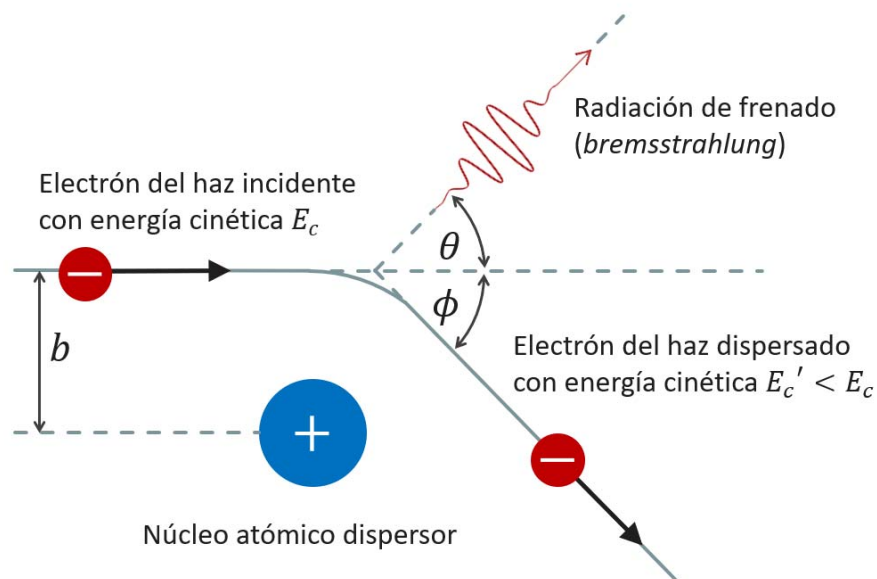
Emisión de rayos X

Emisión de radiación X continua

Una carga eléctrica estática o en movimiento rectilíneo y uniforme no emite energía electromagnética. Sin embargo, una carga acelerada radia energía en forma de ondas electromagnéticas. En este capítulo describiremos algunas de las propiedades más importantes de la radiación emitidas por las cargas aceleradas.

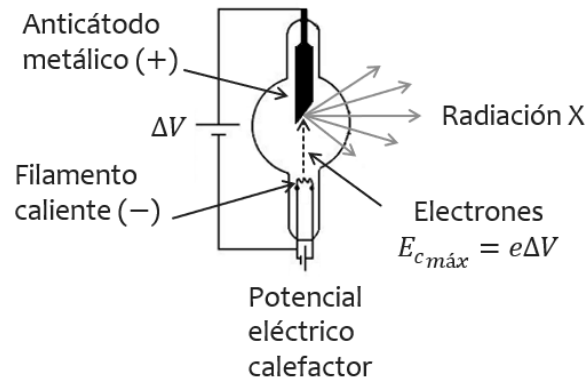
Consideremos un haz de electrones con energía cinética E_c que incide sobre un sólido metálico. En la Fig. 4.1 se muestra un electrón del haz desviándose al acercarse a un átomo del metal. La interacción coulombiana con el núcleo produce el desvío del electrón respecto de su trayectoria rectilínea original con un ángulo ϕ . Durante el cambio de dirección, el electrón radia energía en forma de ondas electromagnéticas lo que reduce su energía cinética ($E_c' < E_c$). La reducción de su energía cinética es igual a la energía radiada. Esta radiación se conoce con el nombre de “radiación de frenado o *bremsstrahlung*”, del alemán *bremsen* (frenar) y *strahlung* (radiación). Este fenómeno es la base de funcionamiento los tubos de rayos X.

Figura 4.1



Nota. Dispersión de una carga por un núcleo con emisión de radiación X

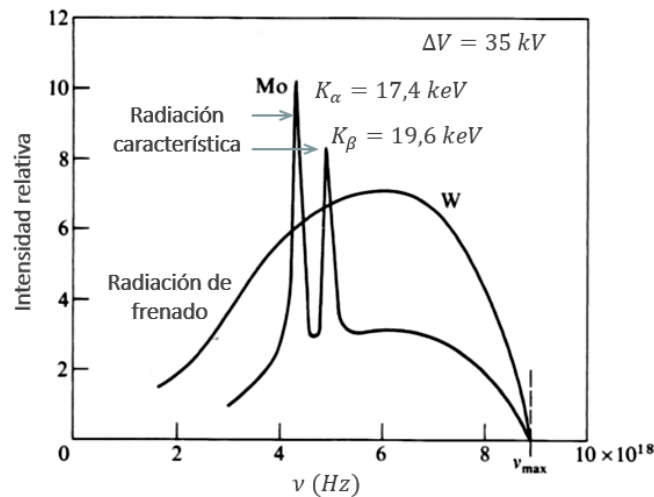
Figura 4.2



Nota. Componentes de un tubo de rayos X

La cantidad de energía cinética que cada electrón del haz pierde varía con la distancia entre la dirección de incidencia y centro del núcleo atómico (Fig. 4.1), como consecuencia de esto, el espectro de emisión de radiación X generado por cargas eléctricas aceleradas es continuo. En la práctica, la mayor parte de la energía del haz se transforma en calor en el anticátodo, el resto en radiación X. En la Fig. 4.3 se muestra un espectro de radiación de frenado de un tubo de rayos X. Estos espectros presentan una frecuencia máxima que es proporcional a la diferencia de potencial eléctrico ΔV con que fueron acelerados los electrones del tubo y es independiente del material del anticátodo (+).

Figura 4.3



Nota. Espectro de emisión continua de rayos X con emisión característica de un blanco de molibdeno ($M_0, Z = 42$). También se muestra el espectro de emisión continua de rayos X para el caso de un blanco de wolframio ($W, Z = 74$). Ambos espectros generados utilizando un haz de electrones de 35 keV.

Emisión de radiación X característica

El espectro de radiación X presenta líneas espectrales que se superponen a la radiación continua. Estos “picos” varían al cambiar el metal del anticátodo y se denominan *radiación X característica* del material del blanco.

Los electrones del haz transfieren suficiente energía a los electrones de las capas internas del metal para lograr eyectarlos del átomo. Cuando esto sucede otro electrón del mismo átomo pasa de un estado inicial de mayor energía al estado que ocupaba el electrón expulsado. El exceso de energía del electrón que realiza el “salto” (transición de estado) es radiado generando la aparición de picos en el espectro. En este libro, la estructura de niveles permitidos de energía para los electrones de un mismo átomo se comenzará a tratar a partir del estudio del modelo atómico de Bohr.

En fuentes con anticátodos de metales no muy pesados estos picos de radiación característica se observan con gran nitidez (Ej., molibdeno, $Z = 42$), mientras que para elementos más pesados se atenúan o desaparecen (Ej., wolframio, $Z = 74$). En la Fig. 4.3 los picos de emisión característica del molibdeno se identifican con una letra latina mayúscula que representa el estado final de la transición en orden creciente de energía (K, L, M, \dots fundamental, primer nivel excitado, segundo, ...) y con una letra griega como subíndice que representa el estado inicial de la transición ($\alpha, \beta, \gamma, \dots$ primer nivel excitado, segundo, tercero, ...) muestra una característica de la presencia de estas líneas características.

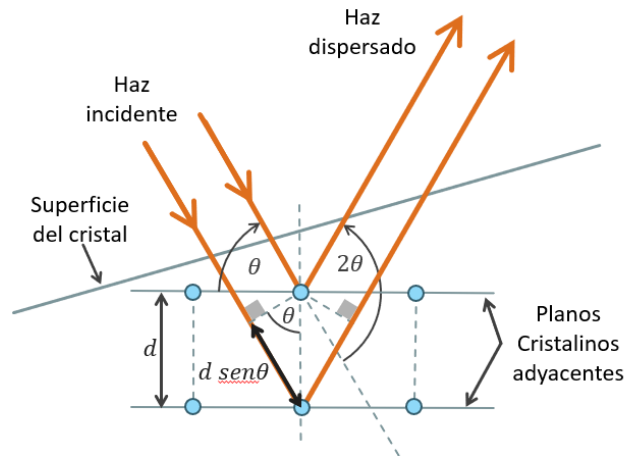
Difracción de rayos X en cristales

Desde mucho antes del descubrimiento de Röntgen se sabía que para observar la difracción de luz que pasa por una rendija, la longitud de onda debe ser mayor o al menos similar al ancho de la abertura. El físico alemán Max von Laue (1879-1960) propuso que quizás los espacios entre los átomos en un cristal podrían tener el tamaño adecuado para difractar rayos X. En 1912, Laue, junto a Friedrich y Knipping, publica un trabajo experimental sobre la difracción de rayos X producida por un cristal de ZnS . El experimento de Laue reveló la naturaleza ondulatoria de los rayos X y, además, comprobó que los cristales consisten en una organización tridimensional regular de átomos. Sin embargo, Laue no llegó a interpretar correctamente los patrones o figuras de difracción que registró.

Los físicos ingleses William H. Bragg (1862-1942) y su hijo William L. Bragg (1890-1971), al conocer los resultados experimentales de Laue, comenzaron a trabajar para tratar de hallar la dependencia de la forma de la figura de difracción con las características de la radiación X y las propiedades del cristal. Propusieron como hipótesis de trabajo que la figura de difracción podía

ser entendida a partir de las reflexiones del haz de radiación en los diferentes planos sucesivos de átomos del cristal. Interpretaron a la figura de difracción de rayos X como una consecuencia de la interferencia de las ondas reflejadas en planos paralelos y adyacentes de átomos de modo semejante a la forma en que la luz interfiere al incidir con cierto ángulo sobre un vidrio de caras plano paralelas.

Figura 4.4



Nota. Esquema de la reflexión del haz en los planos cristalinos de un cristal. El ángulo de incidencia se mide respecto del plano cristalino reflectante. La dirección del haz dispersado forma un ángulo de 2θ respecto de la dirección de incidencia

En la Fig. 4.4 muestra dos rayos incidentes que se reflejan en planos atómicos contiguos. La interferencia de los rayos reflejados será constructiva (máximo de intensidad en el detector) cuando la diferencia de camino óptico sea múltiplo de la longitud de onda de la radiación:

$$2d \sin \theta = n \lambda \quad (n \in \mathbb{N}) \quad (3.1)$$

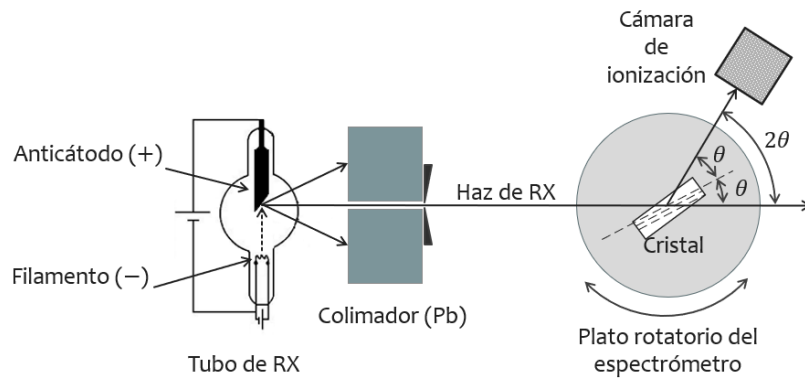
Esta expresión se conoce como *ley de Bragg*.

W. H. Bragg construyó un espectrómetro de rayos X para analizar el haz reflejado consistente de un tubo de rayos X, una placa de plomo para conformar el haz, un cristal sobre un plato con goniómetro y una cámara de ionización para determinar la energía de los rayos dispersados (Figura 3.5). Con este instrumento logró registrar por primera vez un espectro continuo de radiación de radiación X y descubrió además que cada metal utilizado en el anticátodo de la fuente de rayos X generaba un conjunto de líneas espectrales particulares superpuestas al espectro continuo, las líneas de la radiación X característica.

Los trabajos de Bragg padre e hijo crearon las bases de la cristalografía de rayos X.

W. H. Bragg y W. L. Bragg recibieron el Premio Nobel Física 1915 "por sus contribuciones a la cristalografía de rayos X".

Figura 4.5



Nota. Esquema de un espectrómetro de rayos X.

El efecto Compton

La primera prueba definitiva de la existencia de los cuantos de energía de radiación propuestos por Albert Einstein en su teoría cuántica del efecto fotoeléctrico fue el experimento que realizó en 1923 el físico estadounidense Arthur Compton (1892-1962).

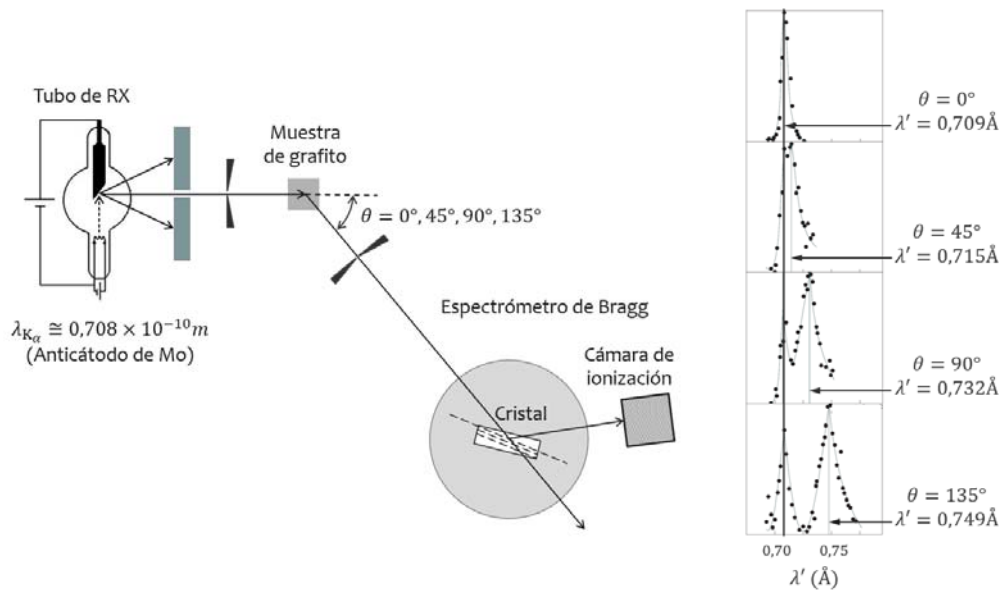
El efecto Compton es un fenómeno de dispersión de rayos X monocromáticos por electrones que pueden ser considerados inicialmente libres y en reposo. La radiación dispersada contiene, además de una componente con la misma longitud de onda de la radiación incidente, otra con longitud de onda mayor cuyo valor varía con el ángulo de dispersión y es independiente del material usado como blanco.

El experimento de Compton

Este experimento consistió en hacer incidir un haz de rayos X sobre un blanco de grafito y analizar la radiación dispersada con un espectrómetro de Bragg.

El esquema mostrado en la Fig. 4.6 muestra la organización experimental que utilizó Compton en su experimento. El tubo de rayos X tenía un anticátodo de molibdeno que emitía radiación con longitud de onda $\lambda = 0,708 \text{ \AA}$. El haz colimado incidía sobre grafito donde era dispersado. Luego, la radiación dispersada era colimada y con un espectrómetro de Bragg se separaban las diferentes longitudes de onda presentes para cada ángulo de dispersión θ , definido respecto de la dirección del haz incidente. Finalmente, con una cámara de ionización se midió la intensidad de la radiación dispersada en función de su longitud de onda (λ').

Figura 3.6



Nota. Esquema del dispositivo experimental utilizado por Compton (izquierda). Espectros de rayos X de Mo dispersados por grafito para 4 posiciones angulares. La diferencia entre el valor medido y el teórico para la longitud de onda dispersada a 90° fue tan solo de 0,002 Å.

Los espectros de dispersión así obtenidos contienen siempre una componente con la misma longitud de onda que la del haz incidente (λ). Sin embargo, en cualquier dirección diferente a la de incidencia ($\theta \neq 0$), aparece una segunda componente (λ') de mayor longitud ($\lambda' > \lambda$). Compton observó que al incrementar el ángulo de observación θ aumentaba la diferencia entre las longitudes de onda dispersada e incidente ($\Delta\lambda \equiv \lambda' - \lambda$) y esta diferencia era independiente del material dispersor, y de la intensidad y longitud de onda de los rayos X incidentes.

La componente dispersada con la misma frecuencia que la radiación incidente podía ser explicada con la teoría clásica de *dispersión de J. J. Thomson* (1856-1940). Ésta consiste en radiación dispersada por partículas cargadas que pueden ser consideradas libres. La partícula cargada comienza moverse en fase con el campo eléctrico de la onda incidente. La carga realizando un movimiento oscilatorio produce la emisión de radiación en todas las direcciones perpendiculares a la dirección de oscilación de la carga, con la misma frecuencia y fase que la onda incidente. Este tipo de dispersión recibe el nombre de *dispersión coherente*. En ella la energía de la radiación y de la carga no cambian luego del fenómeno.

El problema se presentó al analizar la segunda componente del espectro de dispersión la cual no se pudo explicar con la teoría clásica. Al observar diferentes espectros de emisión de radiación X, Compton notó que esta componente es intensa para materiales dispersores con bajo número atómico (Z), como es al caso del carbono, y para materiales con número atómicos más altos disminuye, incluso llega a desaparecer en algunos materiales con átomos pesados. Supuso entonces que los electrones menos ligados del átomo eran los responsables de la aparición de este segundo pico en el espectro de rayos X dispersados.

El modelo de Compton

Compton pudo explicar la radiación dispersada con longitudes de onda (o frecuencias) diferentes a la del haz incidente considerando la colisión entre un fotón y un electrón que asumió libre y en reposo. Este problema es similar a la colisión de dos bolas de billar perfectamente rígidas donde se conserva la energía mecánica y el impulso lineal (colisión elástica).

Las hipótesis del modelo de Compton de la dispersión de rayos X son:

- El haz de rayos X monocromático de frecuencia ν es considerado como un flujo de fotones, todos con la energía $E_f = h \nu$; donde h es la constante de Planck, c es la velocidad de la luz en el vacío y $\nu = c/\lambda$,
- Cada fotón dispersado es generado por la colisión de un fotón incidente con un único electrón libre y en reposo.

Consideró que los electrones menos ligados del material son los responsables de la componente del espectro con longitud de onda mayor ($\lambda' > \lambda$). A estos electrones los supuso "libres" debido a que la energía de la primera ionización de cualquier material es muy inferior a la energía de un fotón X. La validez de esta aproximación se puede comprobar, por ejemplo, comparando la energía de primera ionización de un átomo de carbono (11,3 eV) con la energía de un fotón con $\lambda = 0,708 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ (17437,9 eV) que equivale a 0,06% de la energía del fotón.

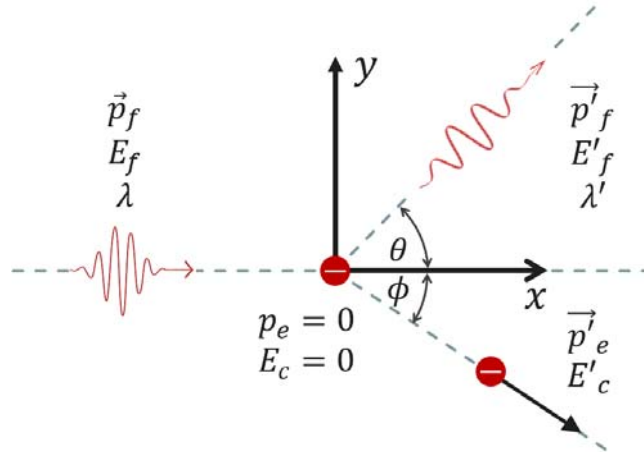
Calculemos la diferencia de longitud de onda entre los fotones dispersado e incidente en la colisión de un fotón con un electrón libre e inicialmente en reposo.

En la Fig. 4.7 se esquematizan los estados inicial y final de la colisión entre un fotón y un electrón inicialmente en reposo, las magnitudes en el estado final se indican con un apóstrofo ('). Los resultados experimentales indican que $\lambda' > \lambda$, entonces $E'_f < E_f$. La diferencia de energía entre el fotón incidente y el dispersado es igual a la energía que gana el electrón, originalmente en reposo ($E_c = 0$). A la energía cinética del electrón en el estado final, Compton la denominó *energía de retroceso* del electrón:

$$E'_c = E_f - E'_f \quad (4.2)$$

Debido a que los fotones de radiación X son muy energéticos, las cantidades de energía que intercambian las partículas en la colisión son suficientemente elevadas por lo que es necesario un análisis relativista de la cinemática de electrón.

Figura 4.7



Nota. Colisión entre un fotón y un electrón en reposo

Notas sobre Relatividad Especial

a) Partículas con masa

La expresión para la energía total de una partícula con masa que se mueve a velocidades cercanas a la velocidad de la luz en términos de su cantidad de movimiento es:

$$E = \sqrt{(m_0c^2)^2 + (pc)^2}: \text{“Energía total de una partícula relativista”}$$

donde m_0 es la masa en reposo y p la cantidad de movimiento lineal de la partícula.

Si la partícula se halla en reposo ($p = 0$) entonces su energía resulta ser:

$$E_0 \equiv m_0c^2: \text{“Energía en reposo de una partícula de masa } m_0\text{”}$$

La diferencia entre la energía total y la energía en reposo es su energía de movimiento:

$$E_c = E - E_0: \text{“Energía cinética de una partícula relativista”}$$

b) Partículas sin masa

Consideremos una partícula sin masa, por ejemplo un fotón. La hipótesis cuántica de la radiación de Einstein establece que la energía del fotón es $E_f = h\nu$. Alternativamente, podemos expresar esta energía en términos de su cantidad de movimiento (\vec{p}_f); sustituyendo $m_0 = 0$ en la expresión para la energía total de una partícula relativista obtenemos:

$$E_f = p_fc: \text{“Energía del fotón”}$$

luego la cantidad del movimiento del fotón resulta luego la cantidad del movimiento del fotón resulta ser:

$$p_f = \frac{E_f}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

donde $\lambda = c/\nu$ es la longitud de onda de la radiación electromagnética.

La conservación de la energía antes y después de un choque elástico impone la siguiente condición: $E_f + E = E'_f + E'$ (E_f y E son la energía del fotón incidente y la energía del electrón en reposo respectivamente, E'_f y E' corresponden a la energía del fotón dispersado y a la energía total del electrón luego de la colisión).

$$p_fc + E_0 = p'_fc + E' \quad (4.3)$$

De la ecuación anterior resulta que la energía cinética del electrón ($E_c = E' - E_0$) es igual a diferencia de energía entre los fotones incidente y dispersado ($p_f c - p'_f c$), entonces:

$$E'_c = (p_f - p'_f)c \quad (4.4)$$

La energía final del electrón (E') es la suma de su energía en reposo y su energía cinética, entonces:

$$E'^2 = (E_0 + E'_c)^2 \quad (4.5)$$

Esta cantidad también puede ser expresada en términos de su cantidad de movimiento:

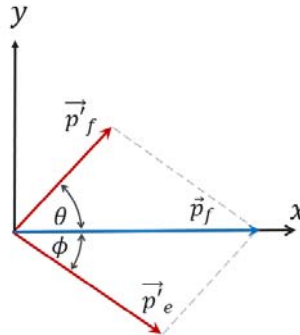
$$E'^2 = (m_0 c^2)^2 + (p'_e c)^2 \quad (4.6)$$

Si igualamos las dos ecuaciones anteriores, reemplazando los valores para E_0 y E'_c , podemos hallar una expresión relativista para la cantidad de movimiento del electrón de retroceso p'_e :

$$p_e'^2 = (p_f - p'_f)^2 + 2m_0 c(p_f - p'_f) \quad (4.7)$$

La conservación de la cantidad de movimiento lineal antes y después de la colisión elástica implica que el electrón dispersado adquiere un momento lineal igual al cambio del momento de los fotones: $\vec{p}'_e = \vec{p}_f - \vec{p}'_f$, $p_e = 0$ (Fig. 4.7)

Figura 4.7



Nota. Esquema donde se muestra que la suma de las cantidades de movimiento en el estado final (en rojo) es igual a la cantidad de movimiento del fotón incidente del estado inicial (en azul).

$$p_e'^2 = p_f^2 + p_f'^2 - 2 p_f p_f' \cos\theta \quad (4.8)$$

Igualando las dos ecuaciones anteriores halladas para $p_e'^2$ podemos escribir

$$\frac{1}{p_f} - \frac{1}{p_f'} = \frac{1}{m_0 c} (1 - \cos\theta) \quad (4.9)$$

Multiplicando ambos miembros por h y recordando que para un fotón $\lambda = h/p$, resulta:

$$\Delta\lambda \equiv \lambda' - \lambda = \lambda_c (1 - \cos\theta) \quad \text{“Corrimiento Compton”} \quad (4.10)$$

donde $\lambda_c \equiv h/m_e c = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ se denomina "longitud de onda Compton", con m_e la masa en reposo del electrón.

Cuando la energía del fotón es menor que la energía de enlace del electrón, el fotón colisionará con el átomo como una unidad y el electrón permanecerá en estado ligado inicial. A partir de la expresión para el corrimiento Compton podemos afirmar que si un fotón colisiona con una partícula de masa muy grande ($M \gg m_e$) el corrimiento de longitud de onda se reduce en la misma proporción. Una estimación del cambio de longitud de onda para el caso de una colisión de un fotón con un átomo de carbono ^{12}C ($M \sim 22000 m_e$) puede obtenerse reemplazando la masa del átomo por la del electrón en el corrimiento Compton: $\Delta\lambda^{\text{átomo}} = h/Mc (1 - \cos\theta) \cong 5 \cdot 10^{-5} \Delta\lambda^{\text{electrón}}$.

Para un ángulo de dispersión de 90° , Compton calculó $\Delta\lambda = 2,4 \cdot 10^{-12} \text{ m}$. El corrimiento estimado para la dispersión por átomos según la expresión anterior es $\Delta\lambda \cong 1 \cdot 10^{-16} \text{ m}$. Concluimos que, para cualquier dirección de observación, la longitud de onda dispersada por un átomo tiene prácticamente la misma longitud de onda incidente. Ésta es la explicación cuántica de la presencia en el espectro de una componente de radiación prácticamente con la longitud de onda original.

En 1923, Walther Bothe y Robert B. Wilson realizaron experimentos en forma independiente que les permitieron registrar por primera vez los electrones de retroceso. Dos años más tarde, W. Bothe y W. Geiger confirmaron experimentalmente que el electrón de retroceso y el fotón dispersado aparecen simultáneamente. En 1927, A. A. Bless midió la energía de retroceso del electrón dispersado comprobando el resultado que predice la teoría. Ese mismo año, Compton recibió el premio Nobel por su teoría cuántica de dispersión de rayos X por elementos livianos publicada en 1923.

Usos y aplicaciones de los Rayos X, la difracción de Bragg y el efecto Compton

Aplicaciones en medicina

El radiodiagnóstico es el estudio de las estructuras anatómicas internas de un paciente con la ayuda de la imagen generada a partir de la radiación X transmitida por el cuerpo del paciente. La imagen radiológica se genera debido a que los distintos órganos y estructuras anatómicas del cuerpo poseen diferentes absorciones de la radiación incidente. Si la imagen es estática se denomina radiografía, si se trata de un video se llama radioscopía.

La tomografía axial computarizada (TAC) es una técnica no invasiva consistente en un barrido o escaneo que permite la visualización tridimensional de la estructura interna de un objeto al ser irradiado con radiación X. La imagen tridimensional generada está compuesta por una secuencia de imágenes de secciones transversales del objeto. La imagen de cada corte se obtiene midiendo

la intensidad de los rayos X que son atenuados (absorción de rayos X), dispersados (efecto Compton) o difractados (ley de Bragg) por el objeto. Esta técnica es de gran uso en medicina, industria y geología.

Aplicaciones en la industria

La absorción de la radiación al atravesar un material permite medir espesores y densidades. A mayor espesor de la lámina o mayor densidad del material menor será la cantidad de radiación transmitida.

La radiografía industrial es una técnica no destructiva utilizada en la industria metalúrgica. Mediante la formación de imágenes por absorción se pueden evaluar daños internos en piezas o comprobar la calidad de soldaduras (ausencia de poros, penetración, imperfecciones).

En seguridad y vigilancia se emplean equipos de radioscopia por rayos X para monitorear el contenido de valijas y paquetes en aeropuertos y servicios de correos.

En investigación

En Ciencia de Materiales, la difracción de rayos X (ley de Bragg) permite la identificación de fases debido a que cada fase cristalina produce un patrón de difracción característico.

También permite realizar medidas de tensiones. Los espaciados entre planos atómicos de una fase cristalina varían de una zona a otra de las fases cristalinas como consecuencia de las tensiones internas, las líneas de difracción de las diferentes zonas están ligeramente desplazadas. El efecto conjunto de una región del cristal con tensiones internas es el ensanchamiento del pico de difracción.

Otra aplicación muy importante es la determinación de estructuras cristalinas.

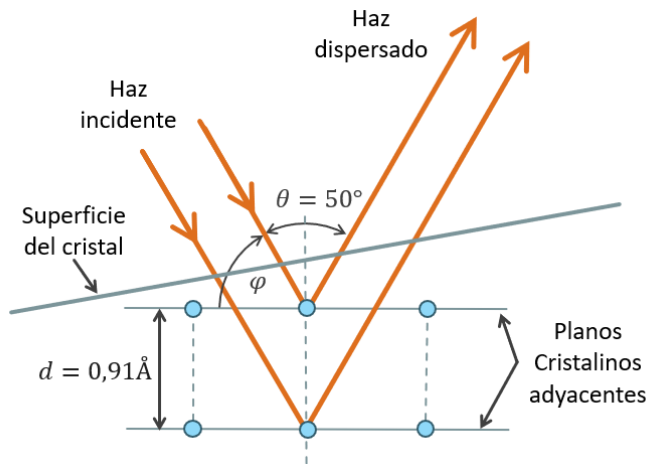
La cantidad de aplicaciones de los rayos X en ciencia es numerosa y abarca disciplinas como biología celular y molecular, genética, diseño de fármacos, estudio de esculturas, pinturas, libros, instrumentos musicales, etc.

Problemas resueltos

Problema 1: En uno de sus experimentos, Davisson y Germer usaron electrones incidiendo sobre la superficie de un cristal de Níquel, observaron la existencia de interferencia constructiva en un ángulo de 50° respecto de la dirección de incidencia para electrones incidentes con una energía cinética de 60 eV (ver figura).

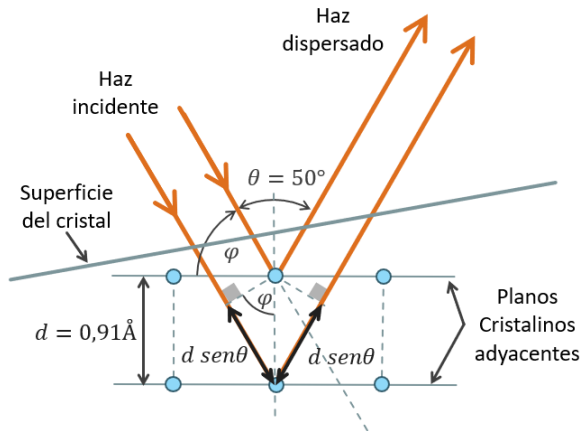
a) Suponiendo que la difracción ocurre a primer orden, encuentre la longitud de onda asociada a los electrones del haz a partir de la reflexión de Bragg.

- b) Repita el cálculo de λ utilizando la expresión de de Broglie y compare los resultados.
 c) Muestre que la condición de interferencia constructiva $k \cdot \Delta x = 2n\pi$ es equivalente a la relación de Bragg.



Solución:

- a) Para calcular la longitud de onda de los electrones difractados utilizamos la ley de Bragg.



De la figura, podemos calcular φ :

$$2\varphi + \theta = 180^\circ \Rightarrow \varphi = \frac{(180^\circ - \theta)}{2} = \varphi = \frac{(180^\circ - 50^\circ)}{2} = 65^\circ$$

Como la difracción observada ocurre en el primer orden, $m = 1$ de la ecuación de Bragg despejamos la longitud de onda:

$$\lambda = 2 d \text{ sen } \varphi = 2(0,91 \text{ \AA}) \text{ sen } 65^\circ = 1,65 \text{ \AA}$$

b) Ahora calculamos la longitud de onda de los electrones, pero a partir de la ecuación de Louis de Broglie $\lambda = \frac{h}{p}$. Conocemos el valor de la energía cinética de los electrones incidentes:

$$E_c = \frac{p^2}{2m_e} = 60 \text{ eV} = 9,6 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

Luego el módulo de cantidad de movimiento de uno de estos electrones es:

$$p = \sqrt{2 E_c m_e} = \sqrt{2(9,6 \cdot 10^{-18} \text{ J})(9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg})} = 4,18 \cdot 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$$

Entonces, a partir de la hipótesis de de Broglie resulta que

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{4,18 \cdot 10^{-24} \text{ kg m/s}} = 1,585 \text{ \AA}$$

Observemos que las longitudes de onda de los electrones calculadas por de Broglie o por el experimento de difracción, tienen casi el mismo valor numérico.

c) Para mostrar que la condición de interferencia constructiva $k \cdot \Delta x = 2n\pi$ es equivalente a la relación de Bragg, reemplazamos en la expresión anterior la diferencia de camino óptico entre los dos rayos, $\Delta x = 2 d \text{ sen}\theta$:

$$k \cdot \Delta x = 2n\pi \rightarrow \frac{2\pi}{\lambda} 2d \text{ sen}\theta = 2n\pi \Rightarrow 2d \text{ sen}\theta = n \lambda$$

Problema 2: a) Calcular la variación porcentual en la longitud de onda observada en una dispersión de Compton de fotones de 22 keV a $\theta = 65^\circ$.
b) ¿Cuál es la energía y longitud de onda de los fotones dispersados?

Solución:

a) Para resolver este ejercicio deberemos considerar la ecuación de Compton, ya que nos pide el cambio en la longitud de onda observada, es decir:

$$\Delta\lambda = \lambda_f - \lambda_i$$

λ_f : Longitud de onda del fotón dispersado

λ_i : Longitud de onda del fotón incidente

La ecuación de Compton:

$$\lambda_f - \lambda_i = \frac{h}{mc} (1 - \cos(\theta)) = \lambda_c (1 - \cos(\theta))$$

λ_f : Longitud de onda del fotón dispersado

λ_i : Longitud de onda del fotón incidente

$\lambda_c = \frac{h}{mc} = 2,42 \cdot 10^{-12} \text{ m} = 2,42 \text{ pm}$: Longitud de onda de Compton

$m = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$. Masa del electrón

$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$. Velocidad de la luz en el vacío

$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$. Constante de Planck

$\theta = 65^\circ$ Ángulo que se desvía el fotón dispersado respecto de su dirección original.

La ecuación de Compton:

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos(\theta)) = 2,42 \cdot 10^{-12} \text{ m} \cdot (1 - \cos(65^\circ)) = 1,397 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

Luego, la variación porcentual es:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_i} \cdot 100 = \frac{1,4 \cdot 10^{-12} \text{ m}}{\lambda_i} \cdot 100$$

Necesitamos la longitud de onda del fotón incidente, la cual podemos obtener a partir del dato de la energía de dichos fotones $E_{f_i} = 22 \text{ keV}$, que expresado en Joules es $E_{f_i} = 3,52 \cdot 10^{-15} \text{ J}$.

La longitud de onda del fotón incidente la calculamos a partir de su energía $E_{f_i} = h\nu = \frac{hc}{\lambda_i}$:

$$\lambda_i = \frac{hc}{E_{f_i}} = 56,47 \cdot 10^{-12} \text{ m} = 56,47 \text{ pm}$$

Entonces la variación porcentual será:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_i} \cdot 100 = \frac{1,4 \cdot 10^{-12} \text{ m}}{56,5 \cdot 10^{-12} \text{ m}} \cdot 100 = 2,5 \%$$

b) La longitud de onda de los fotones dispersados la podemos calcular a partir del corrimiento Compton $\Delta\lambda = \lambda_f - \lambda_i$:

$$\lambda_f = \Delta\lambda + \lambda_i = 57,9 \cdot 10^{-12} \text{ m} = 57,9 \text{ pm}$$

y con este valor calculamos la energía del fotón dispersado:

$$E_{f_f} = \frac{hc}{\lambda_f} = 21,46 \text{ keV}$$

Problema 3: Si la máxima energía comunicada a un electrón en una dispersión Compton es 50 keV:

- ¿Cuál es la longitud de onda del fotón incidente?
- ¿Cuál es la longitud de onda del fotón dispersado?
- ¿Cuál es la cantidad de movimiento del electrón (indicar módulo y ángulo)?

Solución:

a) La energía cinética máxima adquirida por el electrón, cuando se produce efecto Compton, es:

$$E_{c_e} = E_\lambda - E_{\lambda'} = \frac{hc}{\lambda} - \frac{hc}{\lambda'} = 50 \text{ keV}$$

λ : Longitud de onda del fotón incidente

λ' : Longitud de onda del fotón dispersado

c : velocidad de la luz en el vacío

h : constante de Planck

m_e : masa del electrón

c : módulo de velocidad de la luz en el vacío

p_e : módulo de cantidad de movimiento inicial del electrón

p'_e : módulo de cantidad de movimiento final del electrón

Como el dato es la "máxima" energía comunicada al electrón, para que esto suceda, el fotón debe perder la mayor energía posible, es decir ($E_{\lambda'}$) debe ser lo más chica posible, entonces λ' debe ser lo más grande posible, entonces $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ debe ser lo más grande posible.

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta) \Rightarrow \theta = \pi$$

$$\Delta\lambda = 2 \frac{h}{m_e c} = 4,84 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

Así obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} \lambda' - \lambda = 4,84 \cdot 10^{-12} \text{ m} \\ \frac{hc}{\lambda} - \frac{hc}{\lambda'} = 50 \text{ keV} = 8 \cdot 10^{-15} \text{ J} \end{cases}$$

Despejando λ de ambas ecuaciones, obtenemos:

$$\lambda = 8,81 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

Notar que al despejar λ de ambas ecuaciones, se obtiene una función cuadrática cuyas dos soluciones nos brindan dos posibles valores de λ . Sin embargo, uno de estos valores es negativo, con lo cual dicha solución queda descartada por no tener sentido físico.

b) $\lambda' = \Delta\lambda + \lambda = 13,65 \cdot 10^{-12} \text{ m}$

c) La cantidad de movimiento lineal es una magnitud vectorial. Para calcular el módulo de la cantidad de movimiento (p'_e) y el ángulo del electrón dispersado (ϕ) deberemos plantear su conservación antes y después de la colisión:

$$\vec{p}_\lambda = \vec{p}_{\lambda'} + \vec{p}'_e$$

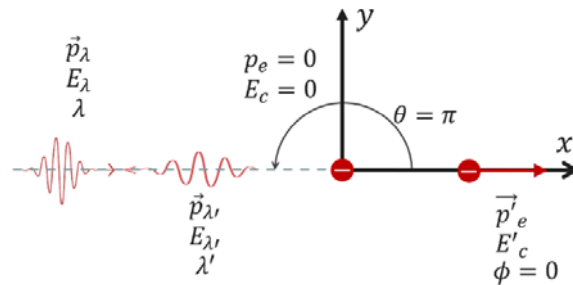
$\vec{p}_{\lambda'}$: cantidad de movimiento del fotón dispersado

\vec{p}_λ : cantidad de movimiento del fotón incidente

\vec{p}_e : cantidad de movimiento inicial del electrón (nula)

\vec{p}'_e : cantidad de movimiento final del electrón

Sabiendo que $\theta = \pi$, planteamos la conservación de la cantidad de movimiento en el eje x



$$p_\lambda = p_{\lambda'} \cos(\pi) + p'_e \cos(\phi) \Rightarrow p'_e \cos(\phi) = p_\lambda - p_{\lambda'} \quad (-1)$$

$$p'_e \cos(\phi) = p_\lambda + p_{\lambda'} \quad (4-I)$$

Del mismo modo, planteamos la conservación de la cantidad de movimiento en el eje y :

$$0 = -p_{\lambda'} \sin(\pi) + p'_e \sin(\phi) \Rightarrow p'_e \sin(\phi) = 0 \Rightarrow \phi = 0 \quad (4-II)$$

Reemplazando (4-II) en (4-I):

$$p'_e = p_\lambda + p_{\lambda'} = \frac{h}{\lambda} + \frac{h}{\lambda'} = 1,24 \cdot 10^{-22} \text{ kg m/s}$$

Problema 4: a) Un fotón de 10^4 eV interactúa con un electrón libre y en reposo, de modo tal que se dispersa un ángulo de 60° . Determine:

- i) La variación de longitud de onda del fotón.
- ii) La variación de frecuencia del fotón.
- iii) La variación de energía del fotón.
- iv) La energía cinética que adquiere el electrón.

b) A partir de leyes de conservación, demuestre que la frecuencia del fotón dispersado y la frecuencia del fotón incidente satisfacen la relación siguiente:

$$\nu' = \frac{\nu}{1 + \frac{h\nu}{mc^2}(1 - \cos(\theta))}$$

ν' : frecuencia del fotón dispersado

ν : frecuencia del fotón incidente

h : Constante de Planck

θ : Ángulo del fotón dispersado

m : Masa del electrón

Solución:

a) i) Reemplazando los datos en la ecuación de Compton:

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos(\theta)) = 2,42 \cdot 10^{-12}m \cdot (1 - \cos(60^\circ)) = 1,21 \text{ pm}$$

a) ii) La frecuencia del fotón incidente es:

$$\nu_i = \frac{E_{\lambda_i}}{h} = 2,4147 \cdot 10^{18} \text{ Hz}$$

La longitud de onda del fotón incidente:

$$\lambda_i = \frac{hc}{E_{\lambda_i}} = 1,2424 \text{ \AA}$$

La longitud de onda del fotón dispersado:

$$\lambda_f = \Delta\lambda + \lambda_i = 1,2545 \text{ \AA}$$

La frecuencia del fotón dispersado:

$$\nu_f = \frac{c}{\lambda_f} = 2,3914 \cdot 10^{18} \text{ Hz}$$

Así la variación de frecuencia es:

$$\Delta\nu = \nu_i - \nu_f = 0,0233 \cdot 10^{18} \text{ Hz}$$

Notar que la frecuencia del fotón dispersado es menor que la frecuencia del fotón incidente.

a) iii) La energía del fotón incidente es dato:

$$E_{\lambda_i} = 10^4 \text{ eV}$$

La energía del fotón dispersado la podemos calcular a partir de la frecuencia del fotón:

$$E_{\lambda_f} = h\nu_f = 9.903,4 \text{ eV}$$

Así la variación de energía del fotón es:

$$\Delta E = E_{\lambda_i} - E_{\lambda_f} = 96,6 \text{ eV}$$

Notar que la energía del fotón dispersado es menor que la energía del fotón incidente.

iv) La energía cinética del electrón en retroceso:

$$K_e = E_{\lambda_i} - E_{\lambda_f} = 96,6 \text{ eV}$$

b) Planteamos conservación de la cantidad de movimiento antes y después de la colisión (tengamos en cuenta que esta magnitud es vectorial):

$$\vec{p}_{\lambda_i} = \vec{p}_{\lambda_f} + \vec{p}_e$$

\vec{p}_{λ_i} : Cantidad de movimiento del fotón dispersado.

\vec{p}_{λ_i} : Cantidad de movimiento del fotón incidente.

\vec{p}_e : Cantidad de movimiento del electrón

La cantidad de movimiento del electrón es:

$$\vec{p}_e = \vec{p}_{\lambda_i} - \vec{p}_{\lambda_f}$$

Luego multiplicamos por \vec{p}_e para, a partir del producto escalar de vectores, obtener el módulo de la cantidad de movimiento:

$$\begin{aligned}\vec{p}_e \cdot \vec{p}_e &= (\vec{p}_{\lambda_i} - \vec{p}_{\lambda_f}) \cdot (\vec{p}_{\lambda_i} - \vec{p}_{\lambda_f}) \\ p_e^2 &= p_{\lambda_i}^2 + p_{\lambda_f}^2 - \vec{p}_{\lambda_i} \vec{p}_{\lambda_f} - \vec{p}_{\lambda_i} \vec{p}_{\lambda_f} \\ p_e^2 &= p_{\lambda_i}^2 + p_{\lambda_f}^2 - 2p_{\lambda_i} p_{\lambda_f} \cos(\theta)\end{aligned}\quad (4-III)$$

θ : Ángulo del fotón dispersado respecto al fotón incidente.

Por otro lado, planteamos conservación de la energía antes y después de la colisión:

$$E_{\lambda_i} + m_e c^2 = E_{\lambda_f} + m_e c^2 + E_{c_e} \quad \text{con} \quad E_{tot_e} = m_e c^2 + E_{c_e}$$

Inicialmente, en el sistema tenemos un electrón en reposo y un fotón, es decir que la energía inicial será la suma de la energía del fotón incidente E_{λ_i} , más la energía del electrón que está en reposo $m_e c^2$. Luego de la colisión tendremos la energía del fotón dispersado E_{λ_f} , más la energía total del electrón en retroceso E_{tot_e} . Despejando podemos obtener la energía total del electrón:

$$E_{tot_e} = m_e c^2 + E_{c_e} = E_{\lambda_i} + m_e c^2 - E_{\lambda_f} \quad (4-IV)$$

Además, tenemos que la energía total del electrón en retroceso es:

$$E_{tot_e} = \sqrt{(m_e c^2)^2 + (p_e c)^2} \quad (4-V)$$

m_e : Masa del electrón

c : Módulo de la velocidad de la luz en el vacío

p_e : Módulo de la cantidad de movimiento del electrón

$E_{TOT_{electrón}}$: Energía total del fotón dispersado

Igualamos (4-IV) y (4-V):

$$\sqrt{(m_e c^2)^2 + (p_e c)^2} = E_{\lambda_i} + m_e c^2 - E_{\lambda_f}$$

Reemplazamos las energías de los fotones en función de las respectivas cantidades de movimiento de cada uno:

$$(m_e c^2)^2 + (p_e c)^2 = (p_{\lambda_i} c + m_e c^2 - p_{\lambda_f} c)^2$$

p_{λ_i} : Cantidad de movimiento del fotón incidente.

p_{λ_f} : Cantidad de movimiento del fotón dispersado.

Sacamos factor común c^2 a ambos lados:

$$c^2 [m_e^2 c^2 + p_e^2] = c^2 (p_{\lambda_i} + m_e c - p_{\lambda_f})^2$$

Trabajamos algebraicamente para despejar la cantidad de movimiento del electrón:

$$\begin{aligned}m_e^2 c^2 + p_e^2 &= p_{\lambda_i}^2 + (m_e c - p_{\lambda_f})^2 + 2p_{\lambda_i} (m_e c - p_{\lambda_f}) \\ (m_e c)^2 + p_e^2 &= p_{\lambda_i}^2 + (m_e c)^2 + p_{\lambda_f}^2 - 2m_e c p_{\lambda_f} + 2p_{\lambda_i} m_e c - 2p_{\lambda_i} p_{\lambda_f}\end{aligned}$$

$$p_e^2 = p_{\lambda_i}^2 + p_{\lambda_f}^2 + 2m_e c (p_{\lambda_i} - p_{\lambda_f}) - 2p_{\lambda_i}p_{\lambda_f} \quad (4-VI)$$

Igualemos (4-III) y (4-VI)

$$p_{\lambda_i}^2 + p_{\lambda_f}^2 - 2p_{\lambda_i}p_{\lambda_f} \cos(\theta) = p_{\lambda_i}^2 + p_{\lambda_f}^2 + 2m_e c (p_{\lambda_i} - p_{\lambda_f}) - 2p_{\lambda_i}p_{\lambda_f}$$

$$-p_{\lambda_i}p_{\lambda_f} \cos(\theta) = m_e c (p_{\lambda_i} - p_{\lambda_f}) - p_{\lambda_i}p_{\lambda_f}$$

$$m_e c \left(\frac{h\nu_i}{c} - \frac{h\nu_f}{c} \right) - \frac{h\nu_i h\nu_f}{c^2} = -\frac{h\nu_i h\nu_f}{c^2} \cos(\theta)$$

ν_f : Frecuencia del fotón dispersado

ν_i : Frecuencia del fotón incidente

h : Constante de Planck

$$\frac{h\nu_i}{c} - \frac{h\nu_f}{c} = \frac{1}{m_e c} \left(\frac{h\nu_i h\nu_f}{c^2} \right) (1 - \cos(\theta))$$

$$\frac{\nu_i - \nu_f}{\nu_f} = \frac{h \nu_i}{m_e c^2} (1 - \cos(\theta))$$

$$\frac{\nu_i}{\nu_f} = \frac{h \nu_i}{m_e c^2} (1 - \cos(\theta)) + 1$$

Y obtenemos finalmente la expresión buscada

$$\nu_f = \frac{\nu_i}{\frac{h \nu_i}{m_e c^2} (1 - \cos(\theta)) + 1}$$

Problema 5: El efecto fotoeléctrico y el efecto Compton son dos fenómenos de interacción de la radiación con la materia. Realice una lista con las similitudes y diferencias de estos fenómenos de interacción de un fotón con un electrón.

Solución:

Efecto Fotoeléctrico	Efecto Compton
Son fenómenos de naturaleza cuántica.	
Son fenómenos donde interactúan la radiación con la materia.	
La energía del fotón incidente es $\approx 10^{-10}$ eV	La energía del fotón incidente es $\approx 10^4$ - 10^5 eV
En el estado final el electrón es clásico.	El electrón en el estado final es relativista.
Se debe considerar la energía de ligadura del electrón (≈ 11 eV)	Se puede considerar al e^- como libre
En el estado final no hay fotón	Hay un fotón dispersado en el estado final

Problemas propuestos

Problema 1: Encuentre la cantidad de movimiento de un fotón en eV/c y en $kg \cdot m/s$ para las siguientes longitudes de onda: 400 nm, 1 Å, 3 cm y 2 nm.

Problema 2: Los tubos de rayos X utilizados actualmente por los dentistas a menudo utilizan energías de aceleración de 80 keV . ¿Cuál es la longitud de onda mínima de los rayos X que producen?

Problema 3: Considere una onda EM plana de frecuencia ν incidiendo sobre un electrón libre en un blanco metálico. ¿Cómo es excitado el electrón por la onda EM desde el punto de vista clásico?

Problema 4: ¿Tiene masa un fotón de energía E ?

Problema 5: ¿Por qué el corrimiento Compton es independiente de los materiales que componen el dispersor?

Problema 6: ¿Se observa efecto Compton con luz visible? ¿Por qué?

Problema 7: Rayos X con un corrimiento de longitud de onda de $0,018 \text{ \AA}$ son dispersados por efecto Compton. Determinar el ángulo de entre los fotones incidentes y los dispersados.

Problema 8: Rayos X de longitud de onda $0,708 \text{ \AA}$ experimentan la dispersión Compton en parafina. Hallar la longitud de onda de los rayos X dispersados en las siguientes direcciones.

a) $\theta = \pi/2$

b) $\theta = \pi$

Problema 9: Rayos X de longitud de onda de $0,2 \text{ \AA}$ experimentan la dispersión Compton bajo un ángulo de 90° . Hallar:

a) La variación que experimentan estos rayos al dispersarse.

b) La energía de retroceso del electrón.

c) La cantidad de movimiento del electrón.

Problema 10: Radiación de $0,1 \text{ nm}$ de longitud de onda experimenta dispersión Compton en una muestra de carbono. Se observa la radiación dispersada en dirección perpendicular a la de incidencia. Hallar:

a) La longitud de onda de la radiación dispersada.

b) La energía cinética y la dirección de movimiento de los electrones.

c) Repetir lo anterior para el caso en que los fotones se dispersan según un ángulo de 60° respecto del eje horizontal.

Problema 11: a) Demostrar que un electrón libre no puede absorber un fotón y conservar en el proceso tanto el impulso como la energía.

¿Por qué en el efecto Compton el electrón puede ser considerado como libre?

Problema 12: En una dispersión Compton un electrón adquiere una energía cinética de $0,1 \text{ MeV}$ cuando un fotón de $0,5 \text{ MeV}$ de energía incide sobre él.

a) Determinar la longitud de onda del fotón dispersado, si el electrón se hallaba inicialmente en reposo.

b) Hallar el ángulo de dispersión del fotón respecto de la dirección de incidencia.

Problema 13: Si la máxima energía comunicada a un electrón en una dispersión Compton es 45 keV

¿Cuál es la longitud de onda del fotón incidente?

Problema 14: Un haz de RX de $0,3 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ sufre dispersión Compton de 60° . Hallar la longitud de onda del fotón dispersado y la energía del electrón después de la dispersión.

Problema 15: En una dispersión Compton, un fotón de energía $E_0 = h\nu_0$ es dispersado por un electrón libre de masa en reposo m . Si los rayos X incidentes tienen una longitud de onda de 10 pm , los fotones dispersados a cierto ángulo tienen una longitud de onda de $10,5 \text{ pm}$. Encontrar el momento (magnitud y dirección) del correspondiente electrón.

Problema 16: Un fotón cuya energía iguala la energía en reposo del electrón tiene una colisión Compton con un electrón. Si el electrón se desvía 40° respecto de la dirección original del fotón, hallar la energía del fotón dispersado.

CAPÍTULO 5

Modelos atómicos

Introducción

Desde el inicio de los tiempos, sucesivas generaciones se han encontrado con la tarea de dividir o romper un determinado objeto. Las acciones más elementales de supervivencia implican esa actividad. Un fruto que ha sido recolectado, un animal que ha sido cazado, etc. debe ser separado en pedazos para poder ingerir los alimentos que ellos proveen.

Fueron los antiguos griegos quienes dieron las primeras respuestas a una sencilla pregunta que seguramente muchas culturas se hicieron desde siempre. Si tenemos una manzana, la podemos dividir por la mitad, a ésta también la podemos dividir por la mitad y luego otra vez por la mitad, pero... ¿podemos continuar indefinidamente? ¿Hasta dónde se puede dividir un determinado cuerpo material, elemento o sustancia? Demócrito en el Siglo V a.C., luego Epicuro y otros filósofos propusieron que la materia no se puede dividir indefinidamente, sino que debe existir una “última” partícula básica indivisible que compone todas las sustancias. Intuyeron que era muy pequeña y la llamaron *Átomo* (literalmente, indivisible en griego), y crearon la que se conoció como *Escuela Atomista* griega que dominó el pensamiento científico-filosófico durante varios siglos.

No hubo progresos significativos en el conocimiento e interpretación sobre cómo estaban conformados los materiales ni como era esta partícula, la más pequeña posible, hasta fines del Siglo XVIII e inicios del Siglo XIX, cuando se retomaron las ideas de la Escuela Atomista para explicar las leyes químicas. Fueron los trabajos de los esposos franceses Antoine Lavoisier (1743-1794) y Marie-Anne Pierrette Paulze (1758-1836), y los del inglés John Dalton (1766-1844) quienes propusieron y probaron experimentalmente la ley de conservación de la masa en las reacciones químicas y los del italiano Amadeo Avogadro (1776-1856) quien estimó el número de partículas que constituían un gas a una determinada presión y temperatura, los que dieron un nuevo impulso al estudio de las componentes fundamentales de la materia. A su vez, Dalton en 1803 propuso un primer modelo atómico constituido por esferas diminutas indivisibles.

Con estos aportes se pudo establecer que cada elemento está constituido por átomos idénticos entre sí, pero éstos son diferentes a los de otro elemento de la naturaleza. En resumen, las propiedades de los cuerpos derivan de las propiedades atómicas. Esta conclusión fue brillantemente sintetizada por el ruso Dimitri Mendeleev (1834-1907) con su célebre *Tabla Periódica de los Elementos* quien pudo proponer una clasificación entre los elementos químicos conocidos en su época y prever la existencia de otros aún por descubrir.

A pesar de estos avances, la Ciencia a veces tiene retrocesos. Hacia finales del Siglo XIX hubo enconadas disputas entre un grupo de científicos que defendían la hipótesis atómica, dando a los átomos una identidad real, y otros que negaban su existencia y su rol fundamental como componentes últimos de la materia. Entre los más prominentes del primer grupo se destaca el físico austriaco Ludwig Boltzmann (1844-1906) quien desarrolló los trabajos pioneros en mecánica estadística, basada en el movimiento atómico, para explicar el comportamiento de los gases. Con estos conceptos hizo aportes fundamentales en termodinámica. En el segundo grupo sobresalen el químico ruso/alemán Wilhem Ostwald (1853-1932) y el austriaco Ernst Mach (1838-1916), quienes sostenían una hipótesis energética para explicar la mayoría de los fenómenos físicos prescindiendo de la idea del átomo.

Sin embargo, el concepto de átomo como último e indivisible “ladrillo” con que estaba constituida la materia “se cayó” y sufrió una dramática refutación cuando en 1897 el científico inglés Joseph J. Thomson (1856-1940) descubrió el electrón. De acuerdo con sus medidas del cociente carga/masa del electrón puso en evidencia que había una partícula más pequeña (con menor masa) que el átomo y que además poseía carga eléctrica.

Y, por lo tanto, había que volver a escribir la historia...

Esta nueva situación planteó grandes desafíos científicos. Como el átomo es eléctricamente neutro, la detección de una partícula con carga negativa, el electrón, implica que también debería existir una carga positiva en el interior del átomo. A su vez, el tamaño del átomo es mucho mayor que el electrón. En consecuencia, ¿cómo serían las características de esta carga positiva que “ocuparía” la mayor parte del átomo?

Y las preguntas surgían una tras otras. ¿Habría más sorpresas? ¿Habría otras partículas desconocidas en el átomo? ¿De qué material están hechas esas partículas? ¿Cómo el átomo se mantiene estable?

A su vez, en los primeros años del Siglo XX la irrupción de la Física Cuántica impulsada por Planck y Einstein trajo nuevas ideas y herramientas para encarar la explicación de un mundo cada vez más diminuto y difícil de comprender.

Por lo tanto, no debe sorprender que un frenesí de trabajos teóricos y experimentales, desarrollos de modelos e hipótesis más o menos plausibles se multiplicaran entre los investigadores de las universidades e instituciones científicas más destacadas.

Algunas propuestas de modelos atómicos como las realizadas por el descubridor del electrón J.J. Thomson en 1898 y por el físico neozelandés radicado en Inglaterra, Ernest Rutherford (1871-1937) en 1911 fracasaron debido a las evidencias experimentales que contradecían esas hipótesis.

Fue un discípulo de Rutherford, el físico danés Niels Bohr (1885-1962) quien en 1913 y a partir de pocos postulados basados en la mecánica cuántica, finalmente encontró un modelo exitoso para explicar el comportamiento del más simple de los átomos, el de Hidrógeno. A su vez, permitió la correcta interpretación de los espectros electromagnéticos de absorción y emisión de los gases.

Para átomos más complejos fue necesario modificar el modelo de Bohr. Vale mencionar, entre muchos otros, los aportes del físico alemán Arnold Sommerfeld (1868-1951) quien introdujo consideraciones relativistas y del austríaco Erwin Schrödinger (1887-1961) quien cambió completamente las hipótesis al modelar el átomo con un enfoque ondulatorio en lugar de corpuscular.

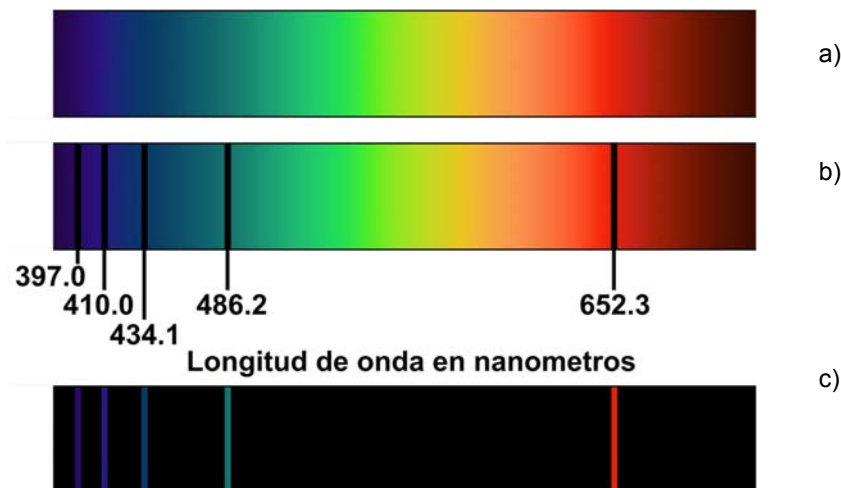
De esta búsqueda apasionante y de la ebullición de ideas que se desarrollaron para encontrar un modelo del átomo nos ocuparemos en las secciones siguientes.

Espectros de Gases

Antes de discutir las diferentes propuestas sobre modelos atómicos, haremos una introducción sobre el espectro electromagnético de los gases, ya que jugó un rol decisivo en la comprensión de la naturaleza del átomo.

A partir de los trabajos pioneros del físico alemán Joseph Fraunhofer (1787-1826) y luego del alemán Gustav Kirchhoff (1824-1887) eran bien conocidos los espectros de absorción y de emisión de muchos gases. Fraunhofer inventó el espectroscopio en 1814 y con este instrumento estudió en detalle la luz proveniente del sol y de las estrellas, como así también sólidos y líquidos incandescentes y gases en combustión. Observó que los sólidos y líquidos presentaban espectros continuos, mientras que los gases presentaban espectros discretos, con líneas de emisión o de absorción bien definidas y notoriamente separadas entre sí. La Fig. 5.1 a) muestra un espectro de emisión de un sólido, y los espectros de absorción y emisión del Hidrógeno Fig. 5.1 b) y c).

Figura 5.1



Nota. a) Espectro de emisión de sólidos y líquidos CONTÍNUO. b) Espectro de absorción del H, DISCRETO. c) Espectro de emisión del H, DISCRETO

Al comparar espectros de varios gases, rápidamente Fraunhofer se convenció que los mismos presentaban espectros distintos con líneas bien definidas en diferentes posiciones. Concluyó correctamente que los espectros brindaban una excelente herramienta para identificarlos ya que los mismos proveían un símil a una “huella digital” diferente para cada uno de ellos. De esta manera inauguró una nueva y poderosa rama científica, la *Espectroscopia*, que estudia la composición fisicoquímica de los materiales mediante el análisis de los espectros electromagnéticos en todas las longitudes de onda (visible, ultravioleta, rayos X, infrarrojo, radiofrecuencias, etc.). Asimismo, la Astronomía avanzó enormemente al poder estudiar la composición de las estrellas y planetas simplemente analizando con un espectroscopio la luz que proviene de ellos.

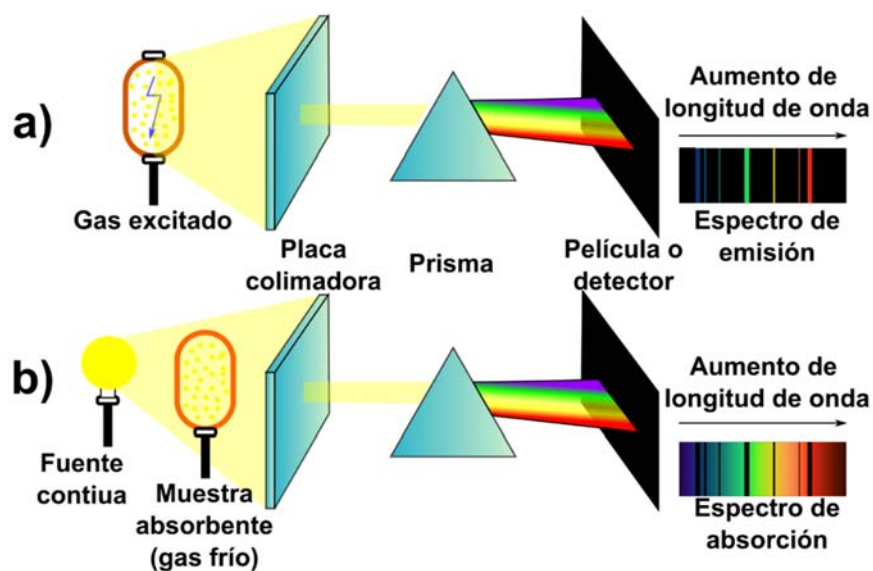
El espectroscopio

El espectroscopio es un instrumento que permite descomponer la radiación proveniente de una fuente luminosa mediante un prisma o una red de difracción. La luz se detecta en una pantalla, con una película fotográfica o, más recientemente, con cámaras digitales.

El dispositivo puede ser utilizado de dos maneras: a) Detectando directamente la luz que pasa a través del prisma o de la red de difracción proveniente de una fuente que contiene un gas excitado. En este caso se lo denomina “espectro de emisión”. b) la radiación proveniente de una fuente continua de luz blanca pasa por un gas frío y se la detecta luego de pasar por el prisma o por la red de difracción. En este caso se lo denomina “espectro de absorción”.

La Fig. 5.2 muestra un esquema muy simplificado de un espectroscopio en la configuración a) espectro de emisión b) espectro de absorción.

Figura 5.2



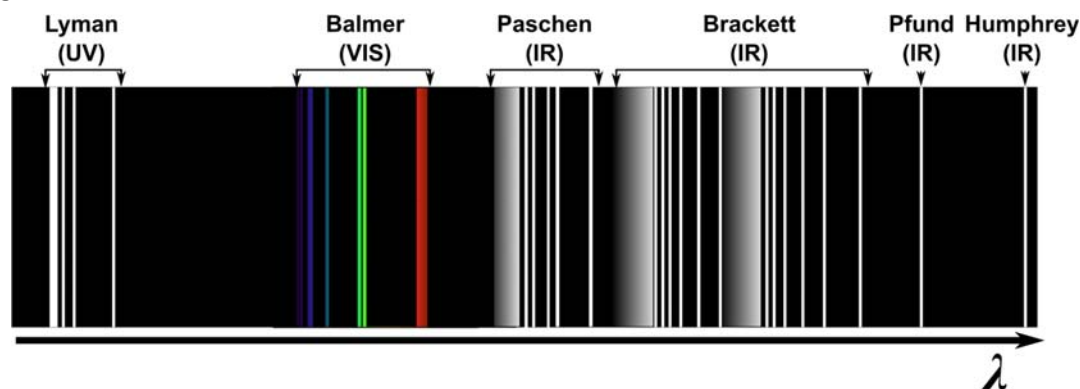
Nota. Espectroscopio: a) espectro de emisión b) espectro de absorción.

Obsérvese que el espectro de emisión presenta líneas brillantes en un fondo oscuro mientras que el de absorción presenta líneas oscuras sobre un fondo de colores. La ubicación de esas líneas en ambos espectros es exactamente la misma para un determinado gas, aunque es más difícil visualizarlas en el espectro de absorción como veremos más adelante.

Espectro de emisión del Hidrógeno (H)

De los varios espectros de los gases, observaremos en detalle el espectro de emisión del Hidrógeno (H) que se muestra en la Fig. 5.3. Veremos luego que el análisis del mismo ha sido una de las pruebas fundamentales para corroborar la validez del modelo de Bohr para el átomo de H.

Figura 5.3



Nota. Espectro de emisión del Hidrógeno (H)

La Fig. 5.3 muestra un conjunto de líneas discretas que se hallan agrupadas en diferentes regiones del espectro electromagnético. Estas líneas dentro cada región no están equiespaciadas, sino que la separación entre vecinas aumenta para longitudes de onda mayores. Así, se pueden observar distintas “series” de líneas en la zona del ultravioleta, visible e infrarrojo que se identifican con el nombre de sus descubridores: Lyman en el UV, Balmer en el visible y Paschen, Brackett, Pfund y Humphreys en el IR.

Hacia fines del Siglo XIX y principios del Siglo XX se conocían varias de estas series para el Hidrógeno y también para los espectros de otros gases, pero no había una explicación sobre su origen ni tampoco leyes que las puedan describir.

Sin embargo, se encontraron algunas fórmulas empíricas que ajustaban la posición de cada línea en las series espectrales. El maestro de escuela suizo y aficionado a las ciencias, Johann

Balmer (1825-1898) fue el primero en proponer una fórmula empírica para la serie de líneas en la zona visible del espectro del Hidrógeno:

$$\lambda = \frac{3645,6 n^2}{n^2 - 4} \quad (5.1)$$

donde $n = 3, 4, 5, \dots$ y λ (longitud de onda) está medida en Angstrom (10^{-10}m)

Posteriormente, con los trabajos del sueco Johannes Rydberg (1854-1919) y el suizo Walter Ritz (1878-1909), la fórmula de Balmer puede ser reescrita para describir todas las demás series del espectro del Hidrógeno

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (5.2)$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$, $k = (n + 1), (n + 2), (n + 3), \dots$ y $R_H = 1,096 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ es la constante de Rydberg.

Esta expresión permite calcular la longitud de onda λ para una línea espectral de las series del H, tomando distintos valores de n y k . Para valores de k grandes las líneas están cada vez más próximas entre sí y convergen a una longitud de onda λ diferente para cada serie.

La Tabla 5.1 muestra las características de las series del H obtenidas a partir de la fórmula de Rydberg-Ritz (Ec. (5.2)).

Tabla 5.1

Líneas espectrales Átomo de Hidrógeno

Serie	Año	longitud de onda (λ)	n	k	convergencia (λ en nm)
Lyman	1916	ultravioleta	1	>1	91
Balmer	1885	visible, ultravioleta cercano	2	>2	365
Paschen	1908	infrarrojo	3	>3	821
Brackett	1922	infrarrojo	4	>4	1459
Pfund	1924	infrarrojo	5	>5	2280

El electrón

El descubrimiento del electrón por parte de J.J. Thomson en 1897 fue fundamental para cambiar la concepción de considerar al átomo como indivisible. Luego de repetidas medidas en experiencias con tubos de rayos catódicos encontró la relación entre la carga y la masa (e/m) de una partícula mucho más pequeña que el átomo y que estaba presente en todos los elementos estudiados, por lo tanto, concluyó que era intrínseca del interior del átomo y un elemento constitutivo de la materia. A pesar de la incredulidad inicial del mundo científico que se resistió a abandonar la idea del átomo como la identidad última de la naturaleza, evidencias posteriores confirmaron las afirmaciones de Thomson. Luego, en 1909, R. Millikan logró determinar la carga

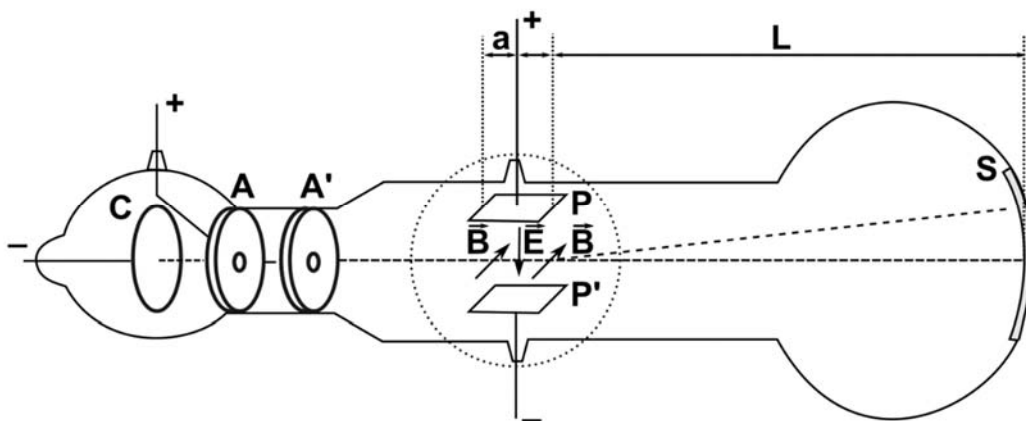
y la masa en forma independiente, confirmando experimentalmente en forma irrefutable la existencia del electrón y medir sus propiedades con gran precisión.
De estos dos trabajos seminales nos ocuparemos a continuación:

Experimento de rayos catódicos de J.J. Thomson

El dispositivo utilizado por Thomson en su experimento de rayos catódicos se muestra en la Fig. 5.4. En un tubo en el que se ha hecho vacío se ubican dos electrodos, cada uno de ellos conectados a bornes positivo y negativo de una fuente que produce una diferencia de potencial elevada. En el esquema se identifican con **C** (cátodo) y **A** (ánodo). De esta manera, las partículas con carga negativa se aceleran moviéndose desde **C** a **A**. Una ranura **A'** se coloca junto al ánodo para colimar las partículas. A continuación, se colocan dos placas **P** y **P'** cargadas positiva y negativamente como las placas de un capacitor plano de caras paralelas que produce un campo eléctrico **E**, y un imán (o bobinas) que produce un campo magnético **B** perpendicular respecto de **E**. Al final del dispositivo se ubica una pantalla fosforescente **S** para detectar el impacto de los electrones.

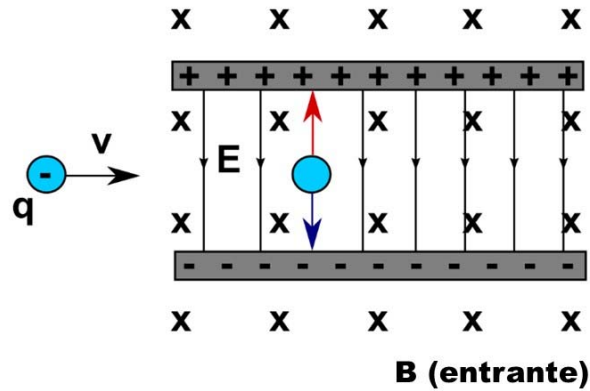
El efecto sobre las cargas negativas que ingresan al sector que ocupa el capacitor cargado y al campo magnético cruzado se muestra en detalle en la Fig. 5.5.

Figura 5.4



Nota. Dispositivo utilizado por Thomson en su experimento de rayos catódicos

Figura 5.5



Nota. Carga negativa en movimiento en un capacitor cargado y campo magnético cruzado

La fuerza total sobre la partícula es la suma de las fuerzas eléctrica (hacia arriba) y magnética (hacia abajo) indicadas en la figura y está dada por la expresión de Lorentz:

$$\vec{F}_L = q \cdot \vec{E} + q \vec{v} \times \vec{B} \quad (5.3)$$

siendo \vec{F}_L la fuerza de Lorentz, \vec{E} el campo eléctrico, \vec{B} el campo magnético, q la carga y v la velocidad de la partícula.

Variando externamente las cargas en el capacitor, y por lo tanto el campo \vec{E} , y los imanes y por lo tanto la intensidad del campo \vec{B} , se pueden controlar el valor de las fuerzas. En caso de que la Fuerza eléctrica sea mayor que la magnética, la partícula deflectará hacia arriba. En caso contrario lo hará hacia abajo. En el caso que ambas fuerzas sean iguales, la partícula continuará horizontalmente con velocidad constante.

Como las fuerzas son colineales, se puede simplificar el problema tomando sus módulos y queda:

$$F_e = q E \quad F_m = q v B \quad (5.4)$$

Si $F_e = F_m$ queda $q E = q v B$, y entonces $v = E/B$, el dispositivo funciona como un selector de velocidades. La partícula se desplazará con velocidad constante v , a lo largo del capacitor.

Thomson ajustó el dispositivo de modo de medir con precisión la velocidad horizontal con que se mueven las partículas negativas.

$$v_x = \frac{E}{B} = \frac{V}{B d} \quad (5.5)$$

donde V es la diferencia de potencial entre las placas del capacitor que están separadas una distancia d .

Este ya es un primer resultado importante del experimento de Thomson. Demostró que los rayos catódicos sufrían una deflexión cuando eran sometidos a campos eléctricos y magnéticos y logró medir la velocidad con que se desplazaban. En las mejores condiciones experimentales, con el mejor vacío en el tubo que pudo obtener, el resultado que encontró es que v_x es

aproximadamente $1/3$ de la velocidad de la luz (c). Por lo tanto, confirmó su hipótesis que los rayos catódicos eran partículas cargadas negativamente descartando la posibilidad que fueran ondas electromagnéticas (luz) como suponían otras teorías científicas.

A continuación, quitó el imán dejando el capacitor cargado. Por lo tanto, el haz de partículas solo queda sometida al campo \vec{E} y a una fuerza eléctrica F_e vertical. Por lo tanto, serán deflectadas hacia arriba siguiendo una trayectoria parabólica como se muestra en la Fig. 5.6.

En este caso, la velocidad de las partículas en el eje vertical v_y se puede calcular como:

$$F_e = q E = m a_y \quad (5.6)$$

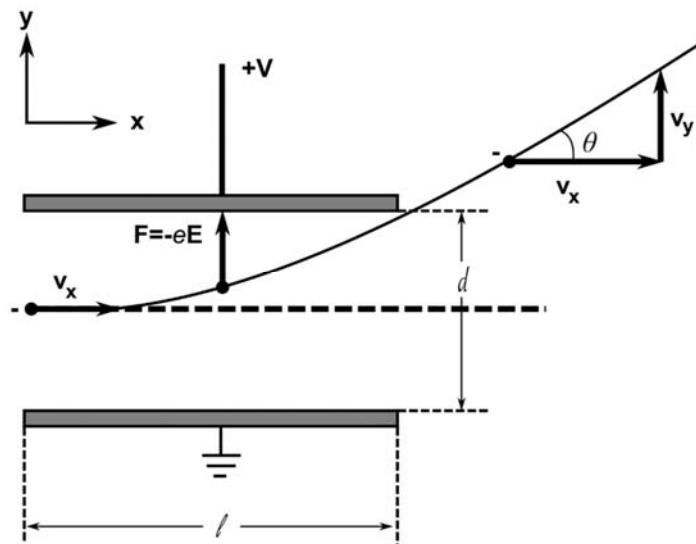
donde m es la masa y a_y la aceleración vertical.

A su vez,

$$E = \frac{V}{d} \quad a_y = \frac{v_y}{t} \quad (5.7)$$

donde t es el tiempo que tarda una partícula en recorrer la distancia l entre la entrada y la salida del capacitor. Por lo tanto, $t = l/v_x$.

Figura 5.6



Nota. Trayectoria de la partícula cargada negativamente en un capacitor

Operando con las Ecs. (5.6) y (5.7), se obtiene v_y

$$v_y = \frac{V l q}{m v_x d} \quad (5.8)$$

Por último, el ángulo de deflexión θ (para ángulos pequeños) de las partículas se puede calcular como:

$$\tan \theta \cong \theta = \frac{v_y}{v_x} \quad (5.9)$$

Reemplazando las Ecs. (5.5) y (5.8) en (5.9) queda:

$$\theta = \frac{v_y}{v_x} = \frac{B^2 l d}{V} \left(\frac{q}{m} \right) \quad (5.10)$$

Y de esta ecuación se puede obtener la relación $\left(\frac{q}{m} \right)$ de la partícula negativa que pasa a través del capacitor. Denominamos a q como e (carga del electrón) y a m como m_e (masa del electrón)

$$\left(\frac{e}{m_e} \right) = \frac{V \theta}{B^2 l d} \quad (5.11)$$

Es notable como Thomson logró calcular, a partir de esta ecuación, la relación entre cantidades extraordinariamente pequeñas (e/m_e) con los datos macroscópicos perfectamente medibles en su laboratorio como lo son: V (diferencia de potencial entre las placas del capacitor), θ (ángulo de deflexión de las partículas), B (campo magnético aplicado), l (longitud del capacitor) y d (separación entre las placas).

El valor que obtuvo Thomson para (e/m_e) fue $1,1 \cdot 10^{11}$ C/kg, diferente al aceptado actualmente que es de $1,75 \cdot 10^{11}$ C/kg, pero coincidente en el orden de magnitud. Por otra parte, por experimentos de electrólisis química, ya en esa época se conocía el valor de (q/m) para los iones de Hidrógeno: $(q/m) = 9,6 \cdot 10^7$ C/kg. Si bien no pudo medir la carga del electrón, por otros métodos logró probar que la carga e del electrón y la carga q de los átomos de H ionizados eran muy similares.

Por lo tanto, comparando las relaciones (e/m_e) y (q/m) concluyó que ¡había encontrado una partícula cuya masa es más de 1000 veces menor que el átomo más pequeño! Además, al repetir la experiencia con distintos materiales del cátodo encontró la misma relación (e/m_e) , que también era igual a la observada en el efecto fotoeléctrico.

¡Luego no tuvo dudas que esta partícula (*electrón*) formaba parte constitutiva de toda la materia y que había un mundo nuevo dentro del átomo!

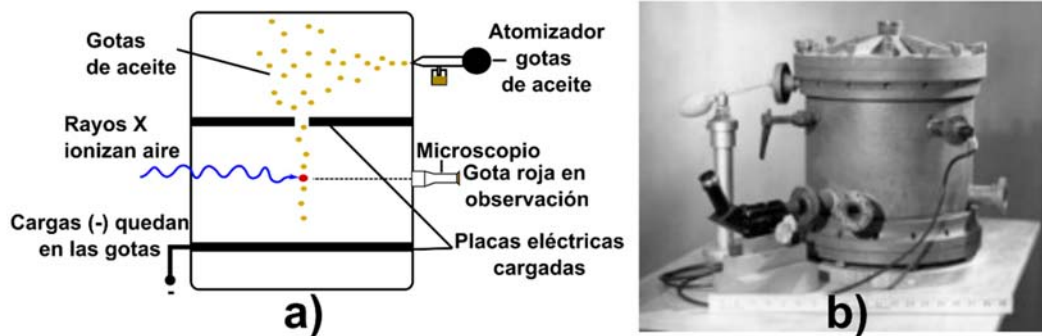
Joseph John Thomson obtuvo el Premio Nobel de Física en 1906. Según la Academia Sueca “por sus investigaciones teóricas y experimentales sobre la conducción de la electricidad a través de los gases y el descubrimiento del electrón”.

Experimento de la gota de aceite de R. Millikan

Luego de la sorpresa y la resistencia inicial, la Ciencia asumió que el experimento de rayos catódicos de Thomson en 1897 y la explicación de Einstein del efecto fotoeléctrico en 1905 eran pruebas contundentes de la existencia del electrón. Sin embargo, aún quedaba por determinar en forma separada su masa y su carga ya que solo se conocía la relación (e/m_e) . Esta tarea pendiente la resolvió Robert Millikan y su alumno Harvey Fletcher en la Universidad de Chicago en 1909/1910.

El experimento de Millikan se muestra en la Fig. 5.7.

Figura 5.7



Nota. Dispositivo de la gota de aceite utilizado por Millikan. a) esquema experimental. b) instrumento original. Reproducido de *Aparato diseñado por Millikan para su experimento con la gota de aceite (1909-1910)*. Autor: desconocido, Fuente: <http://chem.ch.huji.ac.il/~eugeniik/history/millikan.html> (1909-1910) Creative Commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Millikan%E2%80%99s_oil-drop_apparatus_1.jpg)

Gotas de aceite son rociadas por un atomizador y se depositan en la cara superior de un capacitor plano de placas paralelas separadas una distancia d , que posee un pequeño orificio por el cual pueden caer algunas de ellas. Las gotas que caen son iluminadas lateralmente por una fuente de Rayos X de alta energía que provoca la ionización del aire. Los electrones liberados se adhieren al aceite y las gotas quedan cargadas negativamente. Mediante un microscopio con una escala graduada ubicado transversalmente a la iluminación se observa el desplazamiento de las gotas. En el análisis nos limitaremos a la descripción del comportamiento de una única gota de masa m y carga q .

Inicialmente, el capacitor está descargado y por lo tanto, las gotas de aceite caen por gravedad. En ese caso, las fuerzas que actúan sobre la gota son la fuerza de gravedad y la fuerza viscosa del aire dada por la Ley de Stokes. Luego se conecta el capacitor a un alto voltaje, lo cual crea un campo E entre las placas del capacitor. Por lo tanto, a las fuerzas anteriores se le agrega una tercera fuerza eléctrica.

Ambas situaciones se muestran en la Fig. 5.8.

Caso a) Sin campo eléctrico E . Las gotas se desplazan a velocidad constante v hacia abajo debido al equilibrio de la fuerza viscosa del aire F_v y la fuerza gravitatoria F_g . Es decir:

$$6\pi r \eta v = m g \quad (5.12)$$

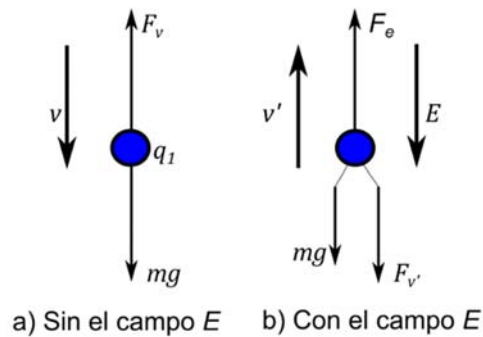
donde r es el radio, v la velocidad de desplazamiento y m la masa de la gota, η la viscosidad del aire y g la aceleración de la gravedad.

Caso b) Con campo eléctrico E . La fuerza eléctrica F_e va hacia arriba ya que las partículas de aceite cargadas negativamente son atraídas por la placa superior del capacitor cargada positivamente, el peso es como siempre hacia abajo. Ahora la fuerza de Stokes va hacia abajo,

oponiéndose al movimiento, ya que las partículas de aceite se mueven hacia arriba con velocidad constante v' si el campo E es ajustado convenientemente para que las tres fuerzas estén en equilibrio. Por lo tanto:

$$q E = 6 \pi r \eta v' + m g \quad (5.13)$$

Figura 5.8



Nota. Esquema de fuerzas sobre la gota de aceite en el experimento de Millikan, a) sin campo eléctrico, b) con campo eléctrico

A partir de las Ecs. (5.12) y (5.13) se puede determinar el valor de q . Veamos cómo:

Podemos expresar la masa de la gota como el producto de la densidad del aceite (ρ) por su volumen (suponiendo ésta esférica), por lo tanto, la Ec. (5.12) se puede escribir:

$$6 \pi r \eta v = \left(\frac{4}{3}\right) \pi r^3 \rho g \quad (5.14)$$

De aquí podemos obtener el radio de la gota:

$$r = \sqrt{\frac{9 \eta v}{2 \rho g}} \quad (5.15)$$

Reemplazando la Ec. (5.12) en (5.13) queda:

$$q E = 6 \pi r \eta (v' + v) \quad (5.16)$$

Usando que el campo eléctrico $E = V/d$, donde V es la diferencia de potencial entre las placas del capacitor y d la distancia entre las mismas, podemos despejar el valor de q .

$$q = \frac{6 \pi r \eta d (v' + v)}{V} \quad (5.17)$$

Por lo tanto, la carga total de la gota q queda determinada midiendo cuidadosamente las velocidades de desplazamiento de la gota (v y v') en ambas situaciones, conociendo los valores de la diferencia de potencial (V) y de la distancia d entre placas del capacitor, la viscosidad del aire η y calculando el radio r de la gota con la ecuación (5.15).

La experiencia puede repetirse muchas veces solo conectando o desconectando el capacitor a la batería. Por lo tanto, las velocidades de desplazamiento hacia arriba o hacia abajo de la gota pueden medirse con precisión. Además, Millikan realizó el experimento en numerosas oportunidades y por supuesto, la carga total de las gotitas de aceite no era siempre la misma. Sin embargo, sí encontró que en todos los casos, éstas eran un múltiplo entero de veces una cantidad básica elemental de carga, que supuso, con acierto, era la carga del electrón e . Es decir:

$$q = n e \quad n = 1, 2, 3, 4 \dots \quad (5.18)$$

El valor hallado por Millikan es muy parecido al valor actual aceptado que puede obtenerse por otros métodos.

$$e = 1,6065 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

También, a partir de la relación hallada por Thomson de (e/m_e) pudo calcular la masa del electrón:

$$m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

que es aproximadamente 1/1800 la masa del átomo de Hidrógeno, confirmando que el electrón es una partícula subatómica.

Además, demostró que ¡la carga eléctrica estaba cuantizada! lo cual fue una reafirmación de las hipótesis de la Teoría Cuántica

Robert Andrews Millikan obtuvo el Premio Nobel de Física 1922. Según la Academia Sueca: “por su trabajo sobre la carga elemental de la electricidad y sobre el efecto fotoeléctrico”.

Conocimientos “*a priori*” sobre el átomo

Antes de discutir los distintos modelos propuestos para el átomo, enumeramos algunas de las características que sobre él se conocían a partir de los experimentos y las evidencias disponibles a fines del Siglo XIX y principios del Siglo XX.

- A partir del conocimiento de la densidad de un cuerpo sólido, el peso atómico y el número de Avogadro, se podía estimar que el diámetro atómico es aproximadamente 10^{-10}m . Este valor también surge de la teoría cinética de los gases que se desarrolló en la segunda mitad del Siglo XIX con los trabajos de Maxwell, Clausius y Boltzmann.

- Con el descubrimiento en 1897 de J.J Thomson del electrón, partícula cargada negativamente mucho más pequeña que átomo, quedaba claro que éste no era la última división de la materia, sino que había “algo más” dentro de él.

- A su vez, el hecho de que los elementos en su estado natural son neutros, los átomos que los componen deben tener en su interior igual número de cargas negativas que positivas.

- Con la bien establecida teoría electromagnética de Maxwell, se sabía que una carga acelerada emite radiación. Como veremos más adelante, esta fue una prueba crucial para descartar alguno de los modelos posibles del átomo.

Modelos Atómicos

Modelo Atómico de Dalton

Por razones históricas merece mencionarse el primer modelo atómico con una base científica propuesto por John Dalton en varios trabajos desarrollados entre 1803 y 1808.

En él establecía que la materia está constituida por partículas esféricas pequeñas llamadas átomos, que son indivisibles y que no se pueden destruir. Los átomos de un mismo elemento son iguales entre sí y por lo tanto tienen las mismas propiedades, mientras que los átomos de diferentes elementos tienen distinta masa. Los átomos de un elemento no se dividen, aun cuando reaccionen químicamente con átomos de otro elemento y se pueden combinar en distintas proporciones para formar compuestos diferentes.

Si bien este modelo fue aceptado por décadas, mostraba algunos problemas y fue descartado completamente a fines del Siglo XIX al no poder explicar los rayos catódicos, la radioactividad y sobre todo la existencia de los electrones.

Modelo Atómico de Thomson (modelo del “budín de pasas”)

El trabajo de Thomson que mostró la existencia del electrón fue fundamental para la evolución de las ideas en Física y Química. Al contradecir la creencia generalizada del átomo inmutable e indivisible provocó el rechazo inicial de la comunidad científica. Sin embargo, la evidencia experimental fue finalmente aceptada y obligó a repensar nuevamente toda la estructura con la que estaba constituida el universo.

En su experimento con rayos catódicos, Thomson logró medir la relación carga/masa (e/m_e) del electrón y demostró que existía una partícula 1000 veces más pequeña que el átomo más pequeño, el de Hidrógeno. Asimismo, notó que (e/m_e) es independiente del material del cátodo y es la misma que se observa en el efecto fotoeléctrico. Por lo tanto, mostró que estas partículas formaban parte de toda la materia y no de un elemento en particular. En consecuencia, concluyó acertadamente que existía un mundo subatómico y se propuso investigarlo con más profundidad.

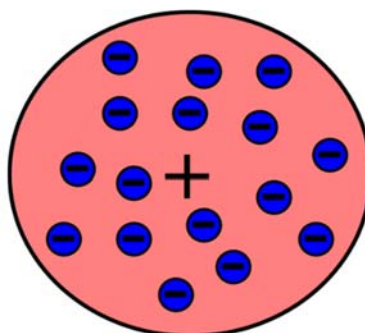
Así, en 1898 planteó un modelo atómico que contemplaba los datos experimentales que había obtenido en el laboratorio. Teniendo en cuenta que el comportamiento eléctrico del átomo es neutro y que el electrón con carga negativa es mucho más pequeño, supuso que la carga positiva debería ocupar la mayor parte del volumen del átomo y concentrar la casi totalidad de su masa.

Un esquema de su propuesta se muestra en la Fig. 5.9. El átomo tiene forma esférica cuyo diámetro es aproximadamente 10^{-10} m. La carga positiva se distribuye en forma continua y los electrones están uniformemente distribuidos en el volumen siendo la suma de la carga positiva y las negativas igual a cero. Para el átomo en su nivel más bajo de energía, los electrones están fijos en sus posiciones. Cuando el átomo es excitado, por ejemplo, cuando aumenta la temperatura, los electrones vibran alrededor de sus posiciones de equilibrio.

De acuerdo a la tradición culinaria de su país, Thomson llamó a su modelo con el nombre de “*budín de pasas*”, ya que hacía recordar al típico pastel inglés donde la carga positiva representa la masa del pastel y los electrones las pasas de uva que se distribuyen en él.

De esta forma se satisfacían algunos de los requerimientos físicos que debía cumplir la descripción del átomo: carga total neutra, los electrones interactúan entre sí y con la carga positiva de acuerdo a las fuerzas de repulsión/atracción establecidas por la Ley de Coulomb y al vibrar en sus posiciones de equilibrio, por ser una carga acelerada emiten radiación de acuerdo a la teoría electromagnética de Maxwell.

Figura 5.9



Nota. Esquema del modelo atómico de Thomson: “budín de pasas”

Sin embargo, a pesar de que era una buena aproximación inicial a la comprensión del universo atómico, pronto el modelo de Thomson mostró sus falencias. La más importante es que no podía explicar la emisión o absorción de los gases evidenciadas de manera inequívoca por sus espectros electromagnéticos.

Había que seguir investigando....

Experimento de Rutherford, Marsden y Geiger

En 1908 Ernest Rutherford obtuvo el Premio Nobel de Química. Según la Academia Sueca: “por sus investigaciones en la desintegración de los elementos y en la química de las sustancias radioactivas”. Fue una sorpresa para él pues toda la vida se consideró un Físico, pero en esos años al estudio de los elementos se lo consideraba solamente parte de la Química. Este apreciado lauro no significó la culminación de su carrera, sino por el contrario fue un gran aliciente para encarar nuevos desafíos. Y sin duda, desentrañar los secretos del átomo era uno de ellos.

Además de sus extraordinarias dotes personales como científico, Rutherford tenía la virtud de rodearse de jóvenes brillantes con los que encaraba las investigaciones que estaban en las fronteras del conocimiento. Dos de ellos fueron el alemán Hans Geiger (1882-1945) y el inglés Ernest Marsden (1889-1970). Marsden era un alumno de grado de la Universidad de Manchester

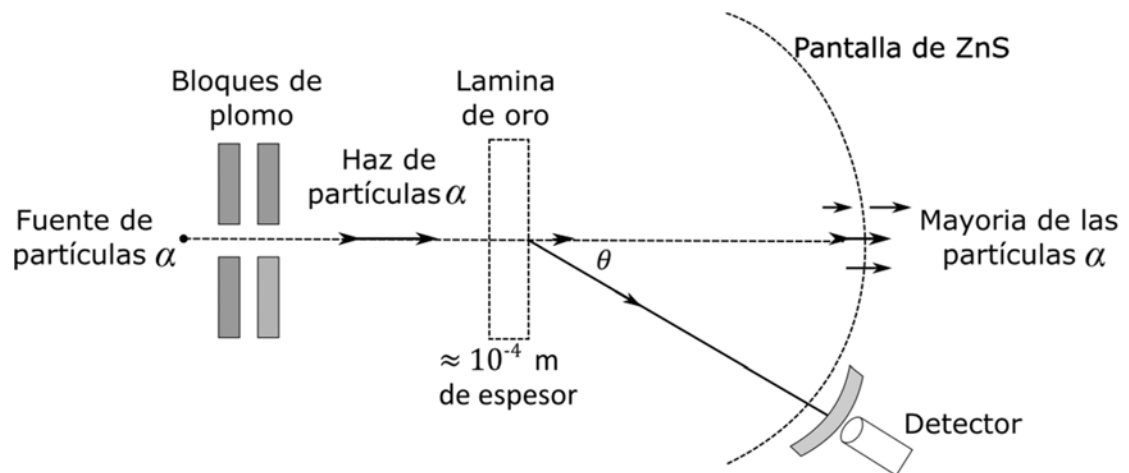
y Rutherford quien era el responsable del laboratorio y Geiger, que era su supervisor, le propusieron que estudiara la dispersión de partículas α por láminas delgadas de metal.

A continuación, haremos un resumen de la experiencia Rutherford, Marsden y Geiger. El esquema experimental se muestra en la Fig. 5.10.

Partículas α , que poseen carga positiva, provenientes de una fuente radioactiva emisora son colimadas por una pantalla de plomo con un pequeño orificio de forma tal que un pequeño haz de partículas bien direccionado impacta sobre una delgada lámina de metal. En este caso, una lámina de oro de un décimo de milímetro (10^{-4}m) de espesor. Como detector se utiliza una pantalla de sulfuro de zinc (ZnS) que tiene la propiedad que al ser impactado por partículas α produce un pequeño destello que puede ser fácilmente observado. El detector puede ser desplazado en forma continua para verificar la dispersión de las partículas en diferentes ángulos.

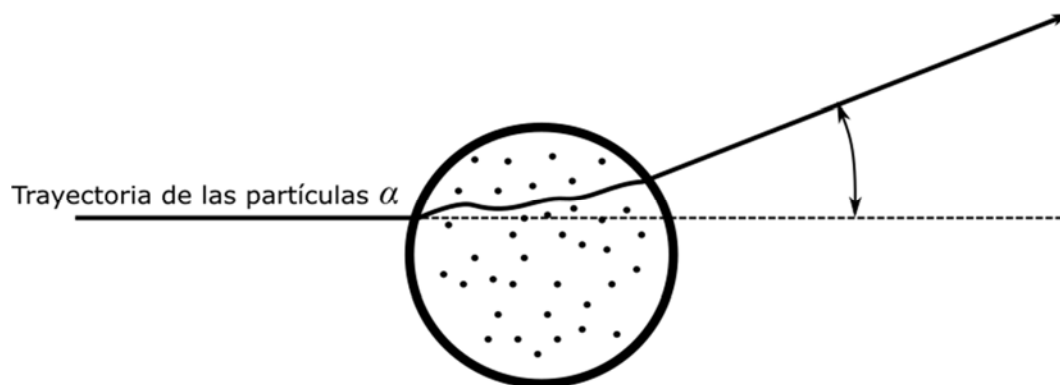
Como era de esperar, la mayoría de las partículas α eran dispersadas en muy pequeños ángulos, del orden de 10^{-4} rad. Esto estaba en concordancia con el modelo atómico de Thomson. Como se ve en la Fig. 5.11 las partículas sufren pequeñas dispersiones debida a las interacciones coulombianas con las cargas positivas y negativas del átomo.

Figura 5.10



Nota. Experiencia de Rutherford, Marsden y Geiger

Figura 5.11



Nota. Dispersión de partículas α por un átomo según el modelo de Thomson

Sin embargo, al ubicar el detector en ángulos cada vez mayores también se observaban partículas α . La sorpresa fue mayúscula, cuando para ángulos muy grandes, de 90° o más, e incluso para ángulos de 180° también el detector acusaba el impacto de unas pocas partículas, pero claramente identificables. Esto significa que ¡había algunas partículas α que “rebotaban” en el átomo y retrocedían!

Los resultados estaban en completo desacuerdo con el modelo de Thomson y desconcertaban a los investigadores. Estos podrían interpretarse como si se disparara una bala de cañón a una tela muy fina... y en lugar de atravesarla, la bala se volviera hacia atrás.

Las evidencias que obtuvo Marsden fueron tan inesperadas que Rutherford dudó de ellas y de la capacidad del estudiante. Entonces le pidió a Geiger que ya era su colaborador experimentado, que revisara las medidas para encontrar el “error” que había cometido Marsden.

Pero no había error. La sorpresa de Rutherford fue aún mayor cuando Geiger le confirmó los resultados de Marsden. Había que encontrar una explicación y Rutherford se propuso hallarla....

Modelo Atómico de Rutherford

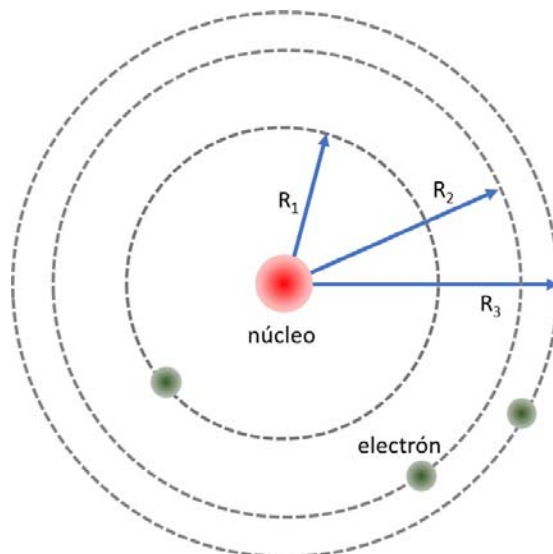
Rutherford cambió completamente la concepción del modelo de Thomson y en 1911 realizó una nueva propuesta para describir el átomo.

La manera que halló para interpretar los resultados de la experiencia de Marsden y Geiger era suponer que la carga positiva del átomo estaba concentrada en un núcleo central de dimensiones muy reducidas. Asimismo, conociendo que los electrones poseen una masa mucho más pequeña que el átomo, atribuyó al núcleo positivo la mayor parte de la masa de éste. Por otra parte, removió la idea de Thomson de los electrones en reposo distribuidos uniformemente como pasas en un budín, para ubicarlos moviéndose, describiendo órbitas circulares o elípticas

alrededor del núcleo. Por supuesto que la carga total negativa de los electrones debía ser igual a la carga positiva del núcleo para que el átomo fuera eléctricamente neutro.

La Fig. 5.12 muestra un esquema del modelo de Rutherford para el átomo, que se asemeja a nuestro sistema planetario donde el Sol (núcleo) ocupa el centro y los planetas (electrones) giran alrededor de él.

Figura 5.12



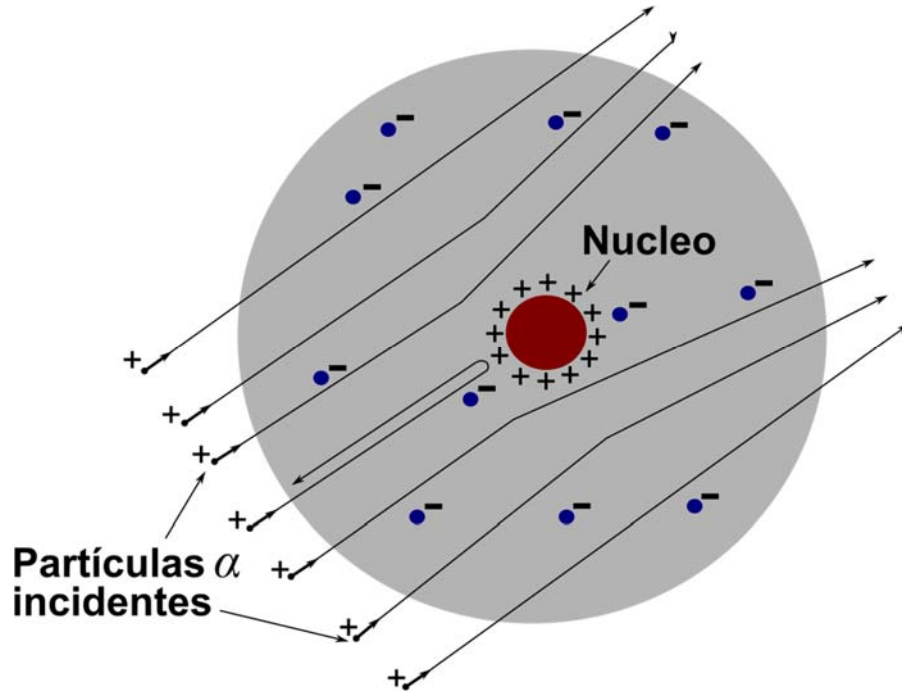
Nota. Modelo atómico de Rutherford

De este modo podía explicar que las partículas α con carga positiva fueran desviadas por repulsión coulombiana por la carga positiva del núcleo. En particular, aquellas cuya trayectoria incida directamente sobre la posición del núcleo fueran rechazadas por éste y "reboten" hacia atrás en un ángulo de 180° . La Fig.5.13 ilustra un esquema de las suposiciones de Rutherford y de la dispersión debida a núcleo central positivo.

Asimismo, el hecho que los electrones se muevan a una cierta velocidad orbitando alrededor del núcleo impide que colapsen inmediatamente sobre él por atracción coulombiana como sería el caso de los electrones en reposo.

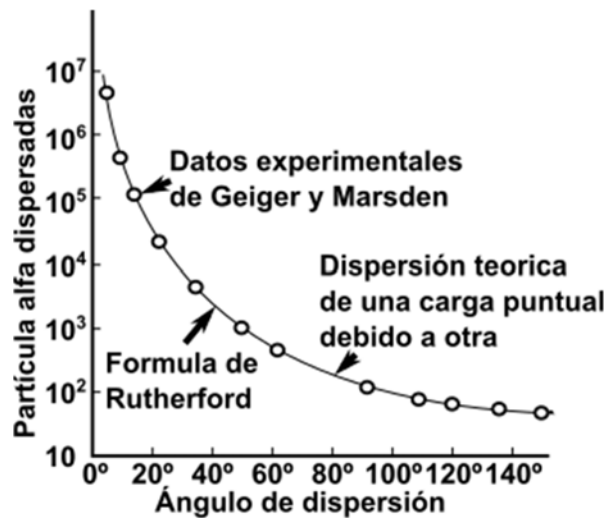
Con este modelo, suponiendo que las fuerzas coulombianas son las responsables de las interacciones entre las partículas α y el núcleo y haciendo consideraciones mecánicas de conservación de la energía y la cantidad de movimiento en esa interacción, Rutherford pudo estimar teóricamente los ángulos de dispersión de las partículas α que coincide asombrosamente con las medidas experimentales de Marsden y Geiger (Ver Fig. 5.14).

Figura 5.13



Nota. Dispersión de partículas α debida a un núcleo central con carga positiva

Figura 5.14

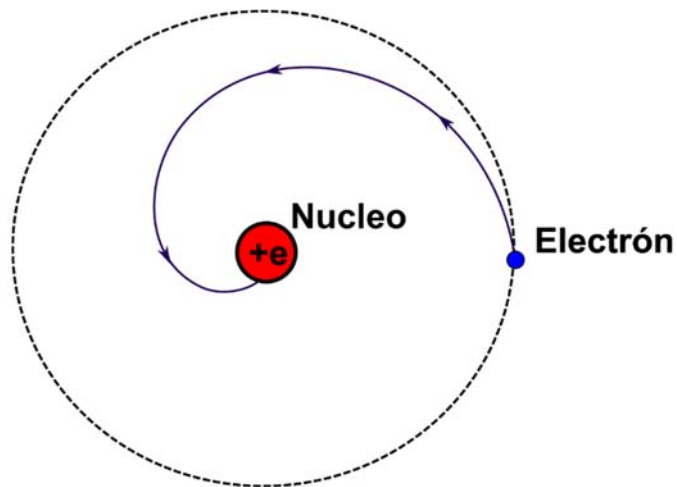


Nota. Dispersión de partículas α según los cálculos teóricos de Rutherford y las medidas experimentales de Marsden y Geiger

A pesar del enorme avance del aporte de Rutherford para comprender la naturaleza del átomo, el modelo mostró algunas carencias y otras inconsistencias. Entre las carencias puede mencionarse que no logra explicar los espectros de emisión y absorción de los gases, que

continuaban siendo una incógnita. La inconsistencia más evidente surge de la teoría electromagnética clásica de Maxwell. Según ésta, una carga en movimiento emite radiación y por lo tanto pierde energía. En consecuencia, los electrones que son cargas negativas en movimiento deberían emitir radiación electromagnética y no podían permanecer estables en sus órbitas, sino que al perder energía describirían trayectorias cada vez más internas hasta colapsar en el núcleo, como muestra la Fig. 5.15. Para las dimensiones diminutas del átomo, el tiempo de colapso es extremadamente pequeño, del orden de 10^{-12} seg. Esto evidentemente no sucede en la realidad.

Figura 5.15



Nota. Colapso del electrón sobre el núcleo según la teoría electromagnética de Maxwell

Quedaba claro que era necesario seguir profundizando las investigaciones para alcanzar un modelo razonable que describa el comportamiento del átomo. En esos años que Rutherford y sus colaboradores se esforzaban para vencer los obstáculos que se presentaban, llegó a trabajar a su laboratorio un joven danés llamado Niels Bohr...

Modelo Atómico de Bohr

Niels Bohr era un joven físico danés que tras doctorarse en Copenhague en 1911 obtuvo una beca para perfeccionarse en Inglaterra. Tras un breve paso por Cambridge en el laboratorio de Thomson, llegó a Manchester y se incorporó al grupo liderado por Rutherford, quien una vez más dio muestra de su habilidad para rodearse de talentos. Eran momentos de gran ebullición científica ya que estaba en pleno desarrollo las ideas y las hipótesis sobre el átomo y sus secretos, con éxitos y fracasos.

Bohr se dio cuenta en poco tiempo que para salir del laberinto había que explorar nuevos caminos. Hasta allí, los fundamentos teóricos de los modelos atómicos estaban basados en la Física Clásica de Newton y Maxwell. Pero Bohr ya pertenecía a una nueva generación que estaba creciendo científicamente influido por las contribuciones de Planck, Einstein y los nuevos conceptos de la Física Cuántica. Y decidió continuar por allí...

Con la gran cantidad de datos experimentales, medidas precisas, espectros de diversos materiales, hipótesis y conjeturas con que contaba en el laboratorio de Rutherford y la posibilidad de discutir sus propuestas con los mejores científicos de su época, Bohr trabajó dos años para armar el rompecabezas hasta que finalmente en 1913 presentó su modelo de átomo para el más simple de los elementos, el Hidrógeno (H).

Para ello perfeccionó el modelo de Rutherford. Conservó la hipótesis del "sistema planetario" con un núcleo central positivo y un electrón orbitando circularmente alrededor de él, pero con restricciones a la Física Clásica incorporando los conceptos cuánticos de la emisión de radiación de Planck y del fotón de Einstein.

El genio de Bohr se manifestó claramente al establecer solo tres postulados simples para justificar su propuesta, pero que se mostraron suficientes y poderosos para explicar correctamente las evidencias experimentales que se conocían sobre el átomo de H.

Primer Postulado: *en el átomo existen ciertas órbitas estables y discretas en las cuales el electrón gira sin radiar.*

Con esta hipótesis cuántica limita la teoría electromagnética de Maxwell suponiendo que no es válida en el interior de los átomos ya que postuló que la carga en movimiento no emite radiación. Sin embargo, utiliza la teoría clásica de Newton al considerar que la fuerza centrípeta necesaria para que el electrón se mantenga en movimiento en una órbita alrededor del núcleo está dada por la fuerza de atracción de Coulomb entre una carga negativa (el electrón) y una positiva (el núcleo) (Ver Fig. 5.16)

$$F_e = F_c \quad (5.19)$$

La fuerza centrípeta F_c del movimiento orbital es la fuerza de atracción eléctrica de Coulomb F_e . Es decir:

$$k_C \frac{e^2}{r^2} = \frac{m v^2}{r} \quad (5.20)$$

donde e , m y v son la carga, la masa y la velocidad del electrón respectivamente, r la distancia entre la órbita y el núcleo y $k_C = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ con ϵ_0 la constante dieléctrica del vacío.

De la Ec. (5.20) se puede calcular la Energía cinética del electrón:

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} k_C \frac{e^2}{r} \quad (5.21)$$

Y su Energía potencial es:

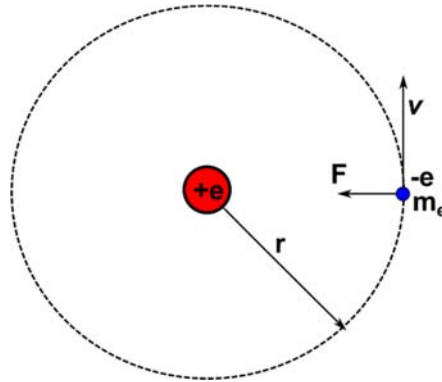
$$E_p = -Ve = \left(-k_C \frac{e^2}{r}\right) \quad (5.22)$$

En consecuencia, la energía total del electrón es:

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + \left(-k_c \frac{e^2}{r}\right) = -\frac{1}{2}k_c \frac{e^2}{r} < 0 \quad (5.23)$$

El valor negativo de la energía total del electrón e^- en el átomo de H (cinética + potencial) indica que posee menos energía que un electrón libre en reposo ($E = 0$). Por lo tanto, se mantiene ligado al núcleo.

Figura 5.16



Nota. Esquema de la fuerza centrípeta coulombiana y la trayectoria del electrón en una órbita

La energía necesaria para separar al electrón del núcleo, llamada “energía de ionización”, que corresponde a la órbita más interna, obtenida experimentalmente es de 13,6 eV. De allí se puede calcular el radio de dicha órbita que resulta $r_1 = 0,528 \cdot 10^{-10}m$. Este valor coincide con las medidas indirectas sobre el tamaño del átomo de Hidrógeno realizadas previamente, lo que constituye el primer éxito del modelo de Bohr.

Segundo Postulado: *si el electrón pasa de una órbita de mayor energía a una de menor energía emite un cuanto de energía (fotón) cuya energía es la diferencia de ambas. Viceversa, si pasa de un estado de menor energía a uno mayor absorbe un fotón.*

Aquí Bohr toma los resultados de Einstein sobre la energía cuantizada del fotón y la atribuye a las diferencias entre las energías de las órbitas del electrón. Es decir.

$$E_f = h\nu_{nm} = E_n - E_m \quad \text{para } (n > m) \quad (5.24)$$

donde E_f es la energía del fotón, h la constante de Planck y ν_{nm} su frecuencia. E_n y E_m son las energías de las respectivas órbitas dadas por la Ec. (5.23).

Es decir:

$$h\nu_{nm} = E_n - E_m = \frac{1}{2}k_c \frac{e^2}{r_n} - \frac{1}{2}k_c \frac{e^2}{r_m} \quad (5.25)$$

Teniendo en cuenta que $\nu = c/\lambda$, donde c es la velocidad de la luz en el vacío y λ la longitud de onda, la Ec. (5.25) se puede escribir como:

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = \frac{1}{2} k_C \frac{e^2}{hc} \left(\frac{1}{r_n} - \frac{1}{r_m} \right) \quad (5.26)$$

Esta ecuación establece la relación entre la longitud de onda del fotón emitido con los radios de las órbitas estacionarias entre las cuales “saltó” el electrón. Volveremos a esta expresión luego de discutir el tercer postulado ya que proporciona una prueba irrefutable de la validez del modelo de Bohr.

Tercer Postulado: en las órbitas estables en las cuales puede girar el electrón, su impulso angular L está cuantizado y su valor es un múltiplo entero de $h/2\pi$

Es decir:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = n \frac{h}{2\pi} \quad \text{donde } n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.27)$$

El entero n se lo denomina *número cuántico principal*.

El requisito que impone la cuantización del impulso angular no es muy evidente inicialmente. Sin embargo, al desarrollar las implicancias que conlleva, quedan claras las razones por las cuales Bohr lo incluyó como postulado.

De la Ec. (5.27):

$$L_n = n\hbar = r_n m v_n \quad \text{donde } \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (5.28)$$

L_n es el impulso angular, r_n el radio de la circunferencia que describe, m la masa y v_n la velocidad del electrón en la órbita n -ésima. El término $h/2\pi$ aparece repetidamente en las ecuaciones y por ello, para abreviar, se lo denota \hbar

De la Ec. (5.28):

$$v_n = \frac{n\hbar}{m r_n} \quad (5.29)$$

Por otra parte, la Ec. (5.20) es

$$\frac{m v_n^2}{r_n} = k_C \frac{e^2}{r_n^2}$$

Resolviendo el sistema de Ecs. (5.20) y (5.29) se obtienen los radios y las velocidades del electrón en la órbita n -ésima.

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{k_C m e^2} = n^2 r_1 \quad (5.30)$$

Es decir, el radio de la órbita n -ésima es un múltiplo al cuadrado del radio de la primera órbita, cuyo radio se puede calcular ya que se conocen los valores de m , e , k_C y \hbar . De allí, el radio de dicha órbita resulta $r_1 = 0,528 \cdot 10^{-10} \text{m}$.

$$v_n = \frac{1}{n} \frac{k_C e^2}{\hbar} = \frac{v_1}{n} \quad (5.31)$$

También aquí se observa que la velocidad del electrón en la órbita n -ésima está relacionada con velocidad en la primera órbita y esta dependencia es inversamente proporcional a n . Calculando se obtiene que $v_1 = 2,194 \cdot 10^6 \text{m/s}$.

Con estos datos, a partir de la Ec. (5.23), podemos calcular los valores de la Energía del electrón en la órbita n -ésima

$$E_n = -\frac{1}{2} k_C \frac{e^2}{r_n} = -\frac{1}{n^2} \frac{k_C e^2}{2 r_1} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \quad (5.32)$$

Esta ecuación permite obtener todos los niveles de energía del electrón y en particular su energía de ligadura (energía de ionización) que corresponde a su órbita más interna (-13,6 eV), el cual coincide con el obtenido experimentalmente. Este estado de energía más baja es el "natural" del átomo y se lo denomina "estado base o fundamental". Los demás corresponden a estados excitados de mayor energía que alcanza el electrón cuando recibe por ej. una descarga eléctrica, colisiones atómicas, absorción de fotones. etc. La Fig. 5.17 muestra los niveles de energía discretos para el átomo de H.

Finalmente, según el Segundo Postulado de Bohr, la emisión de radiación (el fotón) se produce cuando el electrón del átomo se encuentra en un estado excitado y pasa a un estado menor de energía ($n \rightarrow m$, con $n > m$).

La energía del fotón es Ec. (5.24): $h\nu_{nm} = E_n - E_m$

Y la energía de la n -ésima órbita es Ec. (5.32): $E_n = -\left(\frac{k_C e^2}{2 r_1}\right) \frac{1}{n^2}$

Usando la relación $\lambda = c/\nu$ y la Ec. (5.32), la Ec. (5.24) se puede reescribir:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu_{nm}}{c} = \frac{h\nu_{nm}}{hc} = \frac{E_n - E_m}{hc} = R_\infty \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (5.33)$$

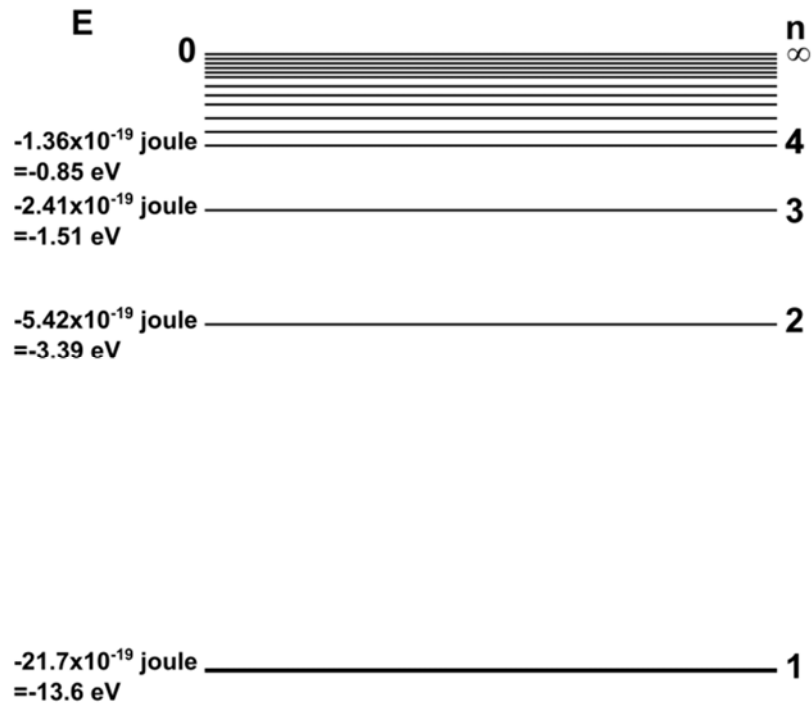
donde $R_\infty = \frac{m e^4}{(4\pi\hbar)^3 c \varepsilon_0^2}$

Como todos los datos son conocidos, se puede calcular el valor de R_∞ que resulta igual a $1,096 \cdot 10^7 \text{ 1/m}$. Pero ese es el valor de la constante de Rydberg, (R_H). En consecuencia, la Ec. (5.33) coincide con la Ec. (5.2), pero ahora deducida teóricamente a partir de los postulados de Bohr y no como una fórmula empírica como la obtenida por Rydberg y Ritz. En realidad, ambas expresiones (5.2) y (5.33) coinciden con un error menor al 1%. Este es un logro notable de Bohr con su modelo atómico ya que puede deducir y explicar los espectros de los gases a partir de consideraciones físicas bien fundamentadas. Fue reconocido por la comunidad científica como la prueba más contundente de la propuesta de la teoría cuántica aplicada al átomo.

Por otra parte, nótese que la introducción del tercer postulado de la cuantización del impulso angular permite obtener la cuantización de la energía, de la velocidad y los radios de las órbitas discretas del electrón, así como las líneas espectrales del Hidrógeno.

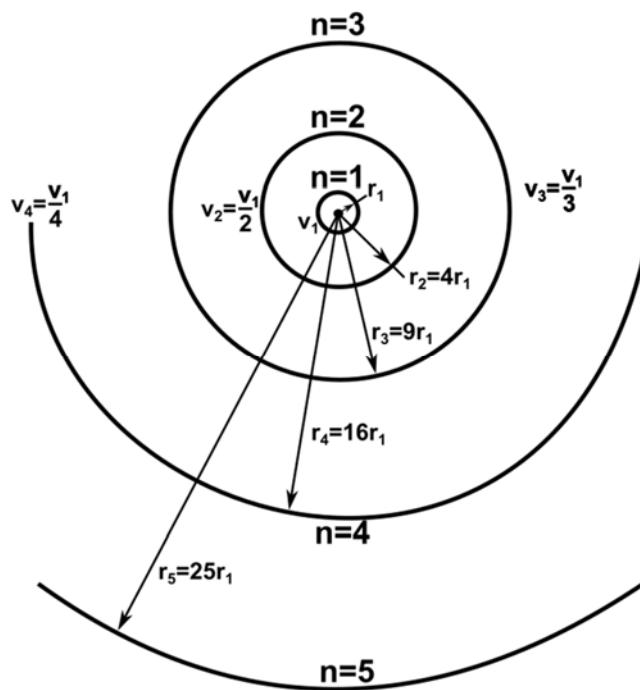
La Fig.5.18 muestra los radios de las órbitas y las velocidades del electrón para el átomo de Hidrógeno, dados por las Ecs. (5.30) y (5.31).

Figura 5.17



Nota. Niveles de energía discretos para el electrón en el átomo de H

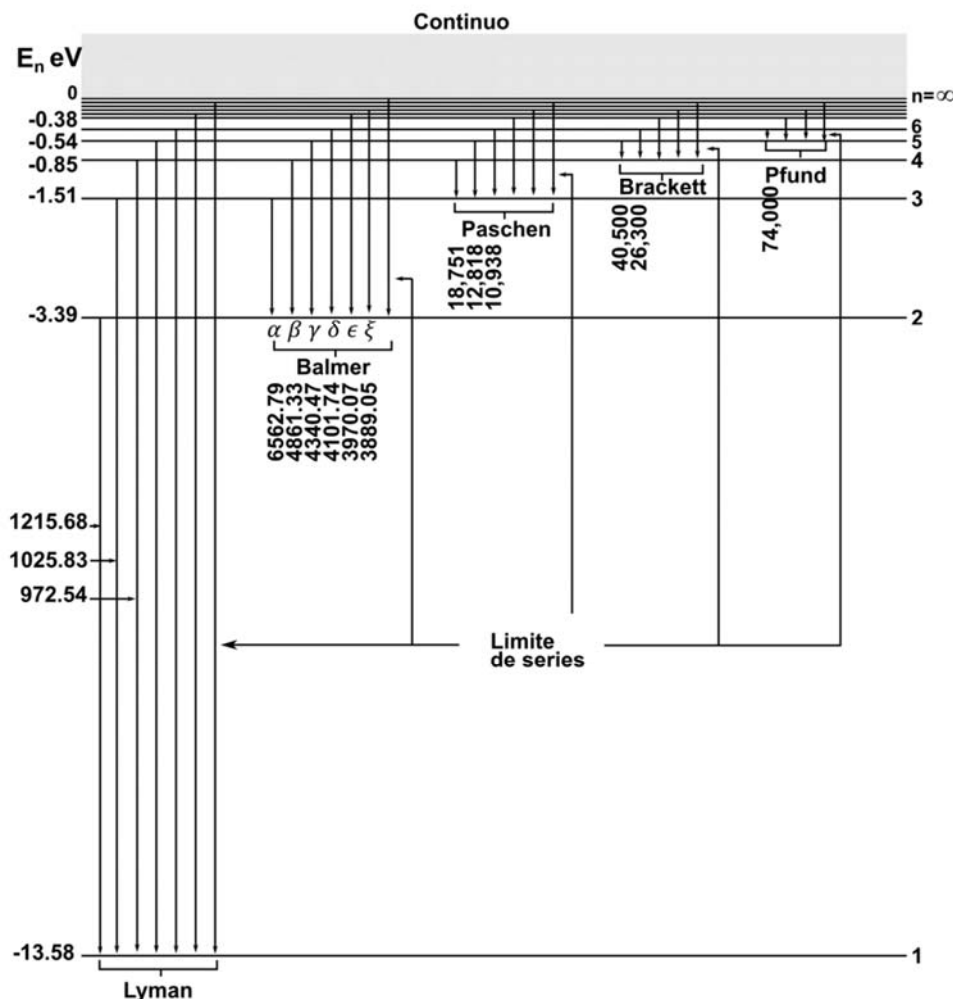
Figura 5.18



Nota. Radios de las órbitas y las velocidades del electrón para el átomo de Hidrógeno

La Fig. 5.19 muestra los niveles de energía del electrón y las transiciones energéticas posibles correspondientes a las distintas series del espectro electromagnético del átomo de Hidrógeno, dadas por la Ec. (5.33).

Figura 5.19



Nota. Niveles de energía del electrón y transiciones energéticas de las series del espectro electromagnético del átomo de Hidrógeno

Principio de correspondencia

Con el éxito de su modelo basado en hipótesis cuánticas para describir el comportamiento del átomo de H, Bohr se preguntó cuál era el límite para que esta teoría “empalme” con la física clásica que describe los fenómenos macroscópicos. Su respuesta fue que ésta se obtiene para números atómicos n muy grandes. Lo llamó *Principio de Correspondencia* y lo enunció simbólicamente como:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} [\textit{física cuántica}] = [\textit{física clásica}]$$

Posteriormente, Bohr usó repetidamente este Principio en sus trabajos para corroborar nuevos resultados cuánticos que debían corresponder a resultados clásicos medibles macroscópicamente para números cuánticos n suficientemente grandes.

Extensión del Modelo de Bohr

Una consecuencia muy interesante del modelo es que Bohr pudo explicar de manera convincente por qué los espectros de absorción y emisión del H, no necesariamente coinciden. Según el modelo, el proceso de absorción es el inverso al de emisión. Es decir, el electrón absorbe un fotón cuya frecuencia le permite pasar a una órbita de mayor energía. Pero en general, los átomos de H están en su estado fundamental ($n = 1$) de menor energía. De allí puede “saltar” a estados energéticos mayores si absorbe fotones. Estas transiciones corresponden a la serie de Lyman del espectro. En cambio, la serie de Balmer para la absorción es mucho más difícil de observar ya que ésta corresponde a saltos de electrones que se encuentran en el primer estado excitado ($n = 2$) hacia niveles de energía mayores. A temperatura ambiente, son pocos los electrones que se encuentran en esta condición y por lo tanto es casi imposible obtener datos medibles de esta serie. Por supuesto, los casos de $n = 3, 4, \dots$ correspondientes a las demás series del Hidrógeno no se observan en sus espectros de absorción a temperatura ambiente.

Bohr extendió su teoría para otros elementos livianos en estado de ionización. La condición es que conservaran un solo electrón luego de perder los demás. Este es el caso del Helio ionizado (He^+), Litio doblemente ionizado (Li^{2+}), y Berilio triplemente ionizado (Be^{3+}). Con ello demostró que algunos espectros de líneas observadas en el Sol y otras estrellas que no habían podido ser interpretados, correspondían a estos elementos ionizados. Esto a su vez corroboraba una sospecha de los astrónomos que suponían que en atmósferas muy calientes como la de las estrellas podían ocurrir colisiones atómicas con energía suficiente para arrancar uno o más electrones de los átomos.

Para el caso de un átomo con número atómico Z que está ionizado, se puede asumir que un electrón gira alrededor de un núcleo cuya carga eléctrica es $+Ze$.

Por lo tanto, aplicando el modelo de Bohr, las Ecs. (5.30) y (5.32) deben ser adecuadas a esta nueva situación quedando:

$$r_n = n^2 r_1 / Z \quad (5.34)$$

$$E_n = -\frac{Z^2 k_C e^2}{n^2 \cdot 2 r_1} \quad (5.35)$$

Operando como se realizó anteriormente, se llega a la ecuación:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{(m/Z)^2} - \frac{1}{(n/Z)^2} \right) \quad (5.36)$$

donde R_H es la constante de Rydberg.

La Ec. (5.36) para $Z = 2$, corresponde al caso del Helio ionizado (He^+) que ajusta perfectamente el espectro de la radiación electromagnética proveniente de varias estrellas y observado por primera vez en 1896 por el astrónomo estadounidense Edward Pickering (1846-1919), confirmando en ellas la presencia de este elemento.

Límites del Modelo de Bohr

La propuesta de Bohr es completamente válida para el sencillo átomo de H. Para elementos más complejos, a partir de $Z = 2$ (He) en adelante es necesario introducir ajustes al modelo para la correcta descripción del comportamiento de esos átomos. Asimismo, con el advenimiento de nuevos instrumentos que posibilitaron medidas más precisas, hubo que realizar modificaciones para considerar, por ejemplo, los efectos relativistas. Tampoco puede explicar la “estructura fina” de las líneas espectrales que muestra el desdoblamiento de los niveles de energía, lo cual implica la aparición de otros números cuánticos. También debió descartarse la idea que el electrón recorre órbitas bien determinadas, para introducir el concepto de “orbital” que representa la probabilidad que un electrón ocupe una determinada región dentro del átomo y que abordaremos posteriormente con la teoría de Schrödinger.

Sin embargo, todas las aproximaciones posteriores toman como base el trabajo original de Bohr. Así se pudieron explicar la emisión de rayos X, el origen nuclear de las partículas β , las propiedades químicas de los elementos y la forma como los átomos se asocian para formar moléculas.

Comentarios finales

El modelo del átomo de Hidrógeno de Bohr es uno de los grandes hitos de la historia de las Ciencias. Es realmente asombroso que la mente humana haya logrado diseñar experiencias y elaborar modelos para desentrañar la naturaleza del átomo, cuyas dimensiones son tan pequeñas como difíciles de imaginar. Por otra parte, también permiten, a través de los espectros electromagnéticos, obtener información sobre la composición química de estrellas situadas a distancias tan enormes como igualmente difíciles de imaginar. Y todo ello con una precisión extraordinaria comprobada por múltiples medidas alternativas. Además, estos logros han sido corroborados por sucesivos ejemplos que luego de más de 100 años no han hecho más que confirmar su validez.

Niels Bohr obtuvo el Premio Nobel de Física en 1922. Según la Academia Sueca: “por sus servicios en la investigación de la estructura de los átomos y de la radiación que de ellos emana”.

Problemas resueltos

Problema 1: Considere un experimento donde se bombardea hidrógeno atómico con electrones y se encuentra que el gas emite radiación cuando los potenciales de aceleración de los electrones “proyectiles” son: $12,09\text{ V}$ y $12,75\text{ V}$.

a) Explicar a partir de un diagrama de energía por qué se presentan en este caso 6 líneas diferentes en el espectro de emisión del hidrógeno atómico.

b) Suponiendo que las diferencias de energía se pueden expresar de acuerdo con el modelo atómico de Bohr como $\Delta E = h\nu$, encontrar los 6 valores permitidos de frecuencias (ν).

Solución

a) Los potenciales de excitación de $12,09\text{ V}$ y $12,75\text{ V}$ le proporcionarán al átomo la energía suficiente para que se excite y así el electrón salte del nivel fundamental inicial hasta otro cierto nivel.

Para $\Delta V = 12,09\text{ V}$ el átomo será excitado con una energía $\Delta E = 12,09\text{ eV}$ y si despejamos de la siguiente ecuación podemos obtener el nivel del estado final del electrón:

$$\Delta E = 12,09\text{ eV} = -13,6\text{ eV} \left(\frac{1}{n^2} - 1 \right) \Rightarrow n = 3$$

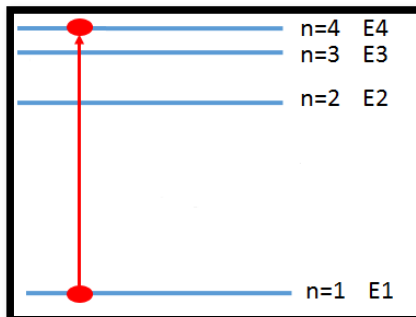
$\Delta E = 12,09\text{ eV}$ es la energía que absorbe el átomo permitiéndole a su electrón saltar del estado fundamental al tercer nivel.

Para $\Delta V = 12,75\text{ V}$ el átomo será excitado con una energía $\Delta E = 12,75\text{ eV}$. Del mismo modo que lo hicimos antes, podemos obtener el nivel al cual saltó el electrón para este otro potencial de excitación:

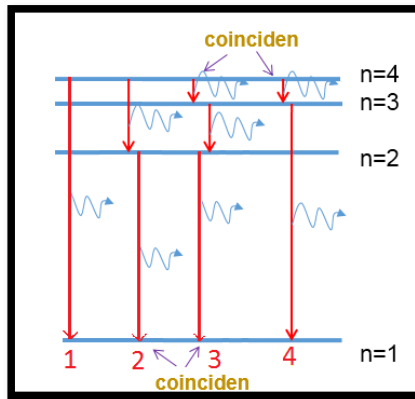
$$\Delta E = 12,75\text{ eV} = -13,6\text{ eV} \left(\frac{1}{n^2} - 1 \right) \Rightarrow n = 4$$

$\Delta E = 12,75\text{ eV}$ es la energía que absorbe el átomo produciendo que su electrón salte del estado fundamental al cuarto nivel.

En el segundo caso, cuando el átomo de hidrógeno es excitado con un potencial $\Delta V = 12,75\text{ V}$, su electrón absorbe esta energía lo que le permite “saltar” desde un estado inferior a otro superior. En este caso, el átomo es excitado desde el estado fundamental ($n = 1$) hasta el tercer estado excitado ($n = 4$)



Desde el nivel $n = 4$, el electrón puede regresar al estado fundamental de 4 maneras diferentes, radiando seis radiaciones con longitudes de onda diferentes, como se indica en el gráfico siguiente:



En el primer caso, cuando el átomo de hidrógeno es excitado con el potencial $\Delta V = 12,09 V$, el átomo es excitado desde el estado fundamental ($n = 1$) hasta el segundo estado excitado ($n = 3$).

Desde el nivel $n = 3$, el electrón puede regresar al estado fundamental de 3 maneras diferentes y son 3 radiaciones o longitudes de onda diferentes las que puede emitir, pero que coinciden con las radiaciones emitidas por el átomo cuando fue excitado por el potencial $\Delta V = 12,75 V$.

b) Para calcular los 6 valores permitidos de frecuencia, primero calculamos la energía de los fotones que emitiría el átomo si regresara a su estado fundamental desde el tercer nivel excitado de la siguiente manera:

$$\Delta E_{41} = E_4 - E_1 = -\frac{13,6 eV}{4^2} - \left(-\frac{13,6 eV}{1^2}\right) = -0,85 eV + 13,6 eV = 12,75 eV = 2,04 \cdot 10^{-18} J$$

$$\Delta E_{42} = E_4 - E_2 = -\frac{13,6 eV}{4^2} - \left(-\frac{13,6 eV}{2^2}\right) = -0,85 eV + 3,4 eV = 2,55 eV = 4,08 \cdot 10^{-19} J$$

$$\Delta E_{43} = E_4 - E_3 = -\frac{13,6 eV}{4^2} - \left(-\frac{13,6 eV}{3^2}\right) = -0,85 eV + 1,51 eV = 0,66 eV = 1,056 \cdot 10^{-19} J$$

$$\Delta E_{31} = E_3 - E_1 = -\frac{13,6 eV}{3^2} - \left(-\frac{13,6 eV}{1^2}\right) = -1,51 eV + 13,6 eV = 12,09 eV = 1,93 \cdot 10^{-18} J$$

$$\Delta E_{32} = E_3 - E_2 = -\frac{13,6 eV}{3^2} - \left(-\frac{13,6 eV}{2^2}\right) = -1,51 eV + 3,4 eV = 1,89 eV = 3,02 \cdot 10^{-19} J$$

$$\Delta E_{21} = E_2 - E_1 = -\frac{13,6 eV}{2^2} - \left(-\frac{13,6 eV}{1^2}\right) = -3,4 eV + 13,6 eV = 10,2 eV = 1,63 \cdot 10^{-18} J$$

Luego a partir de la expresión $E = h\nu$ podemos en cada caso despejar la frecuencia del fotón emitido:

$$\nu_{41} = \frac{\Delta E_{41}}{h} = \frac{2,04 \cdot 10^{-18} J}{6,626 \cdot 10^{-34} Js} = 3,08 \cdot 10^{15} Hz$$

$$\nu_{42} = \frac{\Delta E_{42}}{h} = \frac{4,08 \cdot 10^{-19} J}{6,626 \cdot 10^{-34} Js} = 6,16 \cdot 10^{14} Hz$$

$$\nu_{43} = \frac{\Delta E_{43}}{h} = \frac{1,056 \cdot 10^{-19} J}{6,626 \cdot 10^{-34} Js} = 1,59 \times 10^{14} Hz$$

$$\nu_{31} = \frac{\Delta E_{31}}{h} = \frac{1,93 \cdot 10^{-18} J}{6,626 \cdot 10^{-34} Js} = 2,91 \cdot 10^{15} Hz$$

$$\nu_{32} = \frac{\Delta E_{32}}{h} = \frac{3,02 \cdot 10^{-19} J}{6,626 \cdot 10^{-34} Js} = 4,56 \cdot 10^{14} Hz$$

$$\nu_{21} = \frac{\Delta E_{21}}{h} = \frac{1,63 \cdot 10^{-18} J}{6,626 \cdot 10^{-34} Js} = 2,46 \cdot 10^{15} Hz$$

Problema 2: Considere el átomo de helio ionizado una vez (He+) y resuelva según la teoría de Bohr:

- Expresar la frecuencia de revolución del electrón en términos del número cuántico principal.
- Considere electrones que colisionan con iones He+. ¿Cuál es el mínimo valor de potencial con que se deben acelerar los electrones del haz para que el He+ luego de ser excitado emita un fotón en el visible?
- ¿La longitud de onda asociada al electrón proyectil y la del fotón emitido son iguales? Compare los valores calculados para justificar la respuesta.

Solución

a) Del modelo de Bohr aplicado a un átomo hidrogenoide de número atómico Z, se obtienen las siguientes 3 ecuaciones:

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0} \frac{1}{r}$$

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0} \frac{1}{r^2}$$

$$L = m v r = n \hbar \quad \text{donde } n = 1, 2, \dots$$

La primera ecuación es la energía mecánica del electrón en una órbita permitida del átomo hidrogenoide. La segunda ecuación relaciona el módulo de la fuerza centrípeta que actúa sobre el electrón con el módulo de la fuerza Coulombiana que experimenta el electrón debido a la atracción del núcleo. Y finalmente, la tercera ecuación expresa el postulado de cuantificación del módulo del momento angular del electrón en una órbita de Bohr. De estas tres expresiones se puede deducir, por ejemplo, la expresión de la energía de cada órbita permitida y el radio de cada órbita como función de n.

Entonces, se puede demostrar que $E_n = -13,6 eV \frac{Z^2}{n^2}$ y $r_n = \frac{r_0}{Z} n^2$, donde $r_0 = 0,529 \text{ \AA}$ es el radio de Bohr.

La frecuencia de revolución ν_n del electrón en la n-ésima órbita permitida es:

$$\nu_n = \frac{\omega_n}{2\pi} = \frac{V_n}{2\pi r_n}$$

Por otro lado, del postulado de cuantificación, tenemos:

$$L_n = m V_n r_n = n \hbar \Rightarrow V_n = \frac{n \hbar}{m r_n}$$

Por lo tanto, reemplazando:

$$v_n = \frac{V_n}{2\pi r_n} = \frac{n \hbar}{2\pi m r_n^2} = \frac{Z^2 \hbar}{2\pi m r_0^2 n^3} = Z^2 \frac{v_0}{n^3}$$

donde $v_0 = 6,59 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$ es la frecuencia de revolución del electrón en la 1° órbita de Bohr.

b) En el átomo H, la radiación emitida en el rango visible corresponde a la serie de Balmer, es decir que el número cuántico principal del estado final es $n = 2$. Del mismo modo, para el caso del ión He^+ ($Z=2$) si igualamos la energía del estado final del He^+ al estado $n = 2$ del átomo H, tendremos:

$$E_{n_f} = -Z^2 \frac{13,6 \text{ eV}}{n_f^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{2^2} \Rightarrow \frac{Z^2}{n_f^2} = \frac{1}{2^2} \Rightarrow n_f = 4 Z = 2$$

Ahora, el fotón de mínima energía de la serie $n_f = 4$ del ión He^+ corresponde al salto $5 \rightarrow 4$, pero su energía pertenece al IR. El siguiente fotón de mínima energía corresponde al salto $6 \rightarrow 4$ y su energía si está en el rango visible:

$$\Delta E = E_{n_i} - E_{n_f} = -Z^2 \frac{13,6 \text{ eV}}{n_i^2} + Z^2 \frac{13,6 \text{ eV}}{n_f^2} = -2^2 13,6 \text{ eV} \left(\frac{1}{6^2} - \frac{1}{4^2} \right) = 1,889 \text{ eV}$$

Por lo tanto, la energía cinética mínima de los electrones $E_{c_{min}}$ que colisionan con los iones He^+ deberá ser al menos igual a ΔE :

$$E_{c_{min}} = \Delta E = 1,889 \text{ eV} \Rightarrow V_{min} = \frac{E_{c_{min}}}{e} = 1,889 \text{ V}$$

c) Comparemos entonces la longitud de onda de De Broglie de los electrones incidentes con la longitud de onda del fotón emitido por el ión He^+ en el salto $6 \rightarrow 4$:

$$p_{min} = \sqrt{2mE_{c_{min}}} = \frac{h}{\lambda_B} \Rightarrow \lambda_B = \frac{h}{p_{min}} = 0,894 \text{ nm}$$

Por otro lado, la longitud de onda del fotón emitido es:

$$\lambda = \frac{h c}{\Delta E} = 658,12 \text{ nm}$$

Por lo tanto $\lambda_B < \lambda$.

Problemas propuestos

Problema 1: ¿Por qué se especificó que la laminilla debía ser delgada en los experimentos tendientes a comprobar la fórmula de dispersión de Rutherford?

Problema 2: ¿Bohr postuló la cuantización de la energía?

Problema 3: Para las órbitas del átomo de hidrógeno de Bohr la energía potencial es negativa y de magnitud mayor que la energía cinética. ¿Qué implica esto?

Problema 4: Calcule el radio de la primera órbita del electrón que gira alrededor del núcleo del átomo de hidrógeno según el modelo de Bohr. Determine la velocidad con que el electrón se mueve en esta órbita.

Problema 5: Calcule la energía total del electrón en la segunda órbita del átomo de Bohr.

Problema 6: Calcule las longitudes de onda mínima y máxima de las líneas espectrales del átomo de hidrógeno en la parte visible del espectro.

Problema 7: Si sólo se necesitara calcular líneas en el espectro de absorción del hidrógeno. ¿Cómo modificaría la expresión $\lambda^{-1} = R_H (1/n_f^2 - 1/n_i^2)$ para obtenerlas?

Problema 8: Al emitir un fotón, el átomo de hidrógeno retrocede porque se conserva la cantidad de movimiento lineal. Explique el hecho de que la energía del fotón emitido es menor que la diferencia de energías entre los niveles involucrados en el proceso de emisión.

Problema 9: ¿Es posible que un átomo de hidrógeno absorba un fotón cuya energía exceda su energía de enlace (13,6 eV)?

Problema 10: Calcule la frecuencia y la longitud de onda de la línea espectral emitida cuando el electrón de un átomo de hidrógeno vuelve de la cuarta órbita de Bohr a la tercera. ¿A qué serie de rayas espectrales corresponde?

Problema 11: El electrón del átomo de hidrógeno salta de la tercera órbita a la segunda.

- Calcule la longitud de onda del fotón emitido.
- Calcule la disminución de la energía del átomo.
- Calcule la energía del fotón emitido.

Problema 12: Se excita un átomo de hidrógeno desde el estado fundamental ($n = 1$) hasta el tercer nivel excitado ($n = 4$).

- Calcule la energía que debe absorber el átomo.
- Calcule las distintas energías posibles para los fotones que emitiría el átomo si regresara a su estado fundamental.
- ¿De cuántas maneras posibles puede decaer el átomo desde el nivel $n = 4$ al fundamental? ¿Cuántas y cuáles longitudes de onda diferentes pueden emitirse?

Problema 13: a) Halle la longitud de onda máxima de la serie ultravioleta del espectro del hidrógeno.

b) ¿Qué velocidad mínima deberán tener los electrones para que al chocar con los átomos de hidrógeno estos se exciten y aparezca esta línea?

c) Si el átomo H emite un fotón de longitud de onda igual a la calculada en a), calcule la velocidad de retroceso del átomo si inicialmente estaba en reposo.

Problema 14: Sobre una red de difracción incide normalmente un haz de luz que procede de un tubo de descarga lleno de hidrógeno atómico. La constante de red es $5 \mu\text{m}$. ¿A qué transición del electrón le corresponde la línea espectral que se observa con esta red en el espectro de quinto orden bajo un ángulo de 41° ?

Problema 15: Un fotón se emite cuando un átomo de hidrógeno decae desde el nivel $n = 6$ hasta el nivel $n = 2$. Calcule:

- La energía del fotón emitido en Joule.
- Su longitud de onda en nm.
- Su frecuencia en Hz.

Problema 16: En un experimento se bombardea hidrógeno atómico con electrones y se encuentra que los potenciales de excitación se presentan para $10,12 \text{ V}$ y $12,10 \text{ V}$.

a) ¿Por qué se observan tres líneas de emisión para las dos excitaciones nombradas?
Sugerencia: haga un esquema de niveles de energía.

- b) Determine las frecuencias y longitudes de onda de las 3 emisiones.

Problema 17: La radiación de un ión de helio He^+ es aproximadamente igual a la primera línea de la serie de Balmer. ¿Entre qué estados ocurre la transición en el ión He^+ ?

Problema 18: Aplique el modelo de Bohr a un átomo de He simplemente ionizado, es decir sin un electrón.

- ¿Qué relaciones existen entre este espectro y el del átomo de hidrógeno?
- Calcule la energía necesaria para arrancar el electrón al átomo He ionizado.

Problema 19: ¿Cuál debe ser la temperatura de un cuerpo negro ideal de manera que los fotones de la luz que irradia con la longitud de onda de máxima intensidad puedan excitar el electrón en el átomo de hidrógeno del modelo de Bohr de su estado fundamental al nivel $n = 3$?

Referencias

Aparato diseñado por Millikan para su experimento con la gota de aceite (1909-1910). Autor: desconocido, Fuente: <http://chem.ch.huji.ac.il/~eugeniik/history/millikan.html> (1909-1910) Creative Commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Millikan%E2%80%99s_oil-drop_apparatus_1.jpg)

CAPÍTULO 6

Propiedades ondulatorias de la materia

Ondas de materia

La hipótesis de Louis de Broglie

En 1924 el físico francés Louis de Broglie (1892-1987) propuso para su tesis doctoral la hipótesis que las partículas con masa presentan un comportamiento dual, equivalente al de la radiación electromagnética. Louis de Broglie presenta la idea que la naturaleza dual de la radiación electromagnética podía ser extendida a partículas con masa. Del mismo modo que cada fotón tiene asociado una onda electromagnética, cada partícula de materia en movimiento debería tener una onda asociada que se denominó *onda de materia* y cuya longitud de onda se conoce como *longitud de onda de L. de Broglie*:

$$\lambda_B = \frac{h}{p} \quad (6.1)$$

donde $p = mv$ es el módulo de la cantidad de movimiento lineal de una partícula con masa m y velocidad v , h es la constante de Planck.

Esta hipótesis, que sostiene la existencia de una gran simetría en la naturaleza, fue considerada poco realista debido a la falta de evidencia experimental que justifique tan original idea. En 1926, el joven físico alemán Walter Elsasser (1904-1991) propuso que el comportamiento ondulatorio de la materia debía ser probado de la misma manera que se comprobó la naturaleza ondulatoria de los rayos X, es decir, con un experimento de difracción. En 1927, C. Davisson y L. Germer en Estados Unidos y, casi al mismo tiempo en forma independiente, George Thompson en Escocia, demostraron experimentalmente la difracción de electrones por cristales. Los resultados del experimento de Davisson mostraron que un haz de electrones al incidir sobre un cristal de níquel se dispersaba del mismo modo que lo hacía un haz de radiación electromagnética con un valor de longitud de onda igual a la longitud de onda propuesta por Louis de Broglie.

El experimento de Davisson y Germer

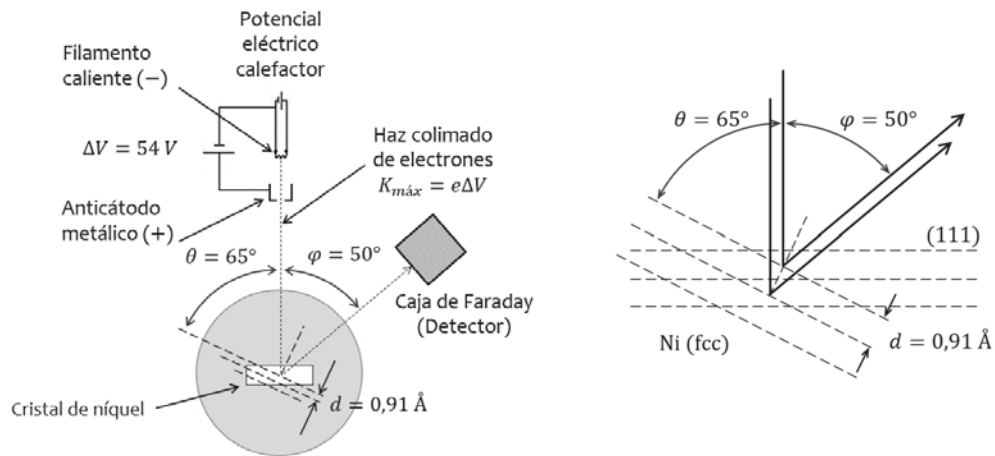
En principio, es posible determinar experimentalmente la longitud de onda λ de cualquier onda electromagnética mediante una experiencia de difracción si se dispone de una red con un espaciamiento entre rendijas d conveniente ($d \leq \lambda$).

En 1925, los físicos estadounidenses Davisson (1881-1958) y Germer (1896-1971) estaban trabajando en los Laboratorios Bell (AT&T) en la medición los electrones secundarios haciendo incidir un haz de electrones de baja energía sobre una muestra de níquel. Los electrones secundarios son producidos por materiales al ser bombardeados con electrones (denominados primarios) que les transfieren energía suficiente a los electrones de las capas internas del material logrando que éstos sean expulsados de la muestra (electrones secundarios).

La muestra de níquel utilizada estaba conformada por agregado de microcristales con diferentes orientaciones relativas (muestra policristalina). Al finalizar una serie de mediciones, colocaron el cristal en un horno para eliminar la formación de óxido superficial formado. Al continuar con el experimento los resultados obtenidos eran diferentes, ahora se observaba un pronunciado pico en la cantidad de electrones registrados para la posición angular $\varphi = 50^\circ$. El calentamiento del policristal de níquel produjo el crecimiento en el tamaño los cristales de la muestra. Al repetir el experimento, las ondas asociadas con los electrones del haz incidente satisfacían la ley de Bragg en un gran volumen del material causando un máximo de difracción que pudo ser registrado.

Un esquema del equipo experimental que utilizaron se muestra en la Fig. 6.1. El equipo era muy pequeño, a 7 mm de la superficie de la muestra estaba el orificio de salida del cañón de electrones y a 11 mm se hallaba la abertura de entrada del detector. Todo el equipo se hallaba en vacío dentro de un tubo de vidrio. El tamaño del cristal de Ni era $8 \times 5 \times 3\text{ mm}$. El haz incidía perpendicularmente sobre la cara mayor del cristal que había sido pulida paralela al plano cristalográfico (111).

Figura 6.1



Nota. Esquema de la experiencia de Davisson y Germer y detalle de los planos del cristal

Comparemos la longitud de onda de materia de los electrones incidentes con la longitud de onda que establece la condición de Bragg para que se produzca interferencia constructiva. Los electrones son acelerados a través de una diferencia de potencial $\Delta V = 54\text{ V}$, entonces la energía

cinética máxima de los electrones resulta ser $K = p^2/(2 m_e) = e\Delta V$. La longitud de onda de L. de Broglie puede expresarse directamente en términos de la diferencia de potencial aplicada:

$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2 m_e e\Delta V}} \cong \sqrt{\frac{150}{\Delta V}} \quad (\text{Å}) \quad (6.2)$$

Evaluando esta expresión con los datos del experimento, obtenemos $\lambda_B \cong \sqrt{\frac{150}{54}} = 1,67 \text{ Å}$.

Las ondas asociadas con estos los electrones deben satisfacer la ley de Bragg para que se genere un máximo de interferencia en la figura de difracción. La dirección de máxima cantidad de electrones dispersados forma un ángulo $\varphi = 50^\circ$ con la dirección de incidencia, luego el ángulo de incidencia del haz respecto de los planos cristalinos de reflexión es $\theta = (180^\circ - \varphi)/2 = 65^\circ$. Conociendo el espaciado de los planos cristalinos ($d = 0,91 \text{ Å}$), la ley de Bragg ($2d \text{ sen}\theta = n \lambda$) determina valor de la longitud de onda que interfiere constructivamente. Para el primer el orden de difracción ($n = 1$) la longitud de onda resulta ser igual al valor de la longitud de onda asociada a los electrones:

$$\lambda = 2d \text{ sen}\theta = 1,65 \text{ Å} \cong \lambda_B = 1,67 \text{ Å} \quad (6.3)$$

Este resultado es una confirmación de la hipótesis de Louis de Broglie.

El máximo contaje observado a un ángulo $\varphi = 50^\circ$ no es consecuencia de la interferencia de ondas asociadas a dos o más electrones dispersados, sino es el resultado de la interferencia constructiva entre diferentes partes de la onda de un mismo electrón que han sido dispersadas en regiones diferentes del cristal. Esto se comprobó al obtener la misma figura de difracción aún en la condición extrema de hacer incidir electrones casi uno tras otro.

Principio de complementariedad de Bohr

El modelo ondulatorio y el modelo corpuscular pueden usarse para explicar muchos fenómenos físicos. La propagación de las ondas de sonido en el aire es explicada con un modelo ondulatorio mientras que la presión de un gas en un recipiente puede ser explicado con un modelo de partículas considerando a las moléculas como esferas rígidas que golpean las paredes. Cualquier fenómeno de transporte de energía puede ser descrito por el modelo ondulatorio o por el modelo corpuscular, pero no por ambos a la vez. No podemos aplicar simultáneamente ambos modelos para explicar un mismo fenómeno.

En el año 1928, el físico danés Niels Bohr (1885-1962) enunció el siguiente principio. Principio de Complementariedad: "Los aspectos ondulatorios y corpusculares son complementarios".

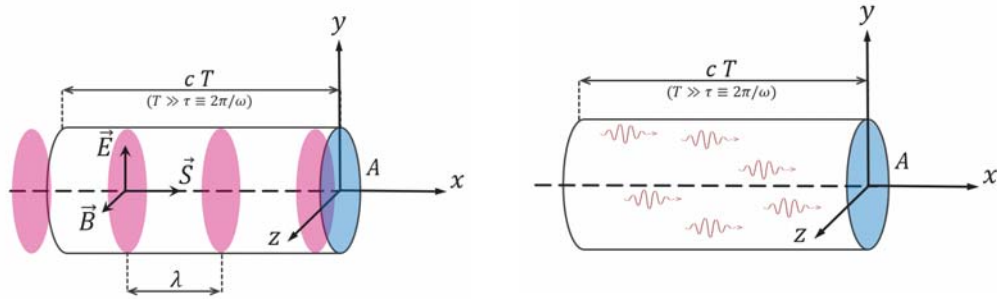
Este principio implica que cada tipo de fenómeno que involucre radiación electromagnética o partículas con masa en movimiento puede ser explicado por uno de los dos modelos, pero no por ambos. El modelo a aplicar depende de la naturaleza del fenómeno. Si una medición prueba el comportamiento ondulatorio entonces resulta imposible explicarlo aplicando el modelo corpuscular, y viceversa. En algunos experimentos la naturaleza ondulatoria se pone de

manifiesto y el comportamiento corpuscular no está presente, en otros fenómenos ocurre lo contrario, pero ambos modelos se complementan para explicar todas las propiedades.

Una interpretación estadística de las ondas permite establecer una correspondencia entre ambos modelos. Calculemos la irradiancia de un haz utilizando el modelo ondulatorio del electromagnetismo clásico y luego aplicando el modelo de partículas.

La Fig. 6.2 contiene las dos formas de representar un haz de luz con sección transversal de área A que se propaga en dirección $+x$: A la izquierda la descripción ondulatoria y a la derecha la representación cuántica en términos de fotones con energías $E_f = hc/\lambda$.

Figura 6.2



Nota. Haz láser ideal y continuo con irradiancia constante. A la izquierda los frentes de onda de igual fase del modelo ondulatorio, a la derecha los fotones idénticos del modelo de partículas.

a) Modelo ondulatorio

Consideremos una fuente láser ideal continua de potencia constante que genera una onda electromagnética armónica plana y uniforme propagándose en el vacío en la dirección $+x$. Sea $\vec{E}(x, t) = \hat{j} E_0 \text{sen}(kx - \omega t)$ el campo eléctrico que representa la onda, entonces la energía media incidente por unidad de tiempo y por unidad de área transversal al haz es:

$$\text{Irradiancia} = \langle |\vec{S}| \rangle = \frac{1}{\mu_0} \langle |\vec{E} \times \vec{B}| \rangle = \frac{1}{\mu_0 c} \langle E^2 \rangle \quad (6.4)$$

Los símbolos $\langle \rangle$ indican promedio temporal en un intervalo $T \gg \tau \equiv 2\pi/\omega$, entonces

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} E^2(x, t') dt' = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} E_0^2 \text{sen}^2(kx - \omega t') dt' = \frac{1}{2} E_0^2 \quad (6.5)$$

b) Modelo corpuscular

El paso de fotones a través de la sección transversal del haz es un proceso estadístico discreto y aleatorio. Consideremos un experimento donde se registra la cantidad de fotones que llegan a la superficie A durante un intervalo de tiempo T .

La cantidad de fotones detectados (\mathcal{N}) no es exactamente igual todas las muestras.

Sea $\bar{\Phi}_f$ ¹ el flujo promedio de fotones (fotones/segundo), entonces la cantidad promedio de fotones durante un tiempo de conteo T es $\bar{N} = \bar{\Phi}_f \cdot T$

El valor de la irradiancia de un haz ideal monocromático con frecuencia $\nu = c/\lambda$ es igual a la cantidad promedio de fotones incidentes por unidad de tiempo y por unidad de área ($\frac{\bar{N}}{AT} = \frac{\bar{\Phi}_f}{A}$) multiplicada la energía del fotón ($E_f = h\nu$):

$$\text{Irradiancia} = \frac{\bar{\Phi}_f}{A} h\nu \quad (6.6)$$

La densidad del flujo promedio de fotones incidentes ($\bar{\Phi}_f/A$) es un indicador de la probabilidad de que un fotón incida sobre una unidad de área transversal en una unidad de tiempo. Einstein propuso interpretar al promedio temporal $\langle E^2 \rangle$ como un indicador de la cantidad promedio de fotones por unidad de volumen ($\bar{\rho}_f = \frac{\text{Irradiancia}}{c} = \frac{1}{\mu_0 c^2} \langle E^2 \rangle$).

Igualando las expresiones obtenidas para la irradiancia a partir de los dos modelos (Ecs. (6.4) y (6.5)) se puede comprobar que $\langle E^2 \rangle$ es proporcional a $\bar{\Phi}_f$, entonces $\langle E^2 \rangle$ puede ser interpretado como un indicador de la probabilidad de que un fotón incida sobre una unidad de área transversal en una unidad de tiempo o como un indicador de la probabilidad de hallar un fotón por unidad de volumen en una posición y un instante determinados.

Función de onda y la interpretación de Max Born

Consideremos una partícula moviéndose con velocidad constante en la dirección $+x$. La longitud de onda de de Broglie es una de las características de la onda de materia. La representación completa de la partícula queda establecida especificando una función escalar denominada *función de onda* $\Psi(x, t)$.

En la sección anterior, vimos que el campo eléctrico $\vec{E}(x, t)$ es una onda del campo electromagnético asociado a un flujo de fotones en la dirección x . De manera análoga, la función de onda $\Psi(x, t)$ es onda de materia asociada a una partícula moviéndose en dirección x .

A. Einstein consideró al promedio temporal del cuadrado del módulo del campo eléctrico como un indicador de la cantidad promedio de fotones por unidad de volumen ($\bar{\rho}_f = \frac{1}{\mu_0 c^2} \langle E^2 \rangle$). El matemático y físico alemán Max Born (1928-1970) extendió esto al interpretar al promedio temporal del cuadrado del módulo de la función de onda $\langle |\Psi|^2 \rangle$ como una medida de la probabilidad de encontrar a la partícula por unidad de volumen en una dada posición y en un cierto instante.

Esta interpretación estadística, Born la efectuó varios años después que E. Schrödinger desarrollara su teoría de la mecánica cuántica en 1925. Originalmente Schrödinger había

¹ Para un puntero láser verde ($\lambda = 532 \pm 10 \text{ nm}$) con potencia nominal constante de $P = 50 \text{ mW}$ la densidad promedio del flujo de fotones es $\bar{\Phi}_f = \frac{P}{h\nu} \cong 13,4 \cdot 10^{18} \text{ fotones/s}$.

considerado a la propia función de onda como la representación de una partícula material. El problema de esta interpretación es que toda partícula masiva supone una concentración localizada de masa en cambio una onda monocromática se extiende en todo el espacio. Aun considerando a la partícula como una superposición de ondas, como propuso Schrödinger, la onda resultante se extiende y se dispersa con el tiempo sobre una región del espacio mucho más grande que el tamaño de la partícula. Born resolvió esta dificultad interpretando a la cantidad $\langle |\Psi(x, t)|^2 \rangle$ como la “densidad de probabilidad de hallar a la partícula.

Postulado de Born: Si en el instante t se mide la posición de una partícula que se mueve sobre el eje x cuya función de onda asociada es $\Psi(x, t)$, la probabilidad de hallarla dentro del intervalo de coordenadas $[x, x + dx]$ es:

$$P(x, t)dx = \langle |\Psi(x, t)|^2 \rangle dx. \quad (6.7)$$

La función de onda no representa a la partícula, sino al conocimiento estadístico que de ella se dispone. Este indeterminismo es una característica propia de la naturaleza.

No debemos considerar al campo eléctrico o al magnético como la función de onda asociada al fotón, $\vec{E}(x, t)$ y $\vec{B}(x, t)$ son magnitudes físicas vectoriales mientras que una onda de materia $\Psi(x, t)$ es una magnitud escalar sin interpretación física. Además, las ondas electromagnéticas y las ondas de materia satisfacen ecuaciones diferenciales diferentes. El estudio de la ecuación diferencial que permite obtener la expresión para la función de onda, denominada *ecuación de Schrödinger*, será desarrollado en los próximos capítulos que tratan sobre la *Teoría de Schrödinger de la Mecánica Cuántica*.

Propiedades de la función de onda. Paquete de ondas.

Todos los objetos materiales poseen características ondulatorias en su movimiento, sin embargo, este comportamiento se torna cada vez más difícil de observar a medida que su longitud de onda de Louis de Broglie disminuye, hasta llegar a la situación ya donde no es posible observarlo. La causa de que el comportamiento ondulatorio de los cuerpos macroscópicos no se ponga de manifiesto es el valor tan pequeño de la constante de Planck. Cualquier objeto macroscópico, aunque se mueva a baja velocidad, tiene una cantidad de movimiento relativamente grande debido al gran tamaño de su masa. Esto causa que la longitud de onda asociada ($\lambda_B = h/p$) sea extremadamente pequeña respecto de cualquier obstáculo y, en estas condiciones, los fenómenos de difracción no se manifiestan. Por el contrario, cualquier partícula material de tamaño subatómico posee una cantidad de movimiento muy chica como consecuencia de su pequeña masa, inclusive si su velocidad es cercana a la de la luz. Esto causa que la partícula, al tener una longitud de onda comparable al tamaño de muchos obstáculos, muestre un comportamiento ondulatorio durante su movimiento.

Consideremos una partícula libre con masa m en movimiento rectilíneo uniforme y una onda armónica propagándose con la misma dirección y sentido, por ejemplo $+x$. Sabemos que si es la onda de materia de la partícula entonces su longitud de onda ($\lambda = v_\lambda/v$) deberá ser igual a la

longitud de onda de de Broglie de la partícula ($\lambda_B = \frac{h}{mv}$). ¿Sólo este requisito es suficiente para considerada como la onda de materia asociada?

Para responder la pregunta anterior consideraremos una partícula no es relativista ($v \ll c$), esta condición se establece para simplificar el análisis, sin limitar el alcance de las conclusiones.

La siguiente expresión para $\Psi = f(kx - \omega t)$ representa una onda plana cosenoidal:

$$\Psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t) = A \cos k(x - v_\lambda t) \quad \forall x \in (-\infty, +\infty) \quad (6.8)$$

siendo $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ el número de onda, $\omega = 2\pi\nu$ la frecuencia angular y $v_\lambda = \lambda\nu = \frac{\omega}{k}$ la velocidad de propagación de la onda o *velocidad de fase*.

Notemos la onda se extiende en la dirección x desde $-\infty$ hasta $+\infty$ ($A = cte.$). Si suponemos que el movimiento de la partícula anterior en el instante t está descrito por esta onda, en base al postulado de Born concluimos que no tendremos ningún conocimiento sobre su localización en ese instante.

Para obtener información sobre la ubicación de la partícula, la extensión espacial de la onda asociada a la partícula debe ser nula en todo el espacio, salvo en una región dentro de la cual sabemos que está la partícula. Una forma de lograr esto es sumando ondas planas similares a la anterior con diferentes longitudes de onda, o frecuencias, y amplitudes. Para hacer más simple la expresión de la onda resultante, reescribiremos la onda plana anterior de una manera más conveniente y consideremos que su amplitud es unitaria ($A = 1$):

$$\Psi(x, t) = \cos 2\pi(\kappa x - \nu t) \quad \forall x \in (-\infty, +\infty) \quad (6.9)$$

siendo $\kappa \equiv \frac{1}{\lambda}$ la longitud de onda recíproca ($1/m$) y ν la frecuencia (Hz).

Sumemos dos ondas similares a la anterior, pero de diferentes longitudes de onda y frecuencia:

$$\Psi_{1+2}(x, t) = \Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t)$$

$$\Psi_{1+2}(x, t) = \cos 2\pi(\kappa_1 x - \nu_1 t) + \cos 2\pi(\kappa_2 x - \nu_2 t)$$

$$\text{Definamos las cantidades } \begin{cases} \bar{\kappa} \equiv \frac{1}{2}(\kappa_2 + \kappa_1) \\ \kappa_m \equiv \frac{1}{2}(\kappa_2 - \kappa_1) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \kappa_1 = \bar{\kappa} - \kappa_m \\ \kappa_2 = \bar{\kappa} + \kappa_m \end{cases}$$

$$\text{Análogamente definimos } \begin{cases} \bar{\nu} \equiv \frac{1}{2}(\nu_2 + \nu_1) \\ \nu_m \equiv \frac{1}{2}(\nu_2 - \nu_1) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \nu_1 = \bar{\nu} - \nu_m \\ \nu_2 = \bar{\nu} + \nu_m \end{cases}$$

Llamando a las fases de cada onda $\begin{cases} \alpha \equiv 2\pi(\kappa_1 x - \nu_1 t) \\ \beta \equiv 2\pi(\kappa_2 x - \nu_2 t) \end{cases}$ y usando la identidad para la suma de funciones coseno, la expresión para Ψ_{1+2} puede reescribirse del siguiente modo:

$$\Psi_{1+2} = \cos\alpha + \cos\beta = 2 \cos \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \cos \frac{1}{2}(\alpha + \beta)$$

Consideremos los argumentos de las funciones coseno anteriores y reemplacemos α y β por sus definiciones:

$$\frac{1}{2}(\alpha - \beta) = 2\pi \left(\frac{\kappa_1 - \kappa_2}{2} x - \frac{v_1 - v_2}{2} t \right) = -2\pi(\kappa_m x - v_m t) = -2\pi \kappa_m \left(x - \frac{v_m}{\kappa_m} t \right) \quad (6.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\alpha + \beta) &= 2\pi \left(\frac{\kappa_1 + \kappa_2}{2} x - \frac{v_1 + v_2}{2} t \right) = +2\pi (\bar{\kappa} x - \bar{v} t) & (6.11) \\ &= +2\pi \bar{\kappa} \left(x - \frac{\bar{v}}{\bar{\kappa}} t \right) \end{aligned}$$

Luego, debido a que el coseno es una función par, la onda suma resultante es:

$$\Psi_{1+2}(x, t) = 2 \cos \left[2\pi \frac{\Delta\kappa}{2} \left(x - \frac{\Delta v}{\Delta\kappa} t \right) \right] \cos \left[2\pi \bar{\kappa} \left(x - \frac{\bar{v}}{\bar{\kappa}} t \right) \right]$$

Cuando la diferencia entre las frecuencias de las ondas se acerca a cero, podemos aproximar en (6.10) $v_m/\kappa_m = (v_2 - v_1)/(\kappa_2 - \kappa_1) = \Delta v/\Delta\kappa = \Delta\omega/\Delta k \approx d\omega/dk|_{\bar{\omega}}$. Luego, la expresión para la superposición de ondas es:

$$\Psi_{1+2}(x, t) = 2 \cos[2\pi\kappa_m(x - v_g t)] \cos[2\pi\bar{\kappa}(x - \bar{v}_\lambda t)] \quad (6.12)$$

$$\text{ó } \Psi_{1+2}(x, t) = \Psi_0(x, t) \cos[2\pi\bar{\kappa}(x - \bar{v}_\lambda t)] \quad (5.13)$$

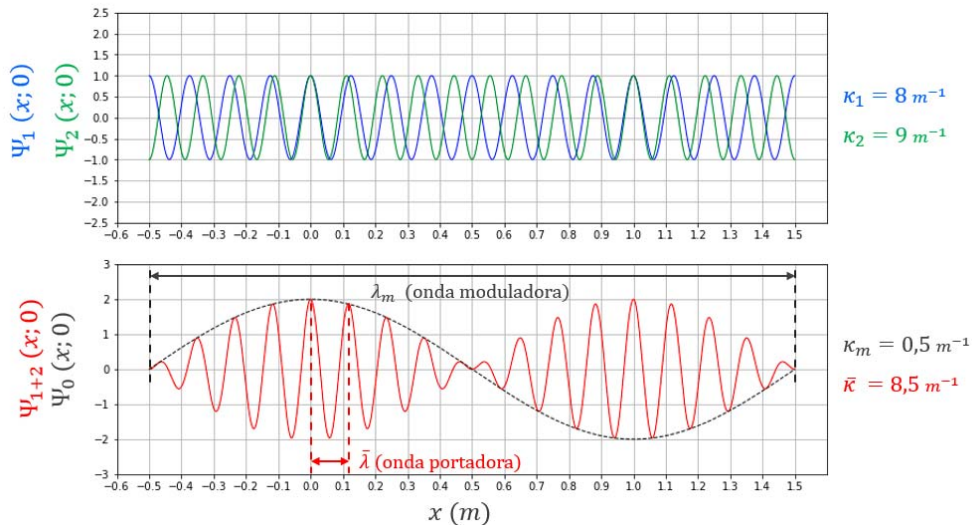
siendo:

$v_g \equiv \frac{d\omega}{dx}|_{\bar{\omega}}$: “*velocidad de grupo*”. Es la velocidad con que se desplaza la onda de modulación de amplitud de la onda portadora.

$\bar{v}_\lambda \equiv \frac{\bar{\omega}}{\bar{\kappa}} = \frac{\bar{v}}{\bar{\kappa}}$: “*velocidad de fase*”. Es la velocidad con que se mueven los picos de la onda portadora. Esta velocidad puede ser mayor, menor o igual a la velocidad de grupo.

$\Psi_{1+2}(x, t) = \Psi_0(x, t) \cos[2\pi\bar{\kappa}(x - \bar{v}_\lambda t)]$, es una onda armónica de frecuencia $\bar{v} = \bar{v}_\lambda \bar{\kappa}$ con una amplitud variable en el tiempo $\Psi_0(x, t) = 2 \cos[2\pi\kappa_m(x - v_g t)]$ de frecuencia $v_m = v_g \kappa_m$.

Figura 6.3

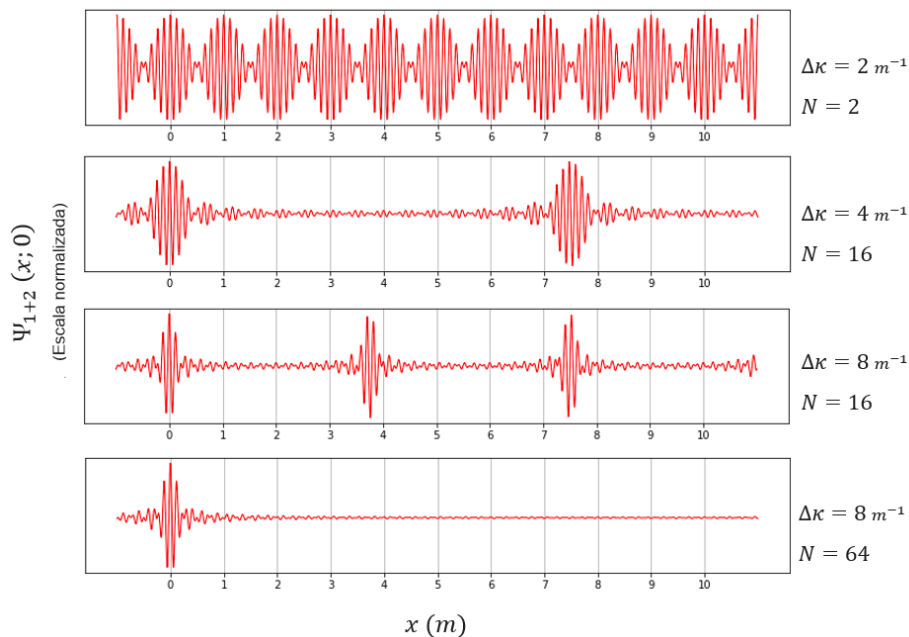


Nota. Superposición de dos ondas planas (infinitas) con diferentes longitudes de onda ($t = 0$). La onda resultante de la superposición se extiende desde $-\infty$ hasta $+\infty$

En Fig. 6.3, la onda moduladora $\Psi_0(x, t)$ es una función armónica con longitud de onda λ_m , pero cuando se superpone una gran cantidad ondas o el rango de valores es grande la modulación de la amplitud sigue siendo una función periódica pero ya no es sinusoidal. Analicemos el efecto de sumar N ondas cosenoidales con valores equiespaciados de longitud de onda recíproca ($\kappa \equiv 1/\lambda$). Con el fin de contar con cantidades numéricas pequeñas se asume el valor anterior $\bar{\kappa} = 8,5 \text{ m}^{-1}$. En el estudio de casos reales los valores son muy superiores al adoptado, sin embargo, esta consideración no afecta la generalidad de los resultados. Por ejemplo, en el experimento de Davisson y Germer, el valor de la longitud de onda recíproca promedio de los electrones es $\bar{\kappa} \equiv \frac{1}{\lambda_B} = \frac{1}{1,67 \text{ \AA}} \sim 6 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$.

En la parte superior de la Fig. 6.4 se muestra la misma superposición que se presentó en la figura anterior pero ahora en un intervalo amplio del eje x . Las figuras inferiores muestran la dependencia de la forma de la onda resultante al variar el rango $\Delta\kappa$ y el número de componentes monocromáticas N que se superponen. En $x = 0$ la amplitud de superposición es máxima porque todas las componentes están en fase. Al alejarnos en cualquier sentido, la amplitud comienza a disminuir porque dejan de estar en fase debido a que todas las componentes tienen diferentes longitudes de onda. Esta región, donde la amplitud de la superposición es apreciable, define la extensión espacial del *paquete de ondas*.

Figura 6.4



Nota. Construcción del paquete de ondas ($t = 0$). Los aumentos de $\Delta\kappa$ y N provocan la reducción de la extensión de los paquetes de ondas y el aumento de la separación entre ellos.

El rango ($\Delta\kappa \equiv \kappa_N - \kappa_1$) afecta la extensión espacial del paquete de ondas. Al aumentar $\Delta\kappa$, la amplitud de la suma disminuye rápidamente porque las longitudes de onda de las componentes están más dispersas, y esto hace que la extensión del paquete se reduzca. Un

segundo efecto observado es la reducción de la separación entre los paquetes cuando aumenta el rango. Otro parámetro de importancia es la cantidad de componentes en la suma (N), un aumento de N incrementa la separación entre los paquetes.

La función de modulación que hemos obtenido es una función periódica y no armónica. El físico francés Jean Baptiste Joseph, Barón de Fourier (1768-1830), desarrolló un procedimiento matemático para expresar una función $f(x)$ con periodo espacial λ como la suma de funciones armónicas con longitudes de onda $\lambda, \lambda/2, \lambda/3, \lambda/4, \dots$. Este desarrollo se denomina *Serie de Fourier* y se estudia en el curso de Matemática C. Si $f(x)$ posee período espacial $\lambda = 2L$, es continua y presenta con un número finito de máximos y mínimos en un período, entonces la *serie trigonométrica de Fourier* es:

$$f(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(n 2\pi\kappa x) + b_n \text{sen}(n 2\pi\kappa x)] \quad (6.14)$$

con

$$\begin{cases} a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^{+L} f(x) \cos(n 2\pi\kappa x) dx & (n = 0, 1, 2, \dots) \\ b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^{+L} f(x) \text{sen}(n 2\pi\kappa x) dx & (n = 1, 2, \dots) \end{cases}$$

donde $\kappa = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2L}$ se denomina en esta expresión frecuencia espacial de $f(x)$.

Los coeficientes de Fourier a_n y b_n son factores que pesan la contribución de las diferentes componentes armónicas en la suma. Al ir aumentando el período espacial de la función $f(x)$ su frecuencia espacial $\kappa = \frac{1}{\lambda}$ se reduce y entonces las frecuencias espaciales de las componentes armónicas de la suma se aproximan entre sí cada vez más: $\kappa, 2\kappa, 3\kappa, 4\kappa, \dots$

A partir de la fórmula de Euler $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$, la expresión (6.14) se puede reescribir en una forma más compacta denominada forma serie compleja de Fourier:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n e^{ik_n x} \quad (k_n \equiv n2\pi\kappa) \quad (6.15)$$

con

$$C_n = C_{-n}^* = \frac{1}{2}(a_n - ib_n) = \frac{1}{2L} \int_{-L}^{+L} f(x) e^{-ik_n x} dx \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N$$

De acuerdo con la interpretación de Born de $\langle |\Psi|^2 \rangle$ como una medida de la probabilidad por unidad de volumen de encontrar a la partícula, necesitamos una función de onda que sea nula salvo en una región dentro de la cual sabemos que está la partícula. La función de modulación que estamos buscando $f(x)$ con amplitud no nula dentro de un entorno Δx centrado en la posición de la partícula y nula en todo otro punto. Es decir, buscamos una función con un periodo espacial $\lambda = 2L \rightarrow \infty$, y en esta situación límite $f(x)$ ya no es periódica y las frecuencias espaciales de las componentes ya no son más valores discretos.

Volvamos a la forma compleja del desarrollo de Fourier del siguiente modo

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n e^{i k_n x} \quad (6.16)$$

y escribamos los coeficientes anteriores en términos de la siguiente expresión:

$$F(k_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-L}^{+L} f(x) e^{-ik_n x} dx \quad (6.17)$$

$$C_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^{+L} f(x) e^{-ik_n x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{L}{\pi} F(k_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Delta k_n F(k_n)$$

Entonces el desarrollo de $f(x)$ puede ser reescrito del siguiente modo:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\Delta k_n}{\sqrt{2\pi}} F(k_n) e^{i k_n x} \quad (6.18)$$

En el límite $L \rightarrow \infty \Rightarrow \Delta k_n \equiv k_{n+1} - k_n = \frac{\pi}{L} \rightarrow 0$ entonces la suma discreta se convierte en una integral sobre k :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk F(k) e^{i k x} \quad (6.19)$$

Esta expresión es la *antitransformada de Fourier* de la función $f(x)$.

$$F(k) = \mathcal{F}\{f(x)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-i k x} \quad (6.20)$$

Esta es la expresión para la *transformada de Fourier* de la función $f(x)$.

La antitransformada de $f(x)$ es el desarrollo de la función no periódica $f(x)$ en términos de funciones armónicas con periodos $\lambda = 2\pi/k$. $F(k)$ es el factor de peso correspondiente a la componente armónica de frecuencia angular espacial $k = 2\pi/\lambda$.

Comentarios: La expresión (6.17) el factor $1/\sqrt{2\pi}$ permite mantener la simetría de las expresiones, sin embargo, existen otras maneras de definir estas expresiones. A las variables de la transformada y de su función inversa se las denomina *variables canónicas conjugadas*.

Principio de indeterminación de Heisenberg

El físico teórico alemán Werner K. Heisenberg (1901-1976) dedujo un límite inferior para el producto de las precisiones de los valores de ciertas medidas realizadas simultáneamente. Una de las relaciones que obtuvo establece una restricción al proceso de medición simultánea de la posición y la cantidad de movimiento de una misma entidad física; la otra, fija una condición semejante para la determinación del tiempo y la energía. Estas expresiones se conocen con el nombre de principio o relación de indeterminación, o simplemente, desigualdades de Heisenberg.

Relaciones de indeterminación “posición - momento lineal”

Consideremos que en el instante $t = 0$ el paquete de ondas posee un perfil espacial gaussiano centrado en $x = 0$, entonces, la expresión para esta onda moduladora es:

$$\Psi_0(x, 0) = f(x) = A_x e^{-\frac{1}{2} x^2 / \sigma_x^2} \quad (6.21)$$

donde σ_x es la desviación estándar del paquete de ondas.

Si aplicamos la transformada de Fourier la expresión resultante es:

$$F(k) = \mathcal{F}\{f(x)\}(k) = A_k e^{-\frac{1}{2}\sigma_x^2 k^2} = A_k e^{-\frac{1}{2}k^2/\sigma_k^2} \quad (6.22)$$

$\sigma_k = 1/\sigma_x$, por lo tanto, la extensión espacial del paquete de ondas y la extensión del intervalo de frecuencias espaciales angulares son inversamente proporcionales $\sigma_x \sigma_k = 1$. Un paquete de ondas cada vez menos extenso implica la superposición de ondas armónicas con frecuencias de un rango cada vez más grande.

Expresemos ahora esta transformada en términos de la cantidad de movimiento de la partícula. A partir de la hipótesis de Louis de Broglie, podemos escribir $k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi \frac{p}{h} = \frac{p}{\hbar}$ y entonces

$$F(p) = A_p e^{-\frac{1}{2}\sigma_x^2 \frac{p^2}{\hbar^2}} = A_p e^{-\frac{1}{2}p^2/\sigma_p^2} \quad (6.23)$$

donde hemos identificado a $\sigma_p = \hbar/\sigma_x$, es decir la relación entre las desviaciones estándar de las variables posición y cantidad de movimiento resulta ser:

$$\sigma_x \sigma_p = \hbar \quad (6.24)$$

Esta es la relación deducida por W. Heisenberg en 1927. Sin embargo, las relaciones de indeterminación no se expresan en términos de las desviaciones estándar de las variables de la función de onda $\Psi_0(x)$ y de su transformada $\mathcal{F}\{\Psi_0(x)\}$, sino con las desviaciones estándar de la distribución de probabilidad $|\Psi_0(x)|^2$ y de su transformada de Fourier.

$\Psi_0(x) \propto e^{-\frac{1}{2}x^2/\sigma_x^2}$ y $|\Psi_0(x)|^2 \propto e^{-x^2/\sigma_x^2} = e^{-\frac{1}{2}x^2/(\frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_x)^2} = e^{-\frac{1}{2}x^2/(\sigma'_x)^2}$, entonces la desviación estándar del cuadrado de la función de onda es $\sigma'_x = \frac{\sigma_x}{\sqrt{2}}$. De manera similar hallamos que $\sigma'_p = \frac{\sigma_p}{\sqrt{2}}$. Luego, reemplazando en la expresión (6.24) obtenemos

$$\sigma'_x \sigma'_p = \hbar/2 \quad (6.25)$$

Esta relación expresa el límite teórico para el mejor paquete de ondas que podemos construir. En los casos reales, este producto generalmente es mayor a $\hbar/2$, consecuentemente, al intentar mejorar la manera de ubicar a la partícula perdemos exactitud en el conocimiento de su cantidad de movimiento, y viceversa.

Finalmente, si convenimos en llamar $\Delta x \equiv \sigma'_x$ y $\Delta p_x \equiv \sigma'_p$, la relación entre las incertidumbres posición-momento queda expresado de la forma habitual:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2 \quad (6.26)$$

Es frecuente considerar a los intervalos como los semianchos a media altura de las funciones.

Esta desigualdad establece el alcance de la física clásica al revelar que dos variables de un mismo ente físico no pueden determinarse simultáneamente con una precisión infinitesimal, aun en la hipotética situación de utilizar instrumentos de medición ideales.

Relaciones de indeterminación “tiempo - energía”

Un paquete de ondas con una extensión localizada en el espacio, tiene una duración finita al pasar por un punto fijo del espacio. El paquete de ondas se mueve con la velocidad de grupo v_g , ésta es la velocidad de la partícula cuyas propiedades representa:

$$v_g \equiv \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d\left(\frac{p^2}{2m}\right)}{dp} = \frac{p}{m} = v$$

Si consideremos que en la posición $x = 0$ el paquete de ondas que pasa posee un perfil temporal gaussiano centrado en el instante $t = 0$, entonces, la expresión para esta onda moduladora es:

$$\Psi_0(0, t) = f(t) = A_t e^{-\frac{1}{2}t^2/\sigma_t^2} \quad (6.27)$$

donde σ_t es la desviación estándar del paquete de ondas a lo largo del tiempo.

Si aplicamos la transformada de Fourier la expresión resultante es:

$$F(\omega) = \mathcal{F}\{f(t)\}(\omega) = A_\omega e^{-\frac{1}{2}\sigma_t^2 \omega^2} = A_\omega e^{-\frac{1}{2}\omega^2/\sigma_\omega^2} \quad (6.28)$$

Expresemos esta transformada en términos de la cantidad de la energía de la partícula. A partir de la hipótesis de Einstein, podemos escribir $\omega = 2\pi\nu = 2\pi\frac{E}{h} = \frac{E}{\hbar}$. Luego, realizando un desarrollo análogo al anterior podemos hallar la relación entre las incertidumbres tiempo-energía:

$$\Delta t \Delta E \geq \hbar/2 \quad (6.29)$$

Otra de las formulaciones de las relaciones de Incertidumbre establece la condición para el producto entre las incertidumbres de la posición angular y la cantidad de movimiento angular:

$$\Delta\theta \Delta L_\theta \geq \hbar/2 \quad (6.30)$$

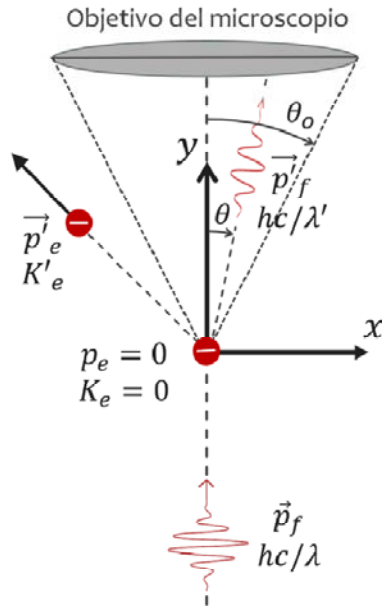
Es importante notar que estas relaciones de incertidumbre no fijan una condición para la precisión de la medida de cada variable en forma independiente, sino que establecen una condición para el producto de las precisiones de dos variables se desean medir simultáneamente en un mismo ente físico. En cualquier proceso de medición simultánea de variables canónicamente conjugadas, las precisiones de las medidas de las variables están interrelacionadas con una desigualdad que establece un límite inferior para su producto.

El microscopio de Heisenberg

Analicemos el experimento mental imaginado por Heisenberg para explicar sus relaciones de incertidumbre. Consideremos un microscopio que permite medir simultáneamente la posición y la velocidad de un electrón. Para poder observar la partícula el microscopio utiliza luz. Pero al iluminar, los fotones interactúan con el electrón y esto perturba al electrón, es decir el electrón luego de dispersar al fotón ya no tiene ni la energía ni la cantidad de movimiento inicial.

Figura 6.5

Dispersión de un fotón por un electrón



$$\vec{p}_f = \vec{p}'_f + \vec{p}'_e$$

$$p_{fx} = p'_{fx} - p'_{ex} = 0$$

$$\Delta p'_{ex} = \Delta p'_{fx} = p'_f \text{sen } \theta_o - [p'_f \text{sen}(-\theta_o)]$$

$$\Delta p'_{ex} = 2 \frac{h}{\lambda'} \text{sen } \theta_o$$

con $2\theta_o$ igual al ángulo de apertura del objetivo. Por otro lado, tenemos que sobre plano imagen del microscopio la imagen que forma el microscopio del electrón consta de un disco central con anillos concéntricos, debida a la difracción de Fraunhofer en el borde circular de la lente. Si tomamos como incertidumbre de la medida de la coordenada x del electrón el diámetro de disco central de la imagen, entonces:

$$\Delta x = 2 r_1 = 1,22 \frac{\lambda'}{D/f} = 1,22 \frac{\lambda'}{\text{sen}\theta_o}$$

D y f son el diámetro y la distancia focal de la lente.

Luego, el producto de las incertidumbres calculadas resulta ser mayor que el límite establecido por de la desigualdad de Heisenberg:

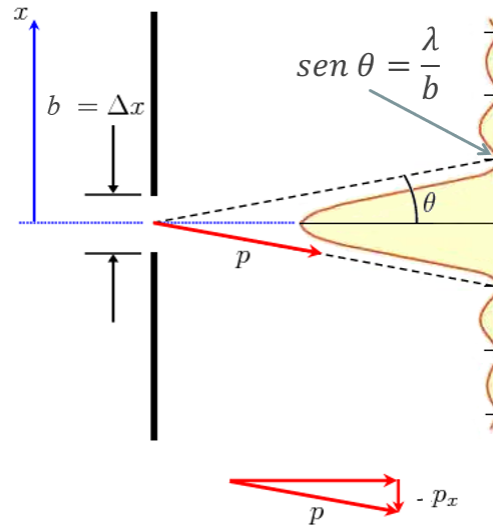
$$\Delta x \Delta p'_{ex} = 1,22 \frac{\lambda'}{\text{sen}\theta_o} 2 \frac{h}{\lambda'} \text{sen } \theta_o = 2,44 h \geq \frac{\hbar}{2}$$

Una manera de obtener un valor más preciso en la medida de la posición Δx es reduciendo la longitud de onda de la radiación. Podemos imaginar que este microscopio funciona con radiación gamma ($\sim 10^{-11} - 10^{-14}m$) pero ahora, para un mismo ángulo de dispersión, la energía del fotón y del electrón dispersado son mayores y entonces $\Delta p'_{ex}$ también aumenta. Concluimos que no es posible reducir simultáneamente las precisiones en ambas medidas tanto como deseemos.

Difracción de electrones en una ranura

Consideremos un haz de electrones que incide perpendicularmente sobre una ranura de ancho b . La cantidad de movimiento promedio de los electrones del haz es \vec{p} , luego su longitud de onda de de Broglie es $\lambda_B = h/p$. Debido al comportamiento ondulatorio de los electrones, sobre la pantalla la distribución del contejo de electrones es la misma que la distribución de irradiancia cuando incide sobre la ranura un haz de radiación electromagnética (EM) con igual longitud de onda ($\lambda = \lambda_B$). En el curso de Física II al estudiar la difracción de ondas EM en ranuras el resultado obtenido es que los mínimos de difracción que limitan la extensión del máximo central se hallan en posiciones angulares que cumplen $\text{sen } \theta = \lambda/b$.

Figura 5.6



Nota. Dispersión de un fotón por una ranura

Los electrones que contribuyen al contaje del máximo central tienen componentes del momento lineal $p_x \in [-p \text{ sen } \theta, p \text{ sen } \theta] = [-p \frac{\lambda_B}{b}, p \frac{\lambda_B}{b}] = [-\frac{h}{b}, \frac{h}{b}]$, entonces la incertidumbre luego de atravesar la ranura resulta ser: $\Delta p_x = 2 \frac{h}{b}$.

Por otro lado, tenemos que la incertidumbre en la coordenada x del electrón al pasar por la ranura es $\Delta x = b$, entonces haciendo el producto de ambas cantidades comprobamos que la relación de Heisenberg se satisface:

$$\Delta x \Delta p_x = 2h \geq \frac{\hbar}{2}$$

Medición de la energía cinética de un electrón clásico

Consideremos un electrón moviéndose en dirección x con velocidad constante $v_x \ll c$. Supongamos que esta medida posee una precisión Δv_x . Su energía cinética será $E = \frac{p_x^2}{2m_e}$ y la incertidumbre del valor medido puede expresarse en términos de $\Delta p_x = m_e \Delta v_x$:

$$\Delta E = v_x \Delta p_x = \frac{\Delta x}{\Delta t} \Delta p_x \quad \Delta t: \text{duración de la medición}$$

entonces

$$\Delta t \Delta E = \Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

El producto de las incertidumbres halladas satisface la desigualdad de Heisenberg.

Comentarios sobre las desigualdades de Heisenberg

Inicialmente Heisenberg utilizó las palabras incerteza, luego imprecisión y finalmente adoptó el término indeterminación para describir sus relaciones. Éstas no hacen referencia a la ignorancia del observador ni a la resolución del instrumento de medida que utiliza. La imposibilidad en la determinación del valor de dos variables relacionadas en forma simultánea con precisión infinitesimal es una característica propia de la naturaleza.

Heisenberg en su trabajo publicado en 1927 en la revista *Zeitschrift fur Physik*, presentó una deducción de las expresiones para las relaciones de incertidumbre, éstas no fueron formuladas como hipótesis. Gregorio Klimovsky define a los “principios” como premisas a partir de las cuales mediante deducciones se desarrolla el resto de una teoría. En este sentido, la palabra “principio” no es estrictamente correcta para hacer referencia a las relaciones de Heisenberg.

Estas desigualdades muestran la indeterminación en las precisiones de dos magnitudes conjugadas medidas simultáneamente. Esto redefine el concepto de trayectoria de una partícula. La trayectoria de las partículas cuánticas es “borrosa”. Para cada instante, no es posible conocer simultáneamente la posición y la velocidad de una partícula con precisiones infinitesimales. La imposibilidad de conocer el estado actual de una partícula con precisión ideal hace imposible conocer con todo detalle sus estados futuros.

Las desigualdades de Heisenberg junto al principio de complementariedad de Bohr y a la interpretación probabilística de la función de ondas de Born conforman una interpretación lógica del significado físico de la mecánica cuántica conocida como la “Interpretación de Copenhague”.

Usos y aplicaciones de las propiedades ondulatorias

Los microscopios electrónicos MET y SEM

El *poder de resolución* es la distancia transversal mínima entre dos puntos del objeto que se pueden resolver en la imagen. El ojo humano normal posee un poder de resolución de $100 \mu m$. Para poder observar objetos más pequeños que un cabello humano, cuyo grosor medio es aproximadamente $70 \mu m$, fue necesario desarrollar instrumentos que formen imágenes aumentadas. En 1590 Jansen de Holanda inventó el microscopio compuesto, unos años más tarde Galileo construyó su microscopio compuesto. El posterior desarrollo de la teoría ondulatoria de la luz permitió importantes avances en el conocimiento de la formación de imágenes. Los aportes teóricos de Joseph von Fraunhofer (1787-1826) y posteriormente de quien trabajaba para la compañía Carl Zeiss, Ernst Abbe (1840-1905), permitieron mejorar la calidad de las imágenes de los microscopios. Fue Abbe quien afirmó que para mejorar el poder de resolución de los microscopios compuestos se necesitaba de longitudes de onda mucho más cortas que las de la luz visible, entonces, se supo que el poder de resolución de un microscopio óptico tenía un

límite teórico inferior bien definido. Un microscopio de luz ultravioleta (400 nm) permite distinguir detalles con esas dimensiones, pero no menores.

Fue necesario lograr varios avances en ciencia y en tecnología para reducir el poder de resolución de los microscopios. En 1897, Joseph John Thomson anunció el descubrimiento del electrón. En 1910, Robert Millikan demostró experimentalmente que las cargas eléctricas son múltiplos de un valor fundamental, la carga del electrón. En 1926, Busch que demostró que un haz de electrones podía ser desviado por lentes magnéticas de manera similar a la forma en que los rayos de luz se desvían al atravesar una lente óptica. En 1924, Louis de Broglie introdujo la hipótesis de que partículas con masa, como los electrones, podrían describirse no solo como corpúsculos sino también como ondas. Estos y otros importantes descubrimientos en ciencia básica junto con los grandes desarrollos en tecnología fueron las bases para que fuese posible el desarrollo del primer tipo de microscopio que funcionó con electrones en vez de luz. En 1931, los alemanes Max Knott y Ernst Ruska inventaron el microscopio electrónico de transmisión (MET). Este equipo posee un tubo con alto vacío dentro del cual existe una diferencia de potencial eléctrico que acelera a los electrones y con electroimanes se dirigen para conformar un haz que incide sobre una de las caras de la delgada muestra. La energía cinética que adquieren los electrones sometidos a un potencial acelerador ΔV es $E = e\Delta V$, luego la longitud de onda de Broglie asociada a los electrones del haz es $\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m e \Delta V}}$. El haz que emerge de la cara opuesta de la película permite la formación de la imagen de la superficie. En 1945, el poder de resolución del MET llegó a ser de 1 nm, en la actualidad el poder de resolución de un MET es 0,2 nm con un aumento de $\times 10^6$.

En 1937, el físico alemán Manfred von Ardenne (1907-1997) inventó otro tipo de microscopio electrónico denominado microscopio electrónico de barrido (MEB), más conocido con la sigla SEM por *Scanning Electron Microscope*. Este equipo también utiliza un haz de electrones que al acelerados mediante una diferencia de potencial eléctrico de hasta 30.000 V permiten lograr electrones con longitudes de onda de Broglie de 0,4 Å. Las superficies de las muestras deben ser conductoras eléctricas, por esta razón se recubren con una capa de carbón o una capa delgada de un metal. El haz de electrones “barre” la superficie metálica y ésta responde emitiendo principalmente electrones (electrones secundarios) y rayos X (característicos). A partir de los electrones secundarios se genera la imagen tridimensional de la superficie, la cual presenta una gran profundidad de campo y alta resolución. La posibilidad de identificar las energías de los rayos X característicos permite efectuar un análisis de la composición atómica de la muestra. El poder de resolución de un SEM es 10 nm con un aumento de $\times 10^6$.

Los microscopios de efecto túnel (STM, *scanning tunneling microscope*) permiten realizar imágenes tridimensionales con resoluciones de 0,001 nm (en dirección vertical) y de 0,1 nm en dirección horizontal. El funcionamiento de tipo de microscopios se basa en un fenómeno cuántico sin análogo clásico, el efecto túnel. El Premio Nobel de Física de 1986 fue compartido por Ernst Ruska por sus aportes en óptica electrónica y por el diseño del primer microscopio electrónico y por Gerd Binnig y Heinrich Rohrer por el diseño del microscopio de efecto túnel.

Problemas resueltos

Problema 1: La velocidad de una bala de $m = 40 \text{ g}$ y la velocidad de un electrón se miden y resultan iguales $v = 430 \text{ m/s}$, con una incertidumbre de $0,01\%$. ¿Cuál será la exactitud fundamental con que se podrá determinar la posición de cada una, si la posición y la velocidad se miden simultáneamente en el mismo experimento?

Solución:

La incertidumbre en la velocidad es $\Delta v = \left(\frac{0,01}{100}\right) \cdot 430 \frac{\text{m}}{\text{s}} = 0,043 \text{ m/s}$

Luego para la bala, la incertidumbre en la cantidad de movimiento será:

$$\Delta p = m\Delta v = (0,04 \text{ kg}) \cdot 0,043 \frac{\text{m}}{\text{seg}} = 1,72 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{m/seg}$$

Así, utilizando el principio de incertidumbre, la incertidumbre en la posición de la bala será:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p} = 3,07 \cdot 10^{-32} \text{ m}$$

Por lo tanto, para objetos macroscópicos, el principio de incertidumbre no impone límites prácticos en el procedimiento de medición.

Luego, para el electrón, obtenemos:

$$\Delta p = m\Delta v = (9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}) \cdot 0,043 \frac{\text{m}}{\text{seg}} = 3,92 \cdot 10^{-32} \text{ kg} \cdot \text{m/seg}$$

Así la incertidumbre en la posición del electrón será:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p} = 1,34 \cdot 10^{-3} \text{ m} = 1,34 \text{ mm}$$

En el caso de objetos microscópicos, como electrones, vemos que la incertidumbre Δx resulta del orden de 10^7 veces el diámetro de un átomo.

Problema 2: El poder de resolución más alto posible de un microscopio se limita solamente por la longitud de onda que utilice; es decir, el detalle más fino que puede ser separado es aproximadamente igual a la longitud de onda utilizada. Supóngase que se quiere “ver” dentro de una distancia de 10 nm .

a) Si se utiliza un microscópico electrónico ¿cuál será la energía mínima de los electrones que se requieren?

b) Si se utiliza un microscopio de fotones, ¿cuál será la energía requerida de los fotones?

c) ¿Cuál será la incertidumbre en la velocidad de un protón localizado de ese modo?

Solución: a) El poder de resolución más alto posible del microscopio se limita solamente por la longitud de onda que utilice y si se quiere “ver” dentro de una distancia de 10 nm , la máxima longitud de onda del microscopio para detectar dicha distancia deberá ser $\lambda = 10 \text{ nm}$.

Utilizando de Broglie podemos calcular la cantidad de movimiento mínima que deberán tener los electrones:

$$p = \frac{h}{\lambda} = 6,626 \cdot 10^{-26} \text{ kg m/s}$$

Entonces la energía cinética mínima de tales electrones será:

$$E_{c\text{mín}} = \frac{p^2}{2m_e} = 2,41 \cdot 10^{-21} \text{ J} = 0,015 \text{ eV}$$

b) En el caso de fotones, la energía mínima necesaria que deberán tener, siendo la longitud de onda máxima $\lambda = 10 \text{ nm}$, será:

$$E_f = \frac{hc}{\lambda} = 1,99 \cdot 10^{-17} \text{ J} = 124,24 \text{ eV}$$

c) La incertidumbre en la posición de un protón es $\Delta x = 10 \text{ nm}$. Con el principio de incertidumbre podemos calcular la indeterminación en la cantidad de movimiento:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \rightarrow \Delta p = 5,27 \cdot 10^{-27} \text{ kg m/s}$$

Realizando propagación de errores y considerando al electrón como clásico de podemos estimar la incerteza en la velocidad del protón ($m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$):

$$\Delta p = m_p \cdot \Delta v \rightarrow \Delta v = \frac{\Delta p}{m_p} = 3,15 \text{ m/s}$$

Problema 3: a) Los estados excitados de los átomos poseen vidas medias típicas de 10^{-8} s y durante este tiempo emiten un fotón al pasar de su estado de inicial a otro de menor energía. A partir de la relación de incertidumbre de Heisenberg $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$ calcule:

a) La incertidumbre en la energía del estado excitado del átomo.

b) La incertidumbre $\Delta \nu$ en la frecuencia del fotón.

c) Si la mayoría de los fotones emitidos corresponden a la línea espectral visible $\lambda = 589 \text{ nm}$, ¿cuánto vale el cociente $\Delta \nu / \nu$ (llamado *amplitud natural* de la línea espectral)?

Solución:

a) La energía del estado excitado de los átomos no se puede medir con precisión ya que solo se tiene un tiempo finito para realizar la medida. El átomo no permanece en el estado excitado un tiempo infinito, sino que decae a su estado de energía más baja emitiendo un fotón. Si $\Delta t = 10^{-8} \text{ s}$ es la vida media del estado excitado, haciendo uso del principio de incertidumbre podemos calcular la incertidumbre en la medida de la energía del estado excitado del átomo:

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta t} = 5,27 \cdot 10^{-27} \text{ J}$$

b) De acuerdo con el principio de conservación de la energía, la dispersión en la energía del fotón emitido debe ser igual a la dispersión en la energía del estado excitado del átomo. Luego, la incertidumbre $\Delta \nu$ en la frecuencia del fotón la podemos calcular a partir de la incertidumbre en la energía ya que $\Delta E = h \Delta \nu$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow h \cdot \Delta \nu \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta \nu = \frac{\hbar}{2h\Delta t} = \frac{1}{4\pi(10^{-8} \text{ s})} = 7,96 \text{ MHz}$$

c) Para $\lambda = 589 \text{ nm}$ se tiene:

$$v = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{589 \text{ nm}} = 5,09 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

Por lo tanto:

$$\frac{\Delta v}{v} = \frac{7,96 \cdot 10^6 \text{ Hz}}{5,09 \cdot 10^{14} \text{ Hz}} = 1,56 \cdot 10^{-8}$$

Problemas propuestos

Problema 1: Calcular la longitud de onda, la frecuencia y la velocidad de fase asociada a electrones con velocidades de $10^{-5} c$ y $0,99 c$.

Problema 2: Una bala de 40 g viaja 1.000 m/s .

- ¿Qué longitud de onda se le puede asociar?
- ¿Por qué no se observa la naturaleza ondulatoria de la bala por medio de efectos de difracción?

Problema 3: La longitud de onda de la emisión amarilla del sodio es 589 nm . ¿Qué energía cinética tendría que tener un electrón para la misma longitud de onda de de Broglie? Compárela con la energía del fotón del haz amarillo del sodio.

Problema 4: Un neutrón térmico tiene una energía cinética de $3kT/2$, donde T es la temperatura ambiente 300 K . Tales neutrones están en equilibrio térmico con alrededores normales.

- ¿Cuál es la energía en eV de un neutrón térmico?
- ¿Cuál será su longitud de onda de de Broglie?

Problema 5: ¿Cuáles son la frecuencia, longitud de onda e impulso de un fotón cuya energía es igual a la energía de masa en reposo de un electrón?

Problema 6: El acelerador de electrones de 50 GeV ($50 \cdot 10^9 \text{ eV}$) de la Universidad de Stanford, proporciona un haz de electrones con longitud de onda muy corta, adecuados para sondear los detalles finos de la estructura nuclear, por medio de experimentos de dispersión. ¿Cuál es esta longitud de onda y cómo se compara con las dimensiones de un núcleo promedio?

Sugerencia: A estas energías, es más sencillo utilizar la relación relativista extrema entre la energía y el impulso $p = E/c$. Esta es la misma relación utilizada para fotones y se justifica siempre que la energía cinética de una partícula sea mucho mayor que su energía en reposo $m_0 c^2$, como en este caso.

Problema 7: Demuestre que suponer que los radios de las órbitas permitidas en el átomo de Bohr encierran un número entero de longitudes de onda de de Broglie de la onda asociada al electrón en el átomo de hidrógeno es equivalente al postulado de Bohr de cuantificación del momento angular.

Problema 8: En la experiencia de Davisson-Germer uno de los picos de difracción observados ocurría a un ángulo de 45° para un haz de electrones de 64 eV . Determinar la separación de los planos cristalinos responsables de este pico.

Problema 9: El espaciamiento principal entre planos de un cristal de cloruro de potasio es $3,14 \text{ \AA}$. Compare el ángulo para una reflexión de Bragg de primer orden de estos planos, de electrones con energía cinética de 40 keV con el correspondiente a fotones de 40 keV .

Problema 10: Un haz de electrones de 25 eV incide sobre dos rendijas separadas entre sí por $1 \mu\text{m}$. Determinar la separación entre un máximo y el mínimo más próximo cuando se observan en una pantalla colocada a 1 m de las rendijas.

Problema 11: Cite ejemplos de cómo el proceso de medición perturba el sistema que se mide.

Problema 12: Se hace una medida de la coordenada y de un electrón que viaja en un haz de electrones de un ancho determinado y que se propaga en la dirección del eje x . Se introduce una rendija de ancho Δy transversal a la dirección x del haz. Demuestre que esto produce una incerteza Δp_y en la componente y del impulso del electrón, tal que $\Delta y \Delta p_y \geq \hbar/2$, es decir cumpliendo con el principio de incertidumbre. Sugerencia: considere la difracción de la onda del electrón a través de la rendija.

Problema 13: En un átomo de H la vida media de un electrón en el primer estado excitado es de 1 ns . Al desexcitarse emite un fotón. Calcular las indeterminaciones en:

- La energía E .
- La frecuencia f .
- La longitud de onda λ

Problema 14: Calcular la indeterminación en la velocidad y la energía cinética media mínima de un electrón y de un protón, confinados en una zona de $4,3 \cdot 10^{-10} \text{ m}$.

Problema 15: Si una partícula se encuentra en un estado de energía conocido con una precisión de $1,1 \text{ eV}$, ¿Cuál es el promedio temporal de permanencia en ese estado?

CAPÍTULO 7

Mecánica cuántica: Ecuación de Schrödinger 1D

Introducción

Existen experimentos de interferencia que demuestran que las partículas de sistemas microscópicos se mueven de acuerdo con las leyes del movimiento ondulatorio y no con las leyes newtonianas de los sistemas macroscópicos.

En la Mecánica Cuántica, que es el ámbito de la Física de la escala atómica, encontramos que la luz y las partículas tienen un comportamiento dual. Los objetos cuánticos, se comportan alternativamente como ondas y como partículas. Según cómo se observe o según el tipo de experimento que se haga, la luz se manifiesta como si estuviese constituida de partes separadas, concentradas o como si la energía estuviese distribuida, como una onda.

Al físico Louis de Broglie se le ocurrió proponer, que esa complementariedad de comportamientos que presenta la luz, también se presenta en el caso de las partículas microscópicas. Las partículas tradicionales, como los protones o electrones, también podrían actuar como ondas. Efectivamente, se puede definir, a partir de la propuesta de Louis de Broglie, una longitud de onda, como la correspondiente a la luz, asociada a las partículas, y se pueden reproducir experimentos ondulatorios (interferencia y difracción, por ejemplo) equivalentes a los que se hacen con la luz, pero con partículas.

De aquí surge la necesidad de desarrollar una ecuación y una teoría para las ondas de la materia. Esto lo realizó Schrödinger, quien formuló la Mecánica Ondulatoria. La interpretación de las soluciones de la Mecánica fue realizada por Max Born. Y esta interpretación tiene que ver con el concepto de probabilidad y con el principio de incerteza.

La teoría de Schrödinger especifica las leyes del movimiento ondulatorio que obedecen las partículas de un sistema microscópico y proporciona un procedimiento general para tratar su comportamiento. Define para cada sistema, la ecuación que controla el comportamiento de la función de onda y la conexión entre el comportamiento de la función de onda y el de la partícula. La teoría es una extensión del postulado de de Broglie incorporando la constante universal \hbar , introducida por Max Planck. Además, es una generalización que recupera a la teoría de Newton en el límite $\hbar \rightarrow 0$.

La ecuación de Schrödinger unidimensional a partir de los postulados de de Broglie-Einstein

La ecuación de onda para una cuerda tensa se puede derivar de la ley de Newton y la ecuación de onda electromagnética se puede derivar de las ecuaciones de Maxwell; pero no se puede esperar derivar la ecuación de onda de la mecánica cuántica de ninguna de las ecuaciones de la Física Clásica. En cambio, sí se puede obtener esa ecuación a partir de los postulados de de Broglie-Einstein y de dos suposiciones más concernientes a las propiedades deseables de la ecuación de onda de la mecánica cuántica:

De Broglie-Einstein:

La ecuación de onda debe ser congruente con:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad y \quad \nu = \frac{E}{h} \quad (7.1)$$

Que asocian la longitud de onda λ de la función de onda con el impulso lineal p de la partícula y la frecuencia ν de la función de onda con la energía total E de la partícula. Notemos la aparición de la constante de Planck $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}$. A continuación se enumeran las condiciones que debe cumplir la ecuación diferencial.

Condición I:

La ecuación diferencial deberá ser consistente

Deberá ser coincidente con la ecuación de conservación de la energía, que relaciona la energía total E de una partícula de masa m con su energía cinética y su energía potencial:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (7.2)$$

Condición II:

Deberá ser lineal en $\Psi(x, t)$. Es decir, si $\Psi_1(x, t)$ y $\Psi_2(x, t)$ son dos soluciones diferentes, entonces cualquier combinación lineal arbitraria de estas soluciones también lo será:

$$\Psi(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t)$$

Este requisito de linealidad asegura que se podrán sumar funciones de onda para producir las interferencias constructivas y destructivas de las ondas.

La energía potencial generalmente es una función de x y de t , pero existe un caso importante que es el de la partícula libre en el que $V(x, t) = V_0$ constante, ya que la fuerza que actúa sobre la partícula está dada por:

$$F = -\frac{\partial V(x, t)}{\partial x} = 0$$

y eso ocurre cuando $V(x, t)$ es constante.

Reemplazando las relaciones de de Broglie-Einstein Ec. (7.1) en la ecuación de la energía Ec. (7.2) se obtiene:

$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2} + V_0 = h\nu \quad (7.3)$$

A partir de las expresiones:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}; \quad \omega = 2\pi\nu \quad y \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (7.4)$$

Se encuentra:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar\omega \quad (7.5)$$

Se puede motivar la ecuación de Schrödinger a partir de la solución de la partícula libre, cuya expresión matemática podría ser una combinación como la siguiente:

$$\Psi(x, t) = c_1 e^{i(kx - \omega t)} + c_2 e^{-i(kx + \omega t)} \quad (7.6)$$

El efecto de tomar la segunda derivada del espacio, introducirá un factor k^2 mientras que el efecto de tomar la primera derivada en el tiempo introduce un factor ω . Y como lo que se pretende es que la ecuación diferencial sea consistente con Ec. (7.5) que contiene un factor k^2 en un término y un factor ω en otro, se infiere que la ecuación diferencial deberá contener una segunda derivada espacial de $\Psi(x, t)$ y una primera derivada temporal de $\Psi(x, t)$. Pero también, deberá haber un factor $\Psi(x, t)$ en el término que contiene a V_0 para asegurar la linealidad. Se puede bosquejar la siguiente forma para la ecuación diferencial:

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V_0 \Psi(x, t) = \beta \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (7.7)$$

Evaluando las derivadas se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= -i\omega c_1 e^{i(kx - \omega t)} - i\omega c_2 e^{-i(kx + \omega t)} = -i\omega \Psi(x, t) \\ \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} &= ikc_1 e^{i(kx - \omega t)} - ikc_2 e^{-i(kx + \omega t)} \\ \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} &= -k^2 c_1 e^{i(kx - \omega t)} - k^2 c_2 e^{-i(kx + \omega t)} = -k^2 \Psi(x, t) \end{aligned} \quad (7.8)$$

Reemplazando Ec. (7.8) en Ec. (7.7) se obtiene:

$$\alpha(-k^2 \Psi(x, t)) + V_0 \Psi(x, t) - \beta(-i\omega \Psi(x, t)) = 0$$

Lógicamente, para que la igualdad ocurra para todas las combinaciones posibles de las variables independientes x y t , es necesario que los coeficientes de los cosenos y de los senos sean cero, entonces obtenemos un sistema de ecuaciones:

$$-\alpha k^2 + V_0 = -\beta \omega i \quad (7.9)$$

Si comparamos con la Ec. (7.5) se deduce que $\alpha = -\hbar^2/2m$ y $\beta = -i\hbar$.

Así obtenemos la ecuación diferencial parcial en una dimensión, desarrollada por Erwin Schrödinger en 1926 que establece la forma de la función de onda $\Psi(x, t)$:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (7.10)$$

La cual satisface las cuatro suposiciones hechas para la ecuación de la Mecánica Cuántica.

Esta ecuación fue hallada tomando el caso especial en que $V(x, t) = V_0$. Para el caso más general, en que $V(x, t)$ es una función que depende de t y x , no es posible demostrarlo, pero sí postularlo y demostrar su validez mediante la experimentación.

Esta ecuación no es válida para partículas que se mueven a velocidades relativistas, ya que fue diseñada haciendo uso de Ec. (7.2), la ecuación de la energía clásica. De hecho, la mecánica cuántica relativista de una partícula no es una teoría consistente y debe ser formulada como una teoría de muchas partículas (Teoría cuántica de campos, QFT)

La presencia de i en la ecuación de Schrödinger implica que las funciones de onda serán complejas, y esto hace evidente que no es inmediata su interpretación física.

Interpretación de Max Born de las funciones de onda

La conexión básica entre las propiedades de la función de onda $\Psi(x, t)$ y el comportamiento de la partícula asociada está expresada en términos de la densidad de probabilidad $P(x, t)$. Esta cantidad especifica la probabilidad, por unidad de longitud del eje x de encontrar a la partícula en la vecindad de la coordenada x al tiempo t .

En 1926 Max Born enunció al respecto el siguiente postulado: "Si en el instante t se realiza una medición para localizar a la partícula asociada con la función de onda $\Psi(x, t)$ entonces la probabilidad $P(x, t)dx$ de encontrar a la partícula en una coordenada entre x y $x + dx$ es igual a $\Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx$.

Según este postulado, la relación entre la densidad de probabilidad y la función de onda es:

$$P(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) \geq 0$$

donde $\Psi^*(x, t)$ representa la función conjugada de $\Psi(x, t)$. La partícula deberá estar en algún sitio en el que las ondas tengan una amplitud apreciable. Por lo tanto $P(x, t)$ deberá tener un valor apreciable donde $\Psi(x, t)$ tenga un valor apreciable. Puesto que la cantidad densidad de probabilidad $P(x, t)$ es real y no negativa, mientras que la función de onda $\Psi(x, t)$ es compleja, no sería inconsistente al igualar $P(x, t)$ con $\Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$ que siempre es real y positiva.

Las predicciones de la mecánica cuántica son estadísticas. La teoría no predice que una partícula con un estado de energía dado se encontrará en una localización precisa a cierto tiempo, sino solamente, las probabilidades de hallarlas en distintas localizaciones. Y es el principio de incertidumbre el que provee la razón fundamental por la cual la Mecánica Cuántica misma se expresa en probabilidades y no en certidumbres.

La Mecánica Cuántica implica también que el concepto de observación debe ser revisado: definir al observador, a lo observado y cómo es la interacción entre ambos. Por ejemplo, se puede percibir un objeto macroscópico iluminándolo, pero ocurre que en la escala microscópica del átomo, el proceso de iluminación afecta al sistema observado de manera que no se puede despreciar, ya que los fotones enviados son absorbidos por los electrones, variando éstos sus estados cuánticos. Así se está modificando el sistema que se quiere observar. De esta manera,

existe una imposibilidad de medir simultáneamente ciertas magnitudes físicas, lo que conduce a relaciones de incerteza. Hay una ley de la naturaleza que nos dice que a nivel atómico existe un límite en la precisión de la determinación simultánea de pares de variables como serían la posición y la velocidad de una partícula. Este es el contenido de las relaciones de incerteza de Heisenberg.

Valores de expectación

La función de onda contiene información acerca del comportamiento de la partícula asociada y especifica la densidad de probabilidad para la partícula. Pero además se puede extraer información adicional acerca de su posición, impulso, energía y otras cantidades dinámicas que caracterizan su comportamiento.

Una de ellas es la coordenada x de la posición: en una medición de la posición de la partícula en un sistema descrito por la función de onda, existirá una probabilidad finita de encontrarla en cualquier coordenada x en el intervalo de x a $x + dx$ siempre que la función de onda no sea cero en este intervalo. Es posible especificar una posición promedio para la partícula. Si se hace un cierto número de veces una medición de la posición x en un instante t sobre sistemas idénticos, se puede utilizar el promedio de los valores observados para caracterizar la posición de una partícula asociada con la función de onda $\Psi(x, t)$. Este valor promedio se lo denomina valor de expectación y estará dado por:

$$\bar{x}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)x\Psi(x, t) dx$$

Un ejemplo sería un conjunto de mediciones de las coordenadas x de las partículas en los estados de menor energía de osciladores armónicos simples idénticos. En tres dimensiones, un ejemplo sería un conjunto de mediciones de las posiciones de los electrones en átomos de hidrógeno con todos los átomos en sus estados de menor energía.

Otra magnitud es la energía potencial:

$$\bar{V}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)V(x, t)\Psi(x, t) dx$$

Aunque la función dependa explícitamente del tiempo, el valor de expectación calculado es válido ya que todas las mediciones hechas para evaluar $V(x, t)$ se hacen para el mismo valor de t .

Otra cantidad dinámica es el impulso p :

$$\bar{p}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)p\Psi(x, t) dx$$

Sin embargo, para evaluar esta integral se deberá expresar el integrando $\Psi^*(x, t)p\Psi(x, t)$ como una función de las variables x y/o t . Pero en la mecánica cuántica el principio de incertidumbre establece que no es posible escribir el impulso como una función de x , ya que p y x no pueden conocerse simultáneamente con completa precisión.

En cambio, existe otra manera de relacionar al impulso en términos de x . Sea la función de onda de una partícula libre:

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

Diferenciando respecto a x se tiene:

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = ikAe^{i(kx - \omega t)}$$

Y reemplazando $k = p/\hbar$:

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = i\frac{p}{\hbar}\Psi(x, t)$$

Lo cual indica que existe una asociación entre la cantidad dinámica p y el operador diferencial $-i\hbar(\partial/\partial x)$. Esto es, el efecto de multiplicar la función $\Psi(x, t)$ por p es el mismo que el efecto de operar sobre ella con el operador diferencial $-i\hbar(\partial/\partial x)$.

$$p \leftrightarrow -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\right) \quad (7.11)$$

El mismo procedimiento se puede realizar para la cantidad dinámica de la energía E :

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)E\Psi(x, t) dx$$

Para evaluar esta integral se deberá expresar el integrando $\Psi^*(x, t)E\Psi(x, t)$ como una función de las variables x y/o t . Existe una manera de relacionar la energía en términos de t . Sea la función de onda de la partícula libre y diferenciando respecto a t se tiene:

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -i\omega Ae^{i(kx - \omega t)}$$

Y reemplazando $\omega = E/\hbar$:

$$E\Psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$$

Lo cual indica que también existe una asociación entre la cantidad dinámica E y el operador diferencial $i\hbar(\partial/\partial t)$. Esto es, el efecto de multiplicar la función $\Psi(x, t)$ por E es el mismo que el efecto de operar sobre ella con el operador diferencial $i\hbar(\partial/\partial t)$.

$$E \leftrightarrow i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\right) \quad (7.12)$$

A partir de reemplazar Ec. (7.11) y Ec. (7.12) en la ecuación de conservación de la energía que relaciona la energía E con el impulso p y la energía potencial $V(x, t)$:

$$\frac{p^2}{2m} + V(x, t) = E$$

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)\right)^2 + V(x, t) = i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)$$

Y operando algebraicamente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

La cual es una ecuación de operadores. Tiene significado cuando se la aplica a cualquier función de onda $\Psi(x, t)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (7.13)$$

Justamente esta es la ecuación de Schrödinger argumentada en Ec. (7.10).

La función de onda $\Psi(x, t)$ nos permite conocer no solo la densidad de probabilidad $P(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$. También podemos conocer el valor de expectación de la coordenada x , la energía potencial V , el impulso p , la energía total E y en general el valor de expectación de cualquier cantidad dinámica $f(x, p, t)$. De hecho, la función de onda contiene toda la información que el principio de incertidumbre permite, de la partícula asociada.

La ecuación de Schrödinger unidimensional, independiente del tiempo

La ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial parcial ordinaria y una de las técnicas utilizadas para su resolución es la llamada “*separación de variables*”. Dicho método consiste en buscar soluciones en las cuales la función de onda $\Psi(x, t)$ se pueda escribir como el producto:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t) \quad (7.14)$$

donde el primer factor del segundo miembro es una función únicamente de x y el segundo lo es sólo de t . Se supondrá la existencia de soluciones de esta forma, las cuales existirán siempre que la energía potencial no dependa explícitamente del tiempo t , de modo que $V(x, t) = V(x)$. Puesto que en la mecánica cuántica casi todos los sistemas tienen energía potencial de esta forma, la condición no es una restricción muy seria.

Sustituyendo Ec. (7.14) en Ec. (7.10) y restringiendo a la energía potencial de manera que sea independiente del tiempo $V(x)$, se obtiene:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)\varphi(t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x)\varphi(t) &= i\hbar \frac{\partial \psi(x)\varphi(t)}{\partial t} \\ -\frac{\hbar^2 \varphi(t)}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\varphi(t) &= i\hbar \psi(x) \frac{d\varphi(t)}{dt} \end{aligned}$$

Dividiendo ambos miembros de la ecuación por $\psi(x)\varphi(t)$, se tiene:

$$\frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \right] = i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt} \quad (7.15)$$

El primer miembro no depende de t y el segundo miembro no depende de x , entonces su valor común no puede depender ni de x ni de t . El valor común deberá ser una constante G llamada constante de separación. Así se puede transformar la ecuación diferencial parcial simple en dos ecuaciones diferenciales ordinarias, acopladas por el factor G .

$$\frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \right] = G \quad (7.16)$$

$$i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt} = G \quad (7.17)$$

Reordenando la Ec. (7.17) se obtiene:

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{iG}{\hbar} \varphi(t)$$

Esta ecuación diferencial tiene solución del tipo:

$$\varphi(t) = e^{\alpha t}$$

Verificando mediante diferenciación esta solución se obtiene:

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = \alpha e^{\alpha t} = \alpha \varphi(t)$$

Es decir:

$$\alpha \varphi(t) = -\frac{iG}{\hbar} \varphi(t)$$

Resultando:

$$\alpha = -\frac{iG}{\hbar}$$

Por lo tanto, la solución propuesta satisface la ecuación:

$$\varphi(t) = e^{-\frac{iG}{\hbar}t} \quad (7.18)$$

Se puede observar que $\varphi(t)$ es una función oscilatoria en el tiempo, de frecuencia angular $\omega = G/\hbar$ y de frecuencia $\nu = G/h$. Pero según los postulados de de Broglie-Einstein, la frecuencia también deberá estar dada por $\nu = E/h$, donde E es la energía total de la partícula asociada con la función de onda correspondiente a $\varphi(t)$. Comparando estas expresiones se ve que la constante de separación deberá ser igual a la energía total de la partícula:

$$G = E$$

Utilizando este valor de G en Ec. (7.16) se tiene la ecuación de Schrödinger, para el caso unidimensional, independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (7.19)$$

Y reemplazando este valor de G en la solución de la ecuación temporal Ec. (7.18):

$$\varphi(t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \quad (7.20)$$

Así la función de onda resulta:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t) = \psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \quad (7.21)$$

A la Ec. (7.19) se la llama la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, ya que la variable t no interviene. A sus soluciones $\psi(x)$ se las denomina funciones de onda independientes del tiempo y determinan a través de Ec. (7.21) la dependencia espacial de las soluciones $\Psi(x, t)$. Para los casos unidimensionales la ecuación de Schrödinger solamente

puede contener una variable independiente y por lo tanto será una ecuación diferencial ordinaria. Si hay más dimensiones espaciales, la ecuación contendrá más variables independientes y por lo tanto será una ecuación diferencial parcial.

Para que una función de onda independiente del tiempo sea aceptable, se requiere que tanto $\psi(x)$ como su derivada $d\psi(x)/dx$ sean finitas, monovaluadas y continuas. Si no lo fuesen, tampoco lo serían la respectiva función de onda $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$ o su derivada $\partial\Psi(x, t)/\partial x = d\psi(x)/dx e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$. Este requisito surge debido a que, para calcular los valores de expectación de los diferentes parámetros, estamos en presencia de los términos $\Psi(x, t)$ y $\partial\Psi(x, t)/\partial x$ en las integrales y se ve que en cualquiera de los casos no se obtendrían valores finitos y definidos cuando se evalúan cantidades medibles. Para que $d\psi(x)/dx$ sea finita, es necesario que $\psi(x)$ sea continua ya que cualquier función tiene siempre una primera derivada infinita si tiene una discontinuidad. Además $d\psi(x)/dx$ debe ser continua ya que en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se está en presencia del factor $d^2\psi(x)/dx^2$, y se puede observar que para que $V(x)$, E y $\psi(x)$ sean finitas, $d^2\psi(x)/dx^2$ debe ser finita. Por último, imponemos que, para ser admisible, la función de onda debe ser localmente integrable.

Soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

Se resolverá la ecuación de Schrödinger en una dimensión, para ciertos potenciales independientes del tiempo, con el objetivo de predecir los fenómenos cuánticos y ganar intuición sobre $\psi(x)$ y sus propiedades.

Potencial cero

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo más simple es aquella en la cual $V(x)$ es constante. Una partícula que se mueve bajo la acción de una energía potencial constante es una partícula libre, ya que la fuerza que actúa sobre ella es $F = -dV(x)/dx = 0$. De esta manera, se puede escoger arbitrariamente $V(x) = 0$ sin perder generalidad.

Para encontrar el comportamiento predicho por la mecánica cuántica para una partícula libre, se resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo haciendo $V(x) = 0$:

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

La solución general de la función de onda es:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad x \in \mathbb{R} \quad \text{con } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (7.22)$$

El valor de k se calcula de manera que satisfaga la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (ik)^2 A e^{ikx} + (-ik)^2 B e^{-ikx} = -k^2 \psi(x)$$

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

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Y la función de onda total $\Psi(x, t)$:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = (A e^{ikx} + B e^{-ikx}) e^{-iEt/\hbar}$$

Llamando $\omega = E/\hbar$:

$$\Psi(x, t) = A e^{ikx} e^{-iEt/\hbar} + B e^{-ikx} e^{-iEt/\hbar} = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)}$$

Obtenemos así la función de onda de la partícula libre de energía E . Si se hace $B = 0$ se obtiene una función para una onda que viaja en la dirección que x crece. Si se hace $A = 0$ la onda viaja en la dirección en la que x decrece. Si se hace $A = B$, existen dos ondas que viajan en direcciones opuestas y que se combinan para formar una onda estacionaria.

Sea el caso $B = 0$, si se calcula el valor de expectación del impulso \bar{p} para la partícula, se obtendrá un valor positivo bien definido $\bar{p} = \sqrt{2mE}$. Lo mismo para el caso en que $A = 0$ en el cual se tendrá un valor del impulso $\bar{p} = -\sqrt{2mE}$. En ambos casos, la densidad de probabilidad será constante (uniforme) en todas las regiones del eje x , así la partícula se encontrará con igual probabilidad en cualquier punto y la incertidumbre en su posición será $\Delta x \rightarrow \infty$. El principio de incertidumbre establece que si conocemos con absoluta precisión el valor del impulso p de la partícula, puesto que $\Delta p = 0$, el principio de incertidumbre $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ implica $\Delta x \rightarrow \infty$.

Existe una dificultad en cuanto a la normalización de las funciones de onda, por ejemplo, considerando $B = 0$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t) \Psi^*(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} A e^{ikx} A^* e^{-ikx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} A A^* dx = 1 \quad (7.23)$$

Para que la integral esté normalizada, la amplitud A debería ser cero. La dificultad proviene de haber idealizado el problema considerando que la partícula puede encontrarse en todo el eje real.

Un ejemplo físico representado por estas funciones de onda sería el de un protón que se mueve en un haz de luz altamente energético que emerge de un ciclotrón. Estos haces se utilizan para estudiar la dispersión de protones por blancos de núcleos insertados en el haz. Desde el punto de vista del núcleo y en términos de las distancias del orden de su radio nuclear, la posición de un protón en el haz será completamente desconocida. Entonces la función de onda de partícula libre con $B = 0$ puede dar una buena aproximación de la descripción del haz de protones en la región cercana al núcleo, en la que tiene lugar la dispersión, tomando en cuenta que el haz es extremadamente largo comparado con las dimensiones del núcleo.

Sin embargo, en realidad los haces reales siempre tienen longitud finita. El haz de protones está limitado en un extremo por el ciclotrón y en el otro por una pared del laboratorio. No obstante que la incertidumbre Δx en la localización de un protón es mucho mayor que un radio nuclear,

no es mayor que la distancia L del ciclotrón a la pared. En otras palabras, los límites de integración en Ec. (7.23) abarcan el tamaño L del sistema.

En los casos siguientes se representará a la energía potencial por una función $V(x)$ que tiene valores distintos en cada uno de los diferentes intervalos del eje x de tal manera que cambia abruptamente al pasar de un intervalo al siguiente. Si bien este tipo de potenciales idealizados no existen en la naturaleza, se utilizan para aproximar situaciones reales ya que son fáciles de tratar matemáticamente.

Potencial escalón

Energía de la partícula menor que la altura del escalón $E < V_0$

En este caso se analizará el movimiento de una partícula bajo la influencia de un potencial escalón, cuando su energía total E es mayor que la altura del escalón V_0 .

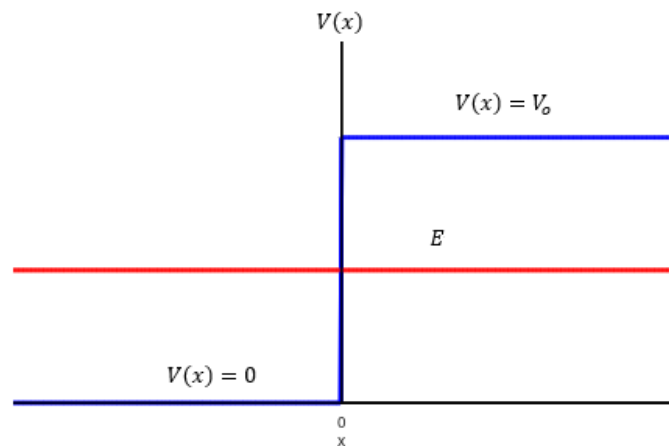
Sea el potencial escalón:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (7.24)$$

donde V_0 es una constante.

Figura 7.1

Potencial escalón y energía total de la partícula con $E < V_0$



Sea una partícula de masa m y energía total E que se encuentra en la región $x < 0$, y que se mueve hacia el punto $x = 0$ en el cual el potencial escalón $V(x)$ cambia su valor en forma brusca. Según la mecánica clásica la partícula se moverá libremente en esta región hasta que alcance $x = 0$, donde estará sujeta a una fuerza impulsiva $F = -dV(x)/dt$ que actúa en la dirección en la que x decrece. En este caso estamos considerando que $E < V_0$ (ver Fig. 7.1), es decir que la

energía total de la partícula es menor que la altura del escalón potencial. Como la energía total E es constante, la mecánica clásica predice que la partícula no puede entrar en la región $x > 0$.

Según la mecánica cuántica, para determinar el movimiento de la partícula habrá que determinar la función de onda que es solución a la ecuación de Schrödinger para el potencial escalón Ec. (7.24) con la energía total $E < V_0$, y como este potencial es independiente del tiempo, se deberá resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Para resolver esta situación, el eje x se divide en dos regiones, en la región en la que $x < 0$ se tiene $V(x) = 0$ de manera que la función de onda que dará información sobre el comportamiento de la partícula es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad x < 0 \quad (7.25)$$

En la región en la que $x > 0$ se tiene $V(x) = V_0$ y la función de onda es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tal que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0 \psi(x) = E\psi(x) \quad x > 0 \quad (7.26)$$

Estas dos ecuaciones se resuelven por separado y se obtendrá una función de onda válida para el intervalo completo de x uniendo las dos soluciones en $x = 0$, de tal manera que la función de onda y su primera derivada sean finitas en todas partes, monovaluadas y continuas.

La solución general de la Ec. (7.25) es la solución de una partícula libre:

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{con} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad x < 0 \quad (7.27)$$

cuyo valor de k_1 ya fue obtenido en el caso de la partícula libre. Las ondas de amplitudes A y B representan soluciones que se mueven hacia la derecha y hacia la izquierda respectivamente.

La solución general de la Ec. (7.26) es:

$$\psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \quad \text{con} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \quad x > 0 \quad (7.28)$$

El valor de k_2 nuevamente se puede calcular de manera tal, que cumpla con la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (k_2)^2 Ce^{k_2x} + (-k_2)^2 De^{-k_2x} = k_2^2 \psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = k_2^2 \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} V_0\psi(x)$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

Al considerar en Ec. (7.28) el comportamiento de $\psi(x)$ cuando $x \rightarrow +\infty$ mediante inspección, se observa que $\psi(x)$ aumenta sin límite conforme $x \rightarrow +\infty$ debido a la presencia del primer término Ce^{k_2x} . Para mantenerla finita se deberá tomar el coeficiente arbitrario $C = 0$.

El resto de las constantes arbitrarias A, B , y D de Ec. (7.27) y Ec. (7.28) se deben escoger de modo que las funciones y sus derivadas primeras satisfagan los requisitos de ser finitas, monovaluadas y continuas.

Estas funciones satisfacen de manera automática la condición de ser monovaluadas. Para considerar su continuidad considérese el punto $x = 0$. En este punto las dos formas de dadas por Ec. (7.27) y Ec. (7.28) se deben unir de modo tal que $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ sean continuas. La continuidad de $\psi(x)$ se obtiene satisfaciendo la relación:

$$(De^{-k_2x})_{x=0} = (Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x})_{x=0}$$

Que conduce a:

$$D = A + B \quad (7.29)$$

La continuidad de la derivada $d\psi(x)/dx$ se obtiene satisfaciendo la siguiente relación:

$$(-k_2De^{-k_2x})_{x=0} = (ik_1Ae^{ik_1x} - ik_1Be^{-ik_1x})_{x=0}$$

Lo cual conduce a:

$$\begin{aligned} -k_2D &= ik_1A - ik_1B \\ \frac{ik_2}{k_1}D &= A - B \end{aligned} \quad (7.30)$$

Combinando Ec. (7.29) y Ec. (7.30):

$$A = \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) \quad y \quad B = \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right)$$

Así, se han hallado las constantes A , B y C en términos de D . Esta última se podrá determinar imponiendo la condición de normalización de la función de onda.

Por lo tanto, la función de onda independiente del tiempo para el potencial escalón cuando la energía $E < V_0$ es:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) e^{ik_1x} + \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right) e^{-ik_1x} & x \leq 0 \\ De^{-k_2x} & x \geq 0 \end{cases}$$

Y la función de onda total, dependiente del tiempo:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) e^{ik_1x} e^{-\frac{iE}{\hbar}t} + \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right) e^{-ik_1x} e^{-\frac{iE}{\hbar}t} & x \leq 0 \\ De^{-k_2x} e^{-\frac{iE}{\hbar}t} & x \geq 0 \end{cases}$$

Considérese la región $x < 0$, en la cual el primer término de la función de onda es una onda viajera que se propaga en la dirección en la que x crece y que describe una partícula que se mueve en la misma dirección. El segundo término de la función de onda para $x < 0$ es una onda que se propaga en la dirección en la que decrece x y describe a una partícula que se mueve en esta dirección. Se podría asociar el primer término con la incidencia de la partícula sobre el potencial escalón y al segundo con la reflexión de la partícula por éste. El resultado es una onda estacionaria.

A partir de la función de onda total de la partícula, se puede obtener la densidad de probabilidad:

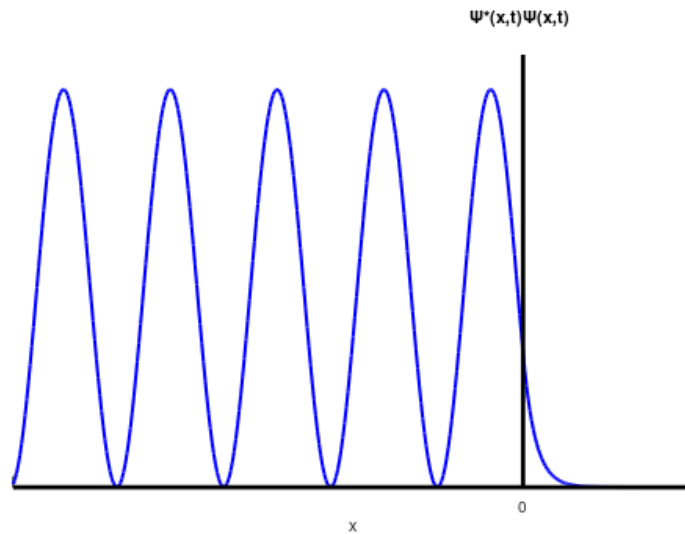
$$(\Psi^*\Psi) = \begin{cases} \frac{D^*D}{2k_1^2} [(k_1^2 - k_2^2) \cos(2k_1x) - 2k_1k_2 \sin(2k_1x) + (k_2^2 + k_1^2)] & x \leq 0 \\ D^*De^{-2k_2x} & x \geq 0 \end{cases}$$

Lo cual nos demuestra que la probabilidad de hallar la partícula en $x > 0$ decrece rápidamente conforme crece x , pero deja en evidencia que existe una probabilidad finita de que la partícula

se encuentre en dicha región. En la mecánica clásica sería absolutamente imposible hallar la partícula en esta zona ya que la energía total es menor que la energía potencial, de modo que la energía cinética será negativa. Este fenómeno es llamado *penetración de la región clásicamente excluida*.

Se puede visualizar la densidad de probabilidad en la Fig. 7.2:

Figura 7.2



Nota. Densidad de probabilidad para una partícula que incide sobre un potencial escalón con energía total menor que la altura del escalón.

Se puede hallar la probabilidad de que la partícula incidente sea reflejada mediante el cálculo del coeficiente de reflexión R :

$$R = \frac{v_1 B^* B}{v_1 A^* A} = \frac{\frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right)}{\frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right) \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right)} = 1 \quad (7.31)$$

El hecho de que este coeficiente sea igual a 1 significa que una partícula que incide sobre el potencial escalón, con energía menor a su altura, tiene una probabilidad de ser reflejada igual a uno, es decir, siempre se refleja.

En cuanto al coeficiente de transmisión T :

$$T = \frac{v_2 * 0}{v_1 A^* A} = 0 \quad (7.32)$$

La amplitud de la onda transmitida es cero, ya que hay ausencia total de transmisión.

Con lo cual, sumando Ec. (7.31) y Ec. (7.32) se puede verificar que:

$$R + T = 1$$

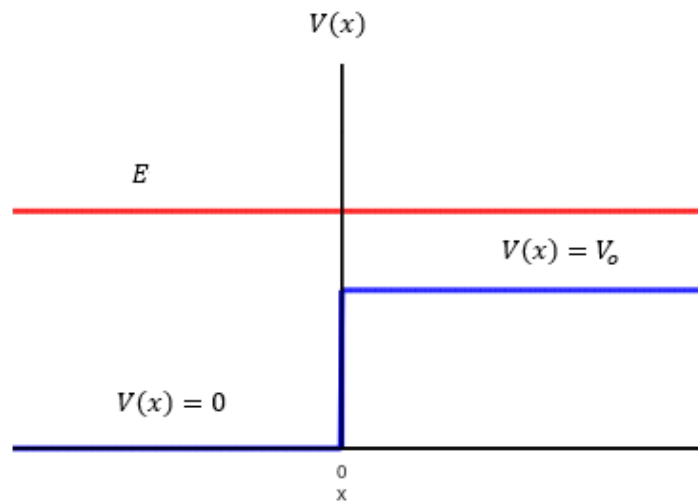
Un ejemplo físico sería el caso de un bloque de cobre dentro del cual se mueve un electrón de conducción con una energía total E bajo la influencia de un potencial que se puede aproximar a cero dentro del bloque, y cambia bruscamente al valor constante $V_0 > E$ fuera del bloque. El

potencial aumenta muy rápidamente en la superficie del metal hasta alcanzar el valor exterior V_0 debido a que el electrón experimenta una fuerza intensa ejercida por la distribución de carga no uniforme en la región. Esta fuerza tiende a regresar el electrón al metal y es la causa de que el electrón de conducción esté ligado al mismo.

Energía de la partícula mayor que la altura del escalón $E > V_0$

En este caso se considerará el movimiento de una partícula bajo la influencia de un escalón de potencial Ec. (7.24) cuando la energía total E de la partícula incidente es mayor que la altura V_0 del escalón ($E > V_0$) (ver Fig. 7.3).

Figura 7.3



Nota. Potencial escalón y energía total de la partícula con $E > V_0$

En la mecánica clásica una partícula de energía total E que viaja en la región $x < 0$ en la dirección en la que crece x , sufrirá una fuerza impulsiva retardadora $F = -dV(x)/dx$ en el punto $x = 0$. Pero el impulso sólo frenará la partícula y ésta entrará a la región $x > 0$ continuando su movimiento en la dirección en la que crece x .

En la mecánica cuántica, si E no es mucho mayor que V_0 la teoría predice que la partícula tiene una probabilidad apreciable de verse reflejada por el escalón hacia la región $x < 0$, aún cuando tenga la energía suficiente para pasar sobre el escalón hacia la región $x > 0$.

En la región en la que $x < 0$ se tiene $V(x) = 0$ de manera que la función de onda que dará información sobre el comportamiento de la partícula es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad x < 0 \quad (7.33)$$

En la región en la que $x > 0$ se tiene $V(x) = V_0$ y la función de onda es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tal que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (E - V_0) \psi(x) \quad x > 0 \quad (7.34)$$

Como en la situación anterior, estas dos ecuaciones se resuelven por separado y se obtendrá una función de onda válida para el intervalo completo de x uniendo las dos soluciones en $x = 0$, de tal manera que la función de onda y su primera derivada sea finitas en todas partes, monovaluadas y continuas.

La solución general de la Ec. (7.33) es la solución de una partícula libre:

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{con} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad x < 0 \quad (7.35)$$

La solución general de la Ec. (7.34) es una combinación de exponenciales complejas:

$$\psi(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad \text{con} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \quad x > 0 \quad (7.36)$$

Una partícula inicialmente en la región $x < 0$ y moviéndose hacia $x = 0$ debería, en la mecánica clásica, tener una probabilidad igual a uno de pasar por el punto $x = 0$ y penetrar en la región $x > 0$, lo cual no sucede en la mecánica cuántica. Debido a las propiedades ondulatorias de la partícula existe cierta probabilidad de que la partícula sea reflejada en el punto $x = 0$. Por lo tanto, será necesario tomar ambos términos en la solución general (7.35) para describir las ondas viajeras incidente y reflejada en la región $x < 0$. Sin embargo, no es necesario tomar el segundo término de la solución general (7.36) ya que este término describe una onda que viaja en la dirección en la que decrece x en la región $x > 0$. Como no hay nada que cause una reflexión, imponemos que solamente existe una onda viajera transmitida en la región $x > 0$ y por lo tanto la constante se hace $D = 0$.

El resto de las constantes arbitrarias A, B , y C se deben escoger de modo que las funciones de onda y sus derivadas primeras satisfagan los requisitos de ser finitas, monovaluadas y continuas.

Para considerar su continuidad se considera el punto $x = 0$. En este punto las dos formas dadas por Ec. (7.35) y Ec. (7.36) se deben unir de modo tal que $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ sean continuas.

La continuidad de $\psi(x)$ se obtiene satisfaciendo la relación:

$$(Ce^{ik_2x})_{x=0} = (Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x})_{x=0}$$

Que conduce a:

$$C = A + B \quad (7.37)$$

La continuidad de la derivada $d\psi(x)/dx$ se obtiene satisfaciendo la siguiente relación:

$$(ik_2Ce^{ik_2x})_{x=0} = (ik_1Ae^{ik_1x} - ik_1Be^{-ik_1x})_{x=0}$$

Lo cual conduce a:

$$ik_2C = ik_1A - ik_1B$$

$$C = \frac{k_1}{k_2}(A - B) \quad (7.38)$$

De Ec. (7.37) y Ec. (7.38) se obtiene:

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}A \quad \text{y} \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}A$$

El coeficiente A se puede determinar imponiendo la condición de normalización de la función de onda.

Por lo tanto, la función de onda independiente del tiempo para el potencial escalón y para la energía $E > V_0$ es:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}Ae^{-ik_1x} & x \leq 0 \\ \frac{2k_1}{k_1 + k_2}Ae^{ik_2x} & x \geq 0 \end{cases}$$

El primer término que es válido para $x < 0$ representa a la onda viajera incidente; el segundo término representa a la onda viajera reflejada y la expresión válida para $x > 0$ representa a la onda viajera transmitida.

Y la función de onda total dependiente del tiempo:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} Ae^{ik_1x}e^{-\frac{iE}{\hbar}t} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}Ae^{-ik_1x}e^{-\frac{iE}{\hbar}t} & x \leq 0 \\ \frac{2k_1}{k_1 + k_2}Ae^{ik_2x}e^{-\frac{iE}{\hbar}t} & x \geq 0 \end{cases}$$

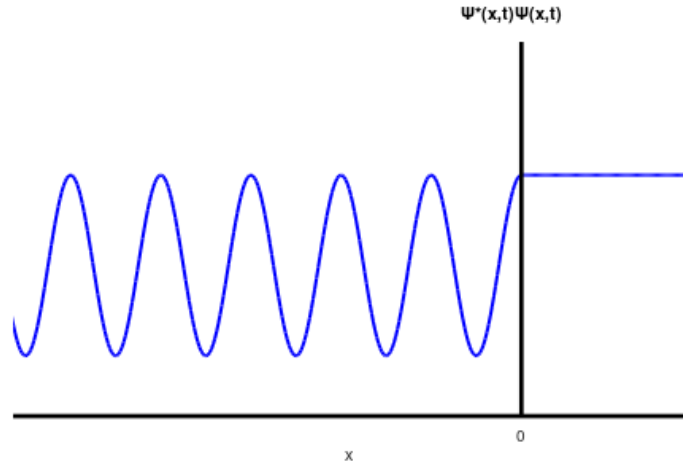
A partir de la función de onda total de la partícula, se puede obtener la densidad de probabilidad:

$$(\Psi^*\Psi) = \begin{cases} A^*A \left[1 + \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 + 2 \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) \cos(2k_1x) \right] & x \leq 0 \\ A^*A \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2 & x \geq 0 \end{cases}$$

Al calcular la densidad de probabilidad se obtiene en $x > 0$ una densidad de probabilidad constante, ya que la función de onda es una onda viajera pura que viaja hacia la derecha. En la región $x < 0$ la función de onda es una combinación de la onda viajera incidente que se mueve hacia la derecha y una onda viajera reflejada que se mueve hacia la izquierda. Como la amplitud de la onda reflejada es menor que la de la onda incidente, no es posible que se combinen para dar una onda estacionaria pura y la densidad de probabilidad en la zona $x < 0$ oscila tomando valores mínimos mayores que cero.

Se puede visualizar la densidad de probabilidad en la Fig. 7.4:

Figura 7.4



Nota. Densidad de probabilidad para una partícula que incide sobre un potencial escalón con energía total mayor que la altura del escalón

La relación de la intensidad de la onda reflejada y la intensidad de la onda incidente proporciona la probabilidad de que la partícula sea reflejada por el escalón de potencial hacia la región $x < 0$. Esta probabilidad es el coeficiente de reflexión R :

$$R = \frac{v_1 B^* B}{v_1 A^* A} = \frac{\left[\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A\right]^* \left[\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A\right]}{A^* A} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \quad (7.39)$$

El coeficiente de transmisión T especifica la probabilidad de que la partícula sea transmitida a través del potencial escalón. Para la evaluación de T deberá tenerse en cuenta que la velocidad de la partícula es diferente en cada región:

v_1 es la velocidad de la partícula para $x < 0$:

$$v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\sqrt{2mE}}{m} = \frac{\hbar k_1}{m}$$

v_2 es la velocidad de la partícula para $x > 0$:

$$v_2 = \frac{p_2}{m} = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{m} = \frac{\hbar k_2}{m}$$

Así:

$$T = \frac{v_2 C^* C}{v_1 A^* A} = \frac{v_2}{v_1} \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2 = \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (7.40)$$

Nuevamente, sumando Ec. (7.39) y Ec. (7.40) se observa que se cumple la conservación de la probabilidad:

$$R + T = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 + \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{k_1^2 + 2k_1 k_2 + k_2^2}{(k_1 + k_2)^2} = 1$$

Un ejemplo de la reflexión que ocurre cuando una partícula intenta pasar sobre un potencial escalón se encuentra en el movimiento de un neutrón en un núcleo. El potencial que actúa sobre

el neutrón en las cercanías de la superficie nuclear puede ser aproximado por un potencial escalón. El potencial crece muy rápidamente en la superficie nuclear ya que el núcleo trata de enlazar al neutrón. Si el neutrón recibe energía sólo un poco mayor que la altura del escalón, probablemente sea reflejado hacia éste. Esto tiene el efecto de inhibir la emisión de neutrones con la energía más baja y por lo tanto aumentar la estabilidad de los núcleos en los estados excitados más bajos.

Barrera de potencial

En este caso se analizará el potencial escalón definido por:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 & (I) \\ V_0 & 0 < x < a & (II) \\ 0 & x > a & (III) \end{cases} \quad (7.41)$$

donde V_0 es una constante.

Según la mecánica clásica una partícula de energía total E en la región $x < 0$ que incide sobre una barrera en la dirección en la que crece x tendrá una probabilidad de ser reflejada igual a uno, si $E < V_0$ y una probabilidad uno de ser transmitida a la región $x > a$ si $E > V_0$.

Ninguna de estas afirmaciones describe de manera adecuada los resultados de la mecánica cuántica. Si E es mucho mayor que V_0 , la teoría predice que habrá algo de reflexión excepto para ciertos valores de E . Si E es mucho menor que V_0 la mecánica cuántica predice que existe cierta probabilidad de que la partícula sea transmitida a través de la barrera a la región $x > a$.

Existirán soluciones aceptables de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para todos los valores de energía total $E \geq 0$. En las regiones (I) y (III) las ecuaciones son las de una partícula libre de energía total E :

$$(I) \quad \psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{con} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad x < 0 \quad (7.42)$$

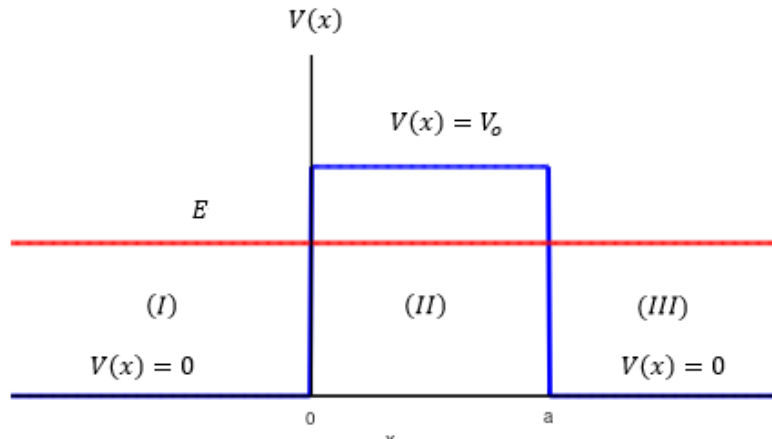
$$(III) \quad \psi(x) = Ce^{ik_1x} + De^{-ik_1x} \quad \text{con} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad x > a \quad (7.43)$$

Puesto que se está considerando el caso de una partícula que incide desde la izquierda sobre la barrera, en la región (III) sólo puede haber una onda transmitida moviéndose hacia la derecha ya que no existe nada en esta zona para que se produzca la reflexión. Entonces $D = 0$.

En la región interior de la barrera (II), la forma de la ecuación y su solución general depende de si $E > V_0$ o $E < V_0$.

Barrera de potencial para el caso $V_0 > E$

Figura 7.5



Nota. Barrera de potencial y energía total de la partícula, menor a la altura de la barrera.

Si $E < V_0$ la solución de la ecuación de Schrödinger en la región II es:

$$(II) \quad \psi(x) = Fe^{-k_2x} + Ge^{k_2x} \quad \text{con} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \quad 0 < x < a \quad (7.44)$$

En este caso no se impone $G = 0$ ya que el valor de x está limitado en la región de la barrera $0 < x < a$, así que $\psi(x)$ no puede hacerse infinitamente grande, aun estando presente la exponencial creciente.

Al establecer que $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ en los puntos $x = 0$ y $x = a$ sean continuas, se obtienen cuatro ecuaciones en función de las constantes arbitrarias A, B, C, D, F y G . Estas ecuaciones se pueden utilizar para evaluar B, C, F y G en términos de A .

Analizando la continuidad de $\psi(x)$ en el punto $x = 0$ utilizando Ec. (7.42) y Ec.(7.44) se obtiene:

$$\begin{aligned} (Fe^{-k_2x} + Ge^{k_2x})_{x=0} &= (Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x})_{x=0} \\ F + G &= A + B \end{aligned} \quad (7.45)$$

La continuidad de la derivada $d\psi(x)/dx$ en el punto $x = 0$ se obtiene derivando Ec.(7.42) y Ec.(7.44) y evaluando en dicho punto:

$$\begin{aligned} (-k_2Fe^{-k_2x} + k_2Ge^{k_2x})_{x=0} &= (ik_1Ae^{ik_1x} - ik_1Be^{-ik_1x})_{x=0} \\ -k_2F + k_2G &= ik_1A - ik_1B \end{aligned} \quad (7.46)$$

Al analizar la continuidad de $\psi(x)$ en el punto $x = a$ utilizando Ec.(7.43) y Ec.(7.44) se obtiene:

$$(Fe^{-k_2x} + Ge^{k_2x})_{x=a} = (Ce^{ik_1x})_{x=a}$$

$$F e^{-k_2 a} + G e^{k_2 a} = C e^{ik_1 a} \quad (7.47)$$

Y la continuidad de la derivada $d\psi(x)/dx$ de las funciones Ecs.(7.43) y (7.44) en el punto $x = a$

$$\begin{aligned} (-k_2 F e^{-k_2 x} + k_2 G e^{k_2 x})_{x=a} &= (ik_1 C e^{ik_1 x})_{x=a} \\ -k_2 F e^{-k_2 a} + k_2 G e^{k_2 a} &= ik_1 C e^{ik_1 a} \end{aligned} \quad (7.48)$$

Despejando las constantes B, C, F y G en función de A , de las ecuaciones (7.45), (7.46), (7.47) y (7.48) se obtiene:

$$\begin{aligned} B &= \frac{-A(k_1^2 + k_2^2) \sinh(k_2 a)}{(k_2^2 - k_1^2) \sinh(k_2 a) - i2k_1 k_2 \cosh(k_2 a)} \\ C &= \frac{-i2A k_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_2^2 - k_1^2) \sinh(k_2 a) - i2k_1 k_2 \cosh(k_2 a)} \\ G &= \frac{-iA k_1 (k_2 + ik_1) e^{-k_2 a}}{(k_2^2 - k_1^2) \sinh(k_2 a) - i2k_1 k_2 \cosh(k_2 a)} \\ F &= \frac{-iA k_1 e^{k_2 a} (k_2 - ik_1)}{(k_2^2 - k_1^2) \sinh(k_2 a) - i2k_1 k_2 \cosh(k_2 a)} \end{aligned}$$

Así se obtiene la función de onda independiente del tiempo:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik_1 x} + \frac{-A(k_1^2 + k_2^2) \sinh(k_2 a) e^{-ik_1 x}}{(k_2^2 - k_1^2) \sinh(k_2 a) - i2k_1 k_2 \cosh(k_2 a)} & x < 0 \quad (I) \\ \frac{-iA k_1 ((k_2 - ik_1) e^{-k_2(x-a)} + (k_2 + ik_1) e^{k_2(x-a)})}{(k_2^2 - k_1^2) \sinh(k_2 a) - i2k_1 k_2 \cosh(k_2 a)} & 0 < x < a \quad (II) \\ \frac{-i2A k_1 k_2 e^{ik_1(x-a)}}{(k_2^2 - k_1^2) \sinh(k_2 a) - i2k_1 k_2 \cosh(k_2 a)} & x > a \quad (III) \end{cases}$$

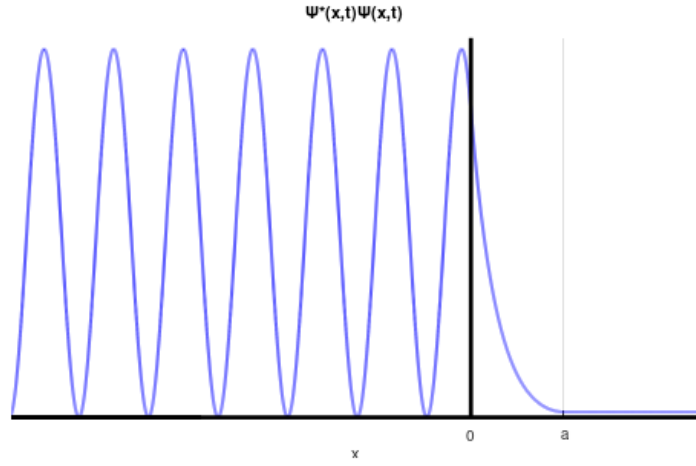
Y la función de onda total dependiente del tiempo:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \left[A e^{ik_1 x} + \frac{-A(k_1^2 + k_2^2) \sinh(k_2 a) e^{-ik_1 x}}{(k_2^2 - k_1^2) \sinh(k_2 a) - i2k_1 k_2 \cosh(k_2 a)} \right] e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & x < 0 \quad (I) \\ \frac{-iA k_1 ((k_2 - ik_1) e^{-k_2(x-a)} + (k_2 + ik_1) e^{k_2(x-a)})}{(k_2^2 - k_1^2) \sinh(k_2 a) - i2k_1 k_2 \cosh(k_2 a)} e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & 0 < x < a \quad (II) \\ \frac{-i2A k_1 k_2 e^{ik_1(x-a)}}{(k_2^2 - k_1^2) \sinh(k_2 a) - i2k_1 k_2 \cosh(k_2 a)} e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & x > a \quad (III) \end{cases}$$

La obtención de la función de onda y la densidad de probabilidad permiten predecir que una partícula de masa m y energía total E que incide sobre una barrera de potencial de altura $V_0 > E$ y ancho finito a tiene cierta probabilidad de penetrar la barrera y aparecer del otro lado. A este fenómeno se lo llama "penetración de barrera" y se dice que la partícula hizo un túnel a través de la barrera.

Se puede visualizar la densidad de probabilidad en la Fig. 7.6:

Figura 7.6



Nota. Densidad de probabilidad para una partícula que incide sobre una barrera de potencial con energía total menor que la altura de la barrera.

El coeficiente A se puede determinar imponiendo la condición de normalización de la función de onda.

Para verificar que existe una probabilidad distinta de cero de que la partícula penetre la barrera, se puede calcular el coeficiente de transmisión:

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \frac{4k_1^2 k_2^2}{\left[\sinh^2(k_2 a) (k_2^2 - k_1^2)^2 + 4k_1^2 k_2^2 \cosh^2(k_2 a) \right]}$$

$$T = \frac{4k_1^2 k_2^2}{\left[\sinh^2(k_2 a) (k_2^2 - k_1^2)^2 + 4k_1^2 k_2^2 (1 + \sinh^2(k_2 a)) \right]}$$

$$T = \frac{4k_1^2 k_2^2}{\left[\sinh^2(k_2 a) (k_2^2 + k_1^2)^2 + 4k_1^2 k_2^2 \right]} = \frac{1}{\left[1 + \sinh^2(k_2 a) \frac{(k_2^2 + k_1^2)^2}{4k_1^2 k_2^2} \right]}$$

Dado que $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ y $k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ y reemplazando, se obtiene el coeficiente de transmisión:

$$T = \frac{1}{\left[1 + \sinh^2(k_2 a) \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \right]} = \frac{1}{\left[1 + \frac{\sinh^2(k_2 a)}{4 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0})} \right]} \quad (7.49)$$

Y para obtener la probabilidad de que la partícula incidente sea reflejada, se calcula el coeficiente de reflexión:

$$R = \frac{v_1 B^* B}{v_1 A^* A} = \sinh^2(k_2 a) \frac{(k_1^2 + k_2^2)^2}{\left[\sinh^2(k_2 a) (k_2^2 - k_1^2)^2 + 4k_1^2 k_2^2 \cosh^2(k_2 a) \right]}$$

$$R = \frac{\sinh^2(k_2 a) (k_1^2 + k_2^2)^2}{\left[\sinh^2(k_2 a) (k_2^2 - k_1^2)^2 + 4k_1^2 k_2^2 (1 + \sinh^2(k_2 a)) \right]}$$

$$R = \frac{\sinh^2(k_2 a) (k_1^2 + k_2^2)^2}{\left[\sinh^2(k_2 a) (k_2^2 + k_1^2)^2 + 4k_1^2 k_2^2 \right]} = \frac{1}{\left[1 + \frac{4k_1^2 k_2^2}{\sinh^2(k_2 a) (k_1^2 + k_2^2)^2} \right]}$$

Recordando que $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ y $k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ y reemplazando, se obtiene el coeficiente de reflexión:

$$R = \frac{1}{\left[1 + \frac{4E(V_0 - E)}{\sinh^2(k_2 a) V_0^2} \right]} \quad (7.50)$$

Al sumar el coeficiente de reflexión Ec. (7.50) y el coeficiente de transmisión Ec. (7.49), se verifica:

$$R + T = \frac{1}{\left[1 + \frac{4E(V_0 - E)}{\sinh^2(k_2 a) V_0^2} \right]} + \frac{1}{\left[1 + \sinh^2(k_2 a) \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \right]}$$

$$= \frac{\sinh^2(k_2 a) V_0^2}{\left[\sinh^2(k_2 a) V_0^2 + 4E(V_0 - E) \right]} + \frac{4E(V_0 - E)}{\left[4E(V_0 - E) + \sinh^2(k_2 a) V_0^2 \right]} = 1$$

Se puede obtener una expresión aproximada y más simple para el coeficiente de transmisión si $k_{II} a \gg 1$. Para eso lo expresamos en función de las exponenciales:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)} \left(\frac{e^{k_{II} a} - e^{-k_{II} a}}{2} \right)^2}$$

Y si $k_{II} a \gg 1$ y por ende $E/V_0 \ll 1$, la fórmula se reduce a:

$$T \cong \frac{1}{1 + \frac{1}{16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)} e^{2k_{II} a}} \cong 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2k_{II} a} \quad (7.51)$$

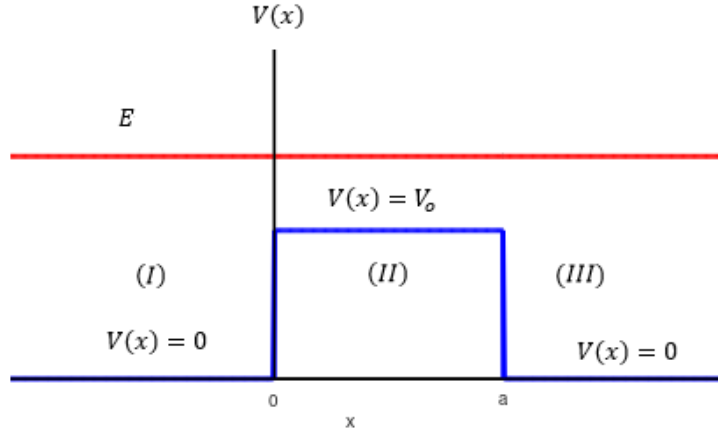
Cuando Ec. (7.51) es una buena aproximación, T es extremadamente pequeña.

El coeficiente de transmisión no nulo está indicando que una partícula con energía total E que incide sobre una barrera de potencial con $V_0 > E$ tiene cierta probabilidad de penetrar la barrera y transmitirse al otro lado. Se dice que la partícula hizo un túnel a través de la barrera. En el "tunelamiento" a través de una barrera cuya altura excede la energía incidente, una partícula se comporta como una onda. En la región lejana a la barrera $x \gg a$ es posible detectar una partícula localizada como consecuencia de la penetración de una región clásicamente excluida.

Un ejemplo de penetración de barrera se presenta en el diodo túnel, que es un dispositivo semiconductor y que se utiliza en los circuitos electrónicos rápidos ya que su respuesta a alta frecuencia es mucho mejor que la de cualquier transistor. Este dispositivo utiliza penetración de barrera controlable para interrumpir corrientes tan rápidamente que se puede utilizar para hacer un oscilador que pueda operar a frecuencias superiores a 10^{11} Hz.

Barrera de potencial para el caso $V_o < E$

Figura 7.7



Nota. Barrera de potencial y energía total de la partícula mayor a la altura de la barrera.

En esta situación, en la región (II) se tiene que la solución de la ecuación de Schrödinger es:

$$(II) \quad \psi(x) = Fe^{-ik_2x} + Ge^{ik_2x} \quad \text{con} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_o)}}{\hbar} \quad 0 < x < a \quad (7.52)$$

No se deberá imponer $F = 0$ ya que $\psi(x)$ para $E > V_o$ tendrá una componente en la región de la barrera reflejada que proviene de la discontinuidad del potencial en $x = a$.

Para obtener las constantes B, C, F y G nuevamente se plantean condiciones de borde para que $\psi(x)$ y su derivada sean continuas en $x = 0$ y $x = a$ y esas ecuaciones se utilizan para evaluar B, C, F y G en términos de A .

Si se analiza la continuidad de $\psi(x)$ en el punto $x = 0$ utilizando Ec. (7.42) y Ec. (7.43) se obtiene:

$$\begin{aligned} (Fe^{-ik_2x} + Ge^{ik_2x})_{x=0} &= (Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x})_{x=0} \\ F + G &= A + B \end{aligned} \quad (7.53)$$

La continuidad de la derivada $d\psi(x)/dx$ en el punto $x = 0$ se obtiene derivando Ec. (7.42) y Ec. (7.52) y evaluando en dicho punto:

$$\begin{aligned} (-ik_2Fe^{-ik_2x} + ik_2Ge^{ik_2x})_{x=0} &= (ik_1Ae^{ik_1x} - ik_1Be^{-ik_1x})_{x=0} \\ -ik_2F + ik_2G &= ik_1A - ik_1B \end{aligned} \quad (7.54)$$

Por otro lado, si se analiza la continuidad de $\psi(x)$ en el punto $x = a$ utilizando Ec. (7.43) y Ec. (7.52) se obtiene:

$$(Fe^{-ik_2x} + Ge^{ik_2x})_{x=a} = (Ce^{ik_1x})_{x=a}$$

$$F e^{-ik_2 a} + G e^{ik_2 a} = C e^{ik_1 a} \quad (7.55)$$

Y la continuidad de la derivada $d\psi(x)/dx$ en el punto $x = a$ se obtiene derivando Ec. (7.43) y Ec. (7.52) y evaluando en dicho punto:

$$\begin{aligned} (-ik_2 F e^{-ik_2 x} + ik_2 G e^{ik_2 x})_{x=a} &= (ik_1 C e^{ik_1 x})_{x=a} \\ -ik_2 F e^{-ik_2 a} + ik_2 G e^{ik_2 a} &= ik_1 C e^{ik_1 a} \end{aligned} \quad (7.56)$$

Despejando las constantes B, C, F y G en función de A , de las Ecs. (7.53), (7.54), (7.55) y (7.56) se encuentran las constantes deseadas:

$$\begin{aligned} B &= \frac{iA(k_2^2 - k_1^2) \text{sen}(k_2 a)}{2k_1 k_2 \cos(k_2 a) - i(k_2^2 + k_1^2) \text{sen}(k_2 a)} \\ C &= \frac{2Ak_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{2k_1 k_2 \cos(k_2 a) - i(k_2^2 + k_1^2) \text{sen}(k_2 a)} \\ F &= \frac{Ak_1(k_2 - k_1) e^{ik_2 a}}{2k_1 k_2 \cos(k_2 a) - i(k_2^2 + k_1^2) \text{sen}(k_2 a)} \\ G &= \frac{Ak_1(k_2 + k_1) e^{-ik_2 a}}{2k_1 k_2 \cos(k_2 a) - i(k_2^2 + k_1^2) \text{sen}(k_2 a)} \end{aligned}$$

Luego, la función de onda independiente del tiempo es:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik_1 x} + \frac{iA(k_2^2 - k_1^2) \text{sen}(k_2 a) e^{-ik_1 x}}{2k_1 k_2 \cos(k_2 a) - i(k_2^2 + k_1^2) \text{sen}(k_2 a)} & x < 0 \quad (I) \\ \frac{Ak_1 \left((k_2 - k_1) e^{-ik_2(x-a)} + (k_2 + k_1) e^{ik_2(x-a)} \right)}{2k_1 k_2 \cos(k_2 a) - i(k_2^2 + k_1^2) \text{sen}(k_2 a)} & 0 < x < a \quad (II) \\ \frac{2Ak_1 k_2 e^{ik_1(x-a)}}{2k_1 k_2 \cos(k_2 a) - i(k_2^2 + k_1^2) \text{sen}(k_2 a)} & x > a \quad (III) \end{cases}$$

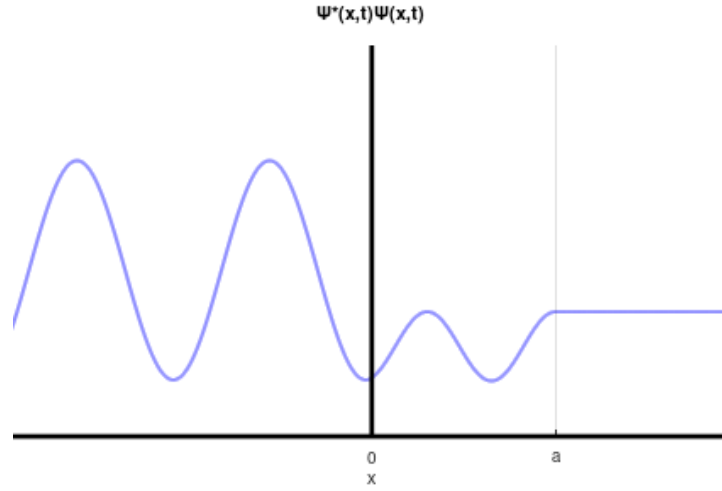
Y la función de onda total dependiente del tiempo:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \left[A e^{ik_1 x} + \frac{iA(k_2^2 - k_1^2) \text{sen}(k_2 a) e^{-ik_1 x}}{2k_1 k_2 \cos(k_2 a) - i(k_2^2 + k_1^2) \text{sen}(k_2 a)} \right] e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & x < 0 \quad (I) \\ \frac{Ak_1 \left((k_2 - k_1) e^{-ik_2(x-a)} + (k_2 + k_1) e^{ik_2(x-a)} \right)}{2k_1 k_2 \cos(k_2 a) - i(k_2^2 + k_1^2) \text{sen}(k_2 a)} e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & 0 < x < a \quad (II) \\ \frac{2Ak_1 k_2 e^{ik_1(x-a)}}{2k_1 k_2 \cos(k_2 a) - i(k_2^2 + k_1^2) \text{sen}(k_2 a)} e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & x > a \quad (III) \end{cases}$$

El coeficiente A se puede determinar imponiendo la condición de normalización de la función de onda.

Se puede visualizar la densidad de probabilidad en la Fig. 7.8:

Figura 7.8



Nota. Densidad de probabilidad para una partícula que incide sobre una barrera de potencial, con energía total mayor que la altura de la barrera.

Se puede calcular el coeficiente de transmisión:

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \frac{4k_1^2 k_2^2}{\left[4k_1^2 k_2^2 \cos^2(k_2 a) + \text{sen}^2(k_2 a) (k_2^2 + k_1^2)^2\right]}$$

$$T = \frac{4k_1^2 k_2^2}{\left[4k_1^2 k_2^2 (1 - \text{sen}^2(k_2 a)) + \text{sen}^2(k_2 a) (k_2^2 + k_1^2)^2\right]}$$

$$T = \frac{4k_1^2 k_2^2}{\left[\text{sen}^2(k_2 a) (k_2^2 - k_1^2)^2 + 4k_1^2 k_2^2\right]} = \frac{1}{\left[1 + \text{sen}^2(k_2 a) \frac{(k_2^2 - k_1^2)^2}{4k_1^2 k_2^2}\right]}$$

Dado que $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ y $k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ y reemplazando, se obtiene el coeficiente de transmisión:

$$T = \frac{1}{\left[1 + \text{sen}^2(k_2 a) \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)}\right]} = \frac{1}{\left[1 + \frac{\text{sen}^2(k_2 a)}{4 \frac{E}{V_0} \left(\frac{E}{V_0} - 1\right)}\right]} \quad (7.57)$$

Y el coeficiente de reflexión:

$$R = \frac{v_1 B^* B}{v_1 A^* A} = \text{sen}^2(k_2 a) \frac{(k_2^2 - k_1^2)^2}{\left[4k_1^2 k_2^2 \cos^2(k_2 a) + \text{sen}^2(k_2 a) (k_2^2 + k_1^2)^2\right]}$$

$$R = \frac{\text{sen}^2(k_2 a) (k_2^2 - k_1^2)^2}{\left[4k_1^2 k_2^2 (1 - \text{sen}^2(k_2 a)) + \text{sen}^2(k_2 a) (k_2^2 + k_1^2)^2\right]}$$

$$R = \frac{\text{sen}^2(k_2 a) (k_2^2 - k_1^2)^2}{\left[\text{sen}^2(k_2 a) (k_2^2 - k_1^2)^2 + 4k_1^2 k_2^2\right]} = \frac{1}{\left[1 + \frac{4k_1^2 k_2^2}{\text{sen}^2(k_2 a) (k_2^2 - k_1^2)^2}\right]}$$

Reemplazando $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ y $k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ se obtiene el coeficiente de reflexión:

$$R = \frac{1}{\left[1 + \frac{4E(E - V_0)}{\text{sen}^2(k_2 a) V_0^2}\right]} \quad (7.58)$$

Se verifica sumando Ec. (7.57) y Ec. (7.58):

$$\begin{aligned} R + T &= \frac{1}{\left[1 + \frac{4E(E - V_0)}{\text{sen}^2(k_2 a) V_0^2}\right]} + \frac{1}{\left[1 + \text{sen}^2(k_2 a) \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)}\right]} \\ &= \frac{\text{sen}^2(k_2 a) V_0^2}{\left[\text{sen}^2(k_2 a) V_0^2 + 4E(E - V_0)\right]} + \frac{4E(E - V_0)}{\left[4E(E - V_0) + \text{sen}^2(k_2 a) V_0^2\right]} = 1 \end{aligned}$$

Potencial de pozo cuadrado

En este caso se analizará un potencial capaz de ligar la partícula a una región limitada del espacio, lo que conducirá a que se produzca cuantización de la energía.

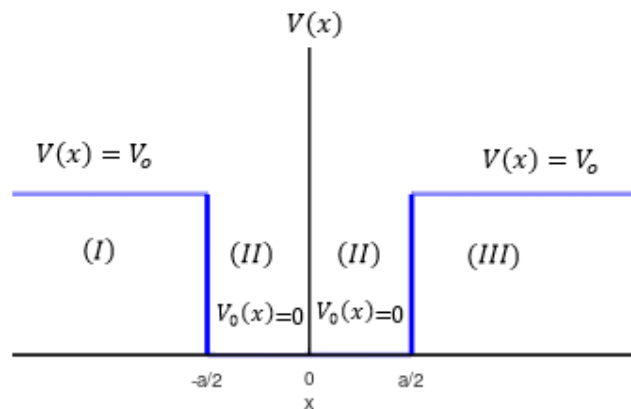
El potencial escalón definido por:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -a/2 \quad (I) \\ 0 & -a/2 < x < a/2 \quad (II) \\ V_0 & x > a/2 \quad (III) \end{cases} \quad (7.59)$$

donde V_0 es una constante.

Figura 7.9

Pozo de potencial finito



Si la partícula tiene una energía total $0 < E < V_0$ entonces según la mecánica clásica sólo puede estar en la región $-a/2 < x < a/2$ y cualquier valor de $E \geq 0$ de la energía total es posible. Pero en la mecánica cuántica solamente son posibles ciertos valores de la energía total.

El modelo de pozo cuadrado se utiliza para representar una situación en la cual una partícula se mueve en una región restringida del espacio bajo la influencia de fuerzas que lo mantienen en la región.

Nuevamente el problema se descompone en tres regiones indicadas según el potencial Ec. (7.59). La solución general para la región (II) (interior del pozo) es:

$$(II) \psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{con} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad -a/2 < x < a/2 \quad (7.60)$$

El primer término describe ondas que viajan en la dirección en la que x crece y el segundo describe ondas viajeras en la dirección en la que x decrece. Matemáticamente equivalente es la expresión:

$$(II) \psi(x) = A' \text{sen}(k_1x) + B' \text{cos}(k_1x) \quad \text{con} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad -a/2 < x < a/2 \quad (7.61)$$

En los problemas que involucran el movimiento de partículas ligadas conviene utilizar esta última expresión.

En las dos regiones externas al pozo de potencial (I) y (III), las soluciones generales a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tienen las formas:

$$(I) \psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \quad \text{con} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \quad x < -a/2 \quad (7.62)$$

$$(III) \psi(x) = Fe^{k_2x} + Ge^{-k_2x} \quad \text{con} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \quad x > a/2 \quad (7.63)$$

Para determinar las constantes arbitrarias, primero se impone el requisito de que las funciones de onda permanezcan finitas para toda x . Considerando Ec. (7.62) en el límite $x \rightarrow -\infty$, este requisito exige $D = 0$. Similarmente es necesario hacer $F = 0$ con el propósito de que Ec. (7.63) permanezca finita cuando $x \rightarrow +\infty$.

Por otro lado, utilizando Ecs. (7.61), (7.62) y (7.63) se debe cumplir que las funciones de onda y sus derivadas primeras sean continuas en $x = -a/2$ y $x = a/2$, con lo que se obtienen cuatro ecuaciones:

$$-A' \text{sen}\left(\frac{k_1a}{2}\right) + B' \text{cos}\left(\frac{k_1a}{2}\right) = Ce^{-k_2\frac{a}{2}} \quad (7.64)$$

$$A'k_1 \text{cos}\left(\frac{k_1a}{2}\right) + k_1B' \text{sen}\left(\frac{k_1a}{2}\right) = k_2Ce^{-k_2\frac{a}{2}} \quad (7.65)$$

$$A' \text{sen}\left(\frac{k_1a}{2}\right) + B' \text{cos}\left(\frac{k_1a}{2}\right) = Ge^{-k_2\frac{a}{2}} \quad (7.66)$$

$$A'k_1 \text{cos}\left(\frac{k_1a}{2}\right) - B'k_1 \text{sen}\left(\frac{k_1a}{2}\right) = -k_2Ge^{-k_2\frac{a}{2}} \quad (7.67)$$

Restando Ecs. (7.64) y (7.66):

$$2A' \text{sen}\left(\frac{k_1a}{2}\right) = (G - C)e^{-k_2\frac{a}{2}} \quad (7.68)$$

Sumando Ecs. (7.64) y (7.66):

$$2B' \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = (G + C)e^{-k_2 \frac{a}{2}} \quad (7.69)$$

Restando Ecs. (7.65) y (7.67):

$$2B' k_1 \operatorname{sen}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = k_2 (G + C)e^{-k_2 \frac{a}{2}} \quad (7.70)$$

Sumando Ecs. (7.65) y (7.67):

$$2A' k_1 \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = -k_2 (G - C)e^{-k_2 \frac{a}{2}} \quad (7.71)$$

La simetría del problema nos permite buscar soluciones pares ($A' = 0$) e impares ($B' = 0$).

Soluciones pares:

Exigiendo que $B' \neq 0$ y $(G + C) \neq 0$ se puede dividir Ec. (7.69) y Ec. (7.70) y obtener:

$$\begin{cases} k_1 \tan\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = k_2 \\ A' = 0 \\ G - C = 0 \end{cases} \quad (7.72)$$

donde las constantes toman los valores: $A' = 0$ y $C = G = B' \cos(k_1 a/2)e^{k_2 \frac{a}{2}}$

La función de onda independiente del tiempo es:

$$\psi(x) = \begin{cases} \left[B' \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) e^{k_2 \frac{a}{2}} \right] e^{k_2 x} & x < -a/2 \quad (I) \\ B' \cos(k_1 x) & -a/2 < x < a/2 \quad (II) \\ \left[B' \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) e^{k_2 \frac{a}{2}} \right] e^{-k_2 x} & x > a/2 \quad (III) \end{cases}$$

Y la función de onda total dependiente del tiempo:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \left[B' \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) e^{k_2 \frac{a}{2}} \right] e^{k_2 x} e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & x < -a/2 \quad (I) \\ B' \cos(k_1 x) e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & -a/2 < x < a/2 \quad (II) \\ \left[B' \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) e^{k_2 \frac{a}{2}} \right] e^{-k_2 x} e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & x > a/2 \quad (III) \end{cases}$$

Y se debe cumplir:

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tan\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \frac{a}{2}\right) = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (7.73)$$

Notemos que la función así definida resulta par, esto es $\psi(x) = \psi(-x)$.

Soluciones impares:

Exigiendo que $A' \neq 0$ y $(G - C) \neq 0$ se puede dividir (7.68) y (7.71) y obtener:

$$\begin{cases} k_1 \cot\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = -k_2 \\ B' = 0 \\ G + C = 0 \end{cases} \quad (7.74)$$

dónde las constantes toman los valores: $B' = 0$ y $G = A' \cos(k_1 a/2) = -C$

La función de onda dependiente del tiempo es:

$$\psi(x) = \begin{cases} \left[-A' \operatorname{sen}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) e^{k_2 \frac{a}{2}} \right] e^{k_2 x} & x < -a/2 \quad (I) \\ A' \operatorname{sen}(k_1 x) & -a/2 < x < a/2 \quad (II) \\ \left[A' \operatorname{sen}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) e^{k_2 \frac{a}{2}} \right] e^{-k_2 x} & x > a/2 \quad (III) \end{cases}$$

Y la función de onda total dependiente del tiempo:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \left[-A' \operatorname{sen}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) e^{k_2 \frac{a}{2}} \right] e^{k_2 x} e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & x < -a/2 \quad (I) \\ A' \operatorname{sen}(k_1 x) e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & -a/2 < x < a/2 \quad (II) \\ \left[A' \operatorname{sen}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) e^{k_2 \frac{a}{2}} \right] e^{-k_2 x} e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & x > a/2 \quad (III) \end{cases}$$

Y se debe cumplir:

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cot\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \frac{a}{2}\right) = -\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (7.75)$$

En este caso se obtiene una función impar, esto es $\psi(x) = -\psi(-x)$.

Es posible observar que Ec. (7.72) y Ec. (7.74) no se pueden satisfacer simultáneamente. Si se pudiera la ecuación que se obtiene de sumarlas es:

$$k_1 \tan\left(\frac{k_1 a}{2}\right) + k_1 \cot\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = 0$$

Y multiplicando todo por $\tan(k_1 a/2)$:

$$k_1 \tan^2\left(\frac{k_1 a}{2}\right) + k_1 = 0$$

o

$$\tan^2\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = -1$$

que no puede ser válida si tanto k_1 como $a/2$ son reales. Entonces, solamente es posible que satisfagan Ec. (7.72) o Ec. (7.74) en forma excluyente. Este resultado manifiesta el hecho de que las soluciones son o bien pares o impares.

Observando las Ecs. (7.73) y Ec. (7.75), para la partícula dada de masa m y un pozo de potencial dado de profundidad V_0 y ancho a existe una ecuación con una incógnita E . Sus soluciones son los valores permitidos para la energía total de la partícula que son los autovalores para la función de onda dada. Las soluciones de esta ecuación trascendente solamente se pueden obtener por métodos numéricos o gráficos.

Multiplicando en la Ec. (7.73) por $a/2$ y haciendo un cambio de variable $\varepsilon = \sqrt{mEa^2/2\hbar^2}$:

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}} \tan\left(\sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}}\right) &= \sqrt{\frac{m(V_0 - E)a^2}{2\hbar^2}} \\ \varepsilon \cdot \tan(\varepsilon) &= \sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} - \varepsilon^2} \end{aligned} \quad (7.76)$$

Si se grafica la función:

$$f(\varepsilon) = \varepsilon \cdot \tan(\varepsilon)$$

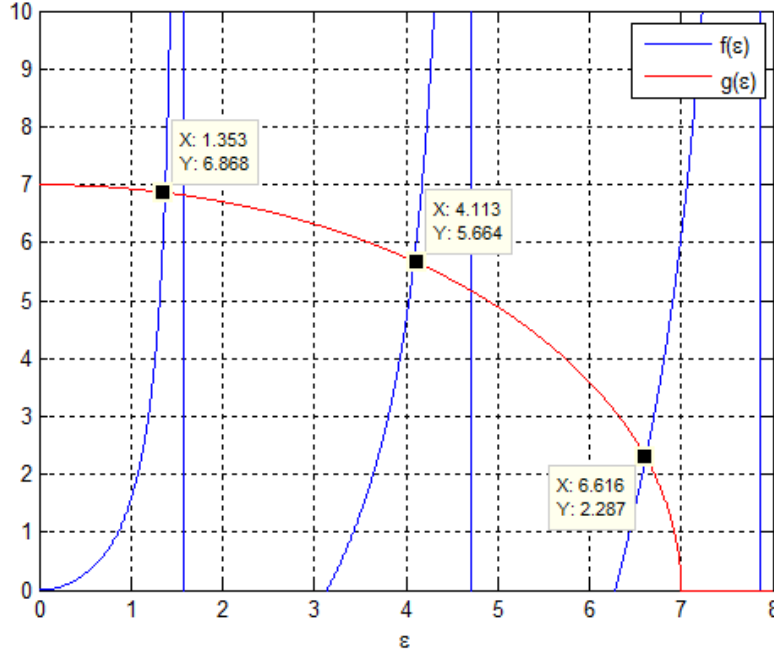
Y la función:

$$g(\varepsilon) = \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar} - \varepsilon^2}$$

Las intersecciones especifican los valores de ε que son soluciones de Ec. (7.76).

Ejemplo

Figura 7.10



Nota. Gráfica de las soluciones pares para el caso $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 7$

La función $f(\varepsilon)$ tiene ceros en $\varepsilon = 0, \pi, 2\pi, \dots$ y tiene asíntotas en $\varepsilon = \pi/2, 3\pi/2, \dots$

La función $g(\varepsilon)$ es un cuarto de círculo de radio $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$. De la Fig. 7.10 se puede observar que el número de soluciones (estados ligados) que existen depende del radio del círculo. Si $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < \pi$ existirá una solución; dos si $\pi < \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 2\pi$; tres si $2\pi < \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 3\pi$; etc.

El caso $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 7$ es el que se ilustra la Fig. 7.10 y existen tres soluciones $\varepsilon \cong 1.35$, $\varepsilon \cong 4.11$ y $\varepsilon \cong 6.62$.

Si de $\varepsilon = \sqrt{mEa^2/2\hbar^2}$ se despeja E :

$$E = \frac{2\hbar^2 \varepsilon^2}{ma^2} = \varepsilon^2 V_0 \frac{2\hbar^2}{V_0 ma^2}$$

$$E \cong \left(\frac{1.35}{7}\right)^2 V_0 \cong 0.0371V_0$$

$$E \cong \left(\frac{4.11}{7}\right)^2 V_0 \cong 0.345V_0$$

$$E \cong \left(\frac{6.62}{7}\right)^2 V_0 \cong 0.894V_0$$

Independientemente del valor de V_0 siempre existe al menos una solución de este tipo, correspondiente a la intersección del cuarto de círculo con la primera rama de la función tangente.

Regresando a la Ec. (7.75), se multiplica todo por $a/2$ y se hace un cambio de variable $\varepsilon = \sqrt{mEa^2/2\hbar^2}$:

$$\sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}} \cotan\left(\sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}}\right) = -\sqrt{\frac{m(V_0-E)a^2}{2\hbar^2}}$$

$$-\varepsilon \cdot \cotan(\varepsilon) = \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} - \varepsilon^2} \quad (7.77)$$

Si se grafica la función:

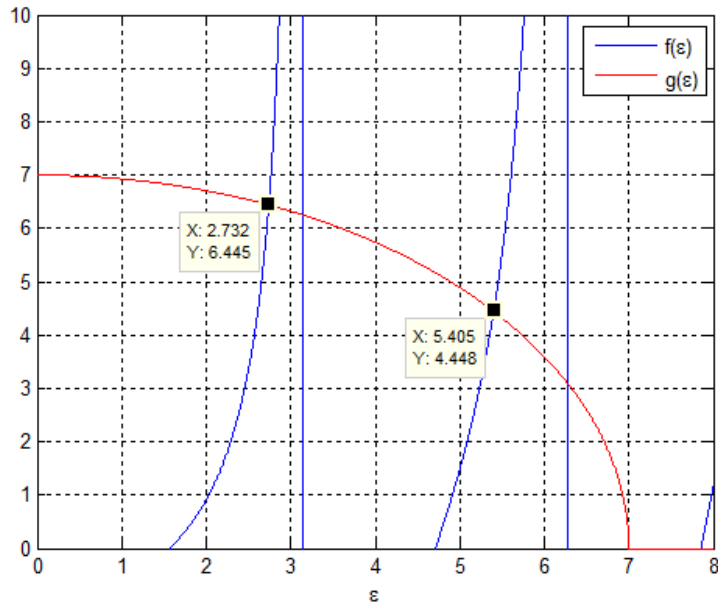
$$f(\varepsilon) = -\varepsilon \cdot \cotan(\varepsilon)$$

Y la función:

$$g(\varepsilon) = \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} - \varepsilon^2}$$

Las intersecciones especifican los valores de ε que son soluciones de Ec. (7.77).

Figura 7.11



Nota. Gráfica de las soluciones impares para el caso $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 7$

En este caso se ve que la función $f(\varepsilon)$ tiene ceros en $\varepsilon = \pi/2, 3\pi/2, \dots$ y tiene asíntotas en $\varepsilon = 0, \pi, 2\pi, \dots$ mientras que la función $g(\varepsilon)$ como el caso anterior, es un cuarto de círculo de radio $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$. De la Figura 7.11 se puede observar que el número de soluciones que existen

depende del radio del círculo. Si $\pi/2 < \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 3\pi/2$ existirá una solución; dos si $3\pi/2 < \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 5\pi/2$; etc.

El caso $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 7$ es el que se ilustra la Fig. 7.11 y existen dos soluciones $\varepsilon \cong 2.732$ y $\varepsilon \cong 5.405$.

Despejando el valor de la energía de la partícula:

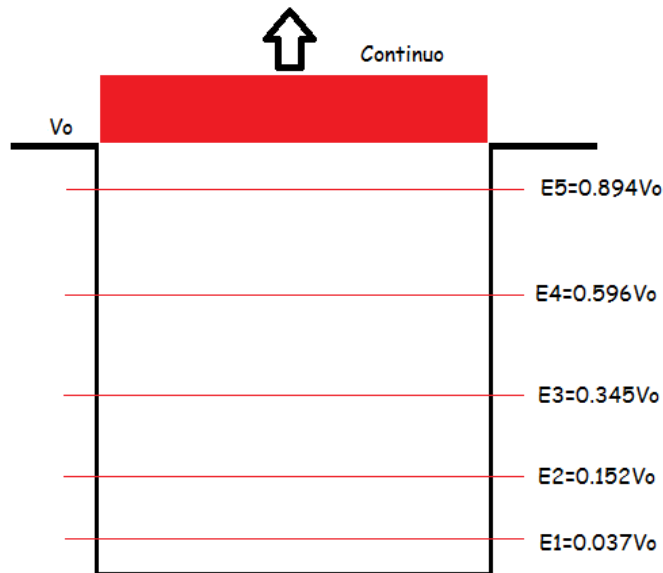
$$E \cong \left(\frac{2.732}{7}\right)^2 V_0 \cong 0.152V_0$$

$$E \cong \left(\frac{5.405}{7}\right)^2 V_0 \cong 0.596V_0$$

Para que existan soluciones impares, es necesario que V_0 supere cierto valor mínimo.

Se ve que para el pozo de potencial dado solamente existe un número restringido de valores permitidos de la energía total E tal que la ecuación de Schrödinger tenga valores aceptables para $E < V_0$. Estos son los valores discretos de energía E para los estados ligados de la partícula. Se dice que la energía está cuantizada a un conjunto de valores posibles. Por otra parte, se sabe que para $E > V_0$ en el pozo de potencial, está permitido cualquier valor de E y los valores para los estados no ligados forman un continuo (Fig. 7.12).

Figura 7.12



Nota. Valores de energías posibles que puede tomar la partícula que se encuentra dentro del pozo finito para el caso $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 7$

En las regiones exteriores al pozo (I) y (III), en la mecánica clásica, nunca sería posible encontrar una partícula ya que su energía cinética $E - V_0$ sería negativa. Sin embargo, a nivel cuántico, las funciones de onda no son cero en estas regiones, aunque tienden a cero más rápidamente conforme disminuye la energía de la partícula.

Por ejemplo, se puede representar el caso de un electrón de conducción en un bloque de metal. La profundidad del pozo es aproximadamente $10eV$ y su ancho es igual al ancho del bloque. Otro ejemplo es el movimiento de un neutrón en un núcleo, que se puede aproximar por un pozo de potencial cuadrado con una profundidad de aproximadamente $50MeV$. Las dimensiones lineales del potencial son iguales al diámetro nuclear ($\sim 10^{-14}m$).

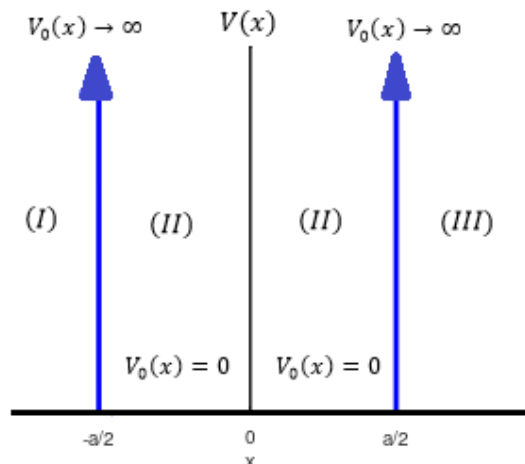
Potencial de pozo cuadrado infinito

El potencial de pozo cuadrado infinito se define como:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -a/2 & (I) \\ 0 & -a/2 < x < a/2 & (II) \\ \infty & x > a/2 & (III) \end{cases} \quad (7.78)$$

A una partícula que se mueve bajo la influencia de un potencial de pozo cuadrado infinito se la denomina partícula en una caja.

Figura 7.13



Nota. Pozo de potencial infinito

La solución general a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la región interna (II) de un pozo cuadrado infinito se puede escribir como:

$$(II) \quad \psi(x) = A' \text{sen}(kx) + B' \text{cos}(kx) \text{ con } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad -a/2 < x < a/2 \quad (7.79)$$

Mientras que para las regiones (I) y (III):

$$(I) \text{ y } (III) \quad \psi(x) = 0 \quad -a/2 \geq x \text{ y } x \geq a/2 \quad (7.80)$$

Y esto deberá ser cierto de modo que la densidad de probabilidad sea cero en estas regiones, ya que la partícula se encuentra estrictamente confinada dentro del pozo por sus paredes de potencial infinitamente altas.

Utilizando Ecs. (7.79), (7.80) y aplicando las condiciones de frontera en los puntos $x = a/2$ y $x = -a/2$ de modo tal que $\psi(x)$ sea continua en dichos puntos se tiene:

$$A' \operatorname{sen}\left(k\frac{a}{2}\right) + B' \cos\left(k\frac{a}{2}\right) = 0$$

$$-A' \operatorname{sen}\left(k\frac{a}{2}\right) + B' \cos\left(k\frac{a}{2}\right) = 0$$

Operando algebraicamente se llega a dos posibles funciones de onda. La primera está dada a partir del sistema:

$$\begin{cases} A' = 0 \\ \cos\left(k\frac{a}{2}\right) = 0 \end{cases}$$

La función de onda es:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < -a/2 & (I) \\ B' \cos(kx) & \text{con } k = n\pi/a \quad n = 1,3,5 \dots & -a/2 < x < a/2 & (II) \\ 0 & x > a/2 & (III) \end{cases}$$

La segunda está dada a partir del sistema:

$$\begin{cases} B' = 0 \\ \operatorname{sen}\left(k\frac{a}{2}\right) = 0 \end{cases}$$

La función de onda es:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < -a/2 & (I) \\ A' \operatorname{sen}(kx) & \text{con } k = n\pi/a \quad n = 2,4,6 \dots & -a/2 < x < a/2 & (II) \\ 0 & x > a/2 & (III) \end{cases}$$

Encontramos que para que se cumplan las condiciones de frontera, k solo pudo tomar ciertos valores permitidos. Se ha utilizado al número cuántico n para denotar las diferentes soluciones posibles. Y también de n dependerán los diferentes valores permitidos de la energía total E que al depender de k también estará cuantizada.

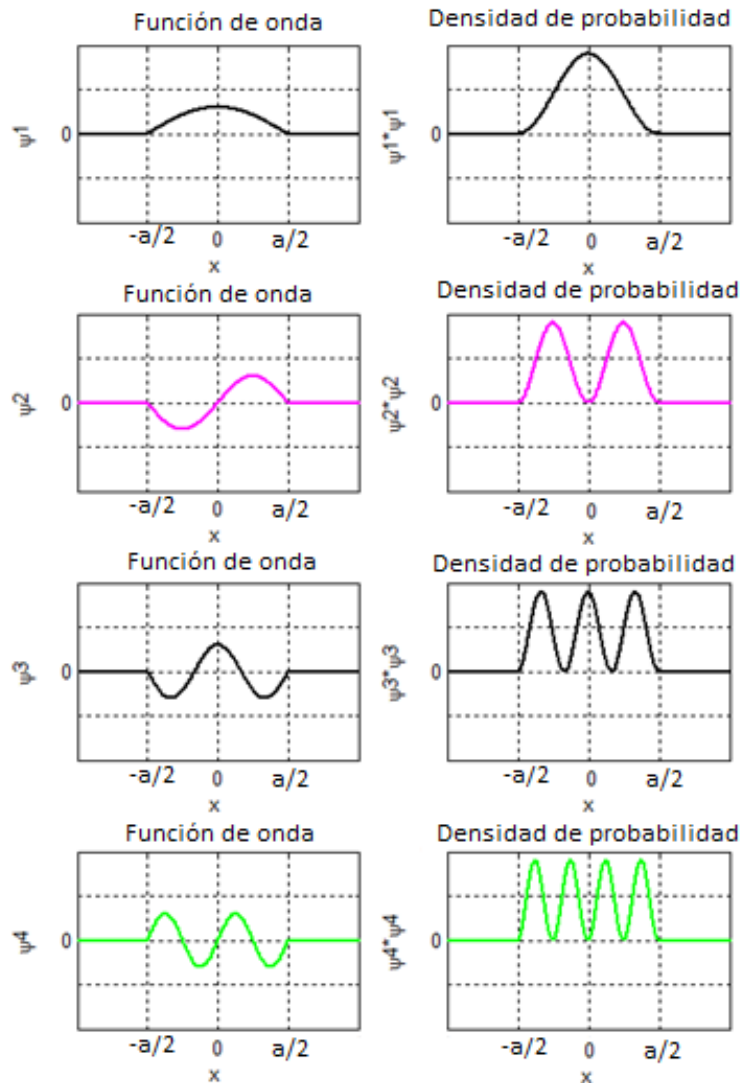
Utilizando la relación $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ y la expresión $k = n\pi/a$ se encuentran los valores permitidos de E :

$$E_n = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad n = 1,2,3,4, \dots$$

La energía del primer nivel para el pozo cuadrado infinito es:

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

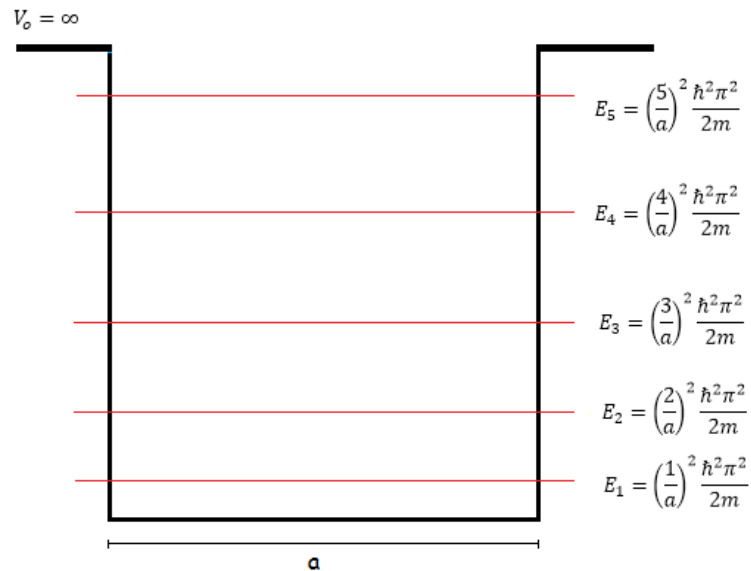
Figura 7.14



Nota. Función de onda y densidad de probabilidad de una partícula en un pozo infinito

La cual se llama energía del punto cero y es la energía total más baja posible que puede tener la partícula si está ligada a la región $-a/2 \leq x \leq a/2$. La partícula no puede tener energía total cero. El fenómeno es un resultado del principio de incertidumbre: si la partícula está ligada por el potencial infinito, entonces se conoce su coordenada x dentro de una incertidumbre de aproximadamente $\Delta x \cong a$, en consecuencia, la incertidumbre en su impulso deberá ser al menos $\Delta p \cong \hbar/2\Delta x \cong \hbar/2a$, es decir que la energía total de la partícula ligada no podría ser cero ya que esto significaría que la incertidumbre en el impulso debería ser igual a cero.

Figura 7.15



Nota. Valores posibles de energía que puede tomar la partícula que se encuentra dentro del pozo infinito

Una observación es que existen discontinuidades en la primera derivada de la función de onda para la partícula en una caja de paredes impenetrables. Estas ocurren en las paredes de la caja y provienen del hecho de que el sistema es una idealización en la cual se supone que las paredes son completamente impenetrables (energía potencial infinita) sin importar qué tan alta sea la energía de la partícula.

Es una buena aproximación para el caso de un electrón de conducción en un bloque de metal, ya que su función de onda penetra una distancia de aproximadamente $10^{-10}m$ en las regiones clásicamente excluidas externas al pozo y es una distancia muy pequeña comparada con el ancho del pozo que es el ancho del bloque de cobre.

“El Gato de Schrödinger”

La verdadera magnitud con sentido físico no es $\Psi(x, t)$ sino $\Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$. En sus esfuerzos por despojar al electrón de su carácter corpuscular, esta es la magnitud que Schrödinger identificó con una distribución de carga esparcida a lo ancho y largo del espacio. Los valores de $\Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$ determinaban qué porción de la carga eléctrica se hallaba en cada punto, en cada instante, como si la partícula lejos de ser puntual, se diseminara por el espacio. Schrödinger se regía bajo conceptos de la física clásica “Los puntos materiales se componen de, o no son otra cosa que ondas”. El universo se componía de un tejido de perturbaciones ondulatorias, que a menudo se concentraban en determinadas regiones del espacio, creando la ilusión, desde la

distancia macroscópica, de corpúsculos. La formulación de la mecánica clásica en términos de ondas se debe a William Rowan Hamilton y Carl Gustav Jacobi.

Cómo ya se vio, Max Born se alejó de esta interpretación para adoptar una perspectiva estadística: en $\Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$ vio una distribución de probabilidad.

Schrödinger jamás aceptó el modo en que Born adulteró su función de onda. Introdujo en la sociedad su famosa paradoja del gato en un extenso artículo publicado en 1936. Ideó su experimento para poner en evidencia las lagunas de la mecánica cuántica. Y Einstein coincidía con él en el diagnóstico: “Una función que contiene al gato vivo además del gato muerto sencillamente no puede tomarse como una descripción de un estado de cosas real”.

En los laboratorios se hicieron cantidades de experimentos del tipo del gato de Schrödinger. Se ha conseguido situar una serie de estructuras, cada vez más complejas, en una superposición de estados. En 1990 fueron moléculas de sesenta átomos de carbono; un año después, corrientes en anillos superconductores; en 2011 moléculas formadas por 430 átomos. En 2010, un metrónomo del grosor de un cabello capaz de vibrar poco y mucho al mismo tiempo (Laserna 2012 a). Los resultados refrendaron la interpretación de Born.

El dominio de las superposiciones macroscópicas abre la vía a su aplicación en las computadoras cuánticas. Las actuales trabajan con una aritmética de ceros y unos. La base operativa de su equivalente cuántico sería un sistema capaz de adoptar dos estados. Si además se sitúa en una superposición estaría simultáneamente en ambos. En un dispositivo cuántico se procesarían en paralelo las instrucciones correspondientes a las dos alternativas. La salida al laberinto de la paradoja de Schrödinger y a gran parte de los problemas de la interpretación cuántica apunta al concepto de *decoherencia* que fue desarrollado por Heinz Dieter Zeh en 1970. Viene a decir que los estados de superposición son perfectamente admisibles, pero al mismo tiempo son en extremo delicados. Para que se desbaraten basta la interacción con el resto del universo. (...) Por lo tanto la extrañeza del mundo cuántico en realidad no se debe a la escala, sino a que requiere un elevado grado de reclusión para manifestarse. En nuestra vida cotidiana no asistimos a superposiciones porque resulta casi imposible aislar un objeto macroscópico de las interacciones que las destruyen. La decoherencia describe, desde la ecuación de Schrödinger como el mundo clásico emerge del cuántico a través de su relación con el ambiente. (...) El gato de Schrödinger, por muy encerrado que esté en su cámara de acero, mantiene diálogo animado con el medio que lo rodea. (Laserna 2012 b).

Problemas resueltos

Problema 1:

a) Demuestre que $\psi = A \sin(kx) + B \cos(kx)$ con $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ es una solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre confinada en una caja de longitud L cuya energía potencial es $V(x) = 0$ dentro de la caja.

b) Explique por qué $\psi = A \sin(kx)$ es una función de onda aceptable para una partícula en una caja con paredes rígidas en $x = 0$ y en $x = L$ sólo si k es un múltiplo entero de $\frac{\pi}{L}$ ($k = \frac{n\pi}{L}$).

c) Repita el apartado b) para $\psi = A \cos(kx)$. Explique por qué ésta NO es una función de onda aceptable para una partícula en una caja con paredes rígidas en $x = 0$ y en $x = L$ sin importar el valor de k .

d) Encuentre los valores permitidos de la energía.

e) Para la función de onda del ítem b) encuentre la constante de normalización A y determine la función densidad de probabilidad de la partícula en $0 \leq x \leq L$.

Solución:

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es:

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

Tenemos una partícula libre confinada en una caja de longitud L cuya energía potencial es $V(x) = 0$ dentro de la caja.

La ecuación de Schrödinger dentro de la caja, donde $V(x) = 0$ es:

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

Para demostrar que $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$ con $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ es una solución de la ecuación de Schrödinger debemos derivar la función propuesta y reemplazarla en la ecuación diferencial de Schrödinger:

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

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = k A \cos(kx) - k B \sin(kx)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2 A \sin(kx) - B k^2 \cos(kx) = -k^2 \psi(x)$$

Reemplazando en la ecuación de Schrödinger:

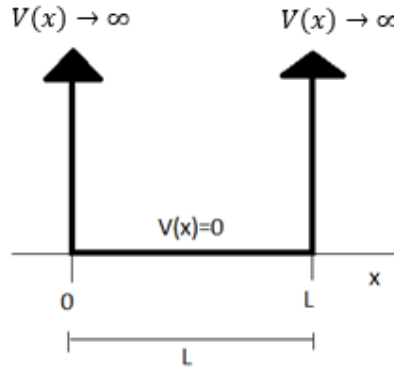
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2 \psi(x)) = E\psi(x) \Rightarrow k^2 \frac{\hbar^2}{2m} = E$$

$$\Rightarrow k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Hemos verificado que $\psi(x)$ es solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre, confinada en una caja.

b) Analizaremos si $\psi(x) = A \sin(kx)$ es una función de onda aceptable para una partícula en una caja con paredes rígidas en $x = 0$ y en $x = L$ y calcularemos los posibles valores que podrá tomar k .

Dada una caja con paredes rígidas, el potencial será $V(x) = 0$ dentro de la caja unidimensional de longitud L y $V(x) \rightarrow \infty$ fuera de ella.



- $\psi(x) = A \sin(kx)$ es continua en $0 \leq x \leq L$.
- $\frac{d\psi}{dx}$ es continua en $0 \leq x \leq L$.
- $\psi(x)$ es solución de la ecuación de Schrödinger (verificado en el ítem anterior).
- $\psi(x)$ debe cumplir con las condiciones de borde para asegurar que la función de onda sea continua $\forall x$.

Analizaremos si $\psi(x)$ cumple con las condiciones de borde:

Tenemos que $\psi(x) = A \sin(kx)$ en $0 \leq x \leq L$ y la función de onda es nula en $x \leq 0 \wedge L \leq x$ porque la densidad de probabilidad debe ser cero en estas regiones, ya que la partícula se encuentra estrictamente confinada dentro del pozo por sus paredes de potencial infinitamente altas.

Para que haya continuidad en los bordes, se tiene que cumplir:

$$\psi(0) = A \sin(k \cdot 0) = 0$$

$$\psi(L) = A \sin(k \cdot L) = 0$$

La primera de las ecuaciones se cumple para cualquier valor de A y de k . Pero la segunda de las ecuaciones se cumple para $A = 0$ (solución trivial), lo cual no tiene sentido porque implicaría que $\psi(x) = 0 \forall x$ y por lo tanto la probabilidad de encontrar la partícula en algún lugar de la caja sería nula.

La solución posible es:

$$\sin(k \cdot L) = 0 \Rightarrow k \cdot L = n\pi \quad n = 1, 2, 3 \dots \Rightarrow k = \frac{n\pi}{L} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

Obtuvimos así que $\psi(x) = A \sin(kx)$ es una función de onda aceptable para una partícula en una caja con paredes rígidas en $x = 0$ y en $x = L$ y se debe cumplir que $k = \frac{n\pi}{L} \quad n = 1, 2, 3 \dots$

c) Analizaremos por qué $\psi(x) = A \cos(kx)$ NO es una función de onda aceptable para una partícula en una caja con paredes rígidas en $x = 0$ y en $x = L$ sin importar el valor de k .

Si bien $\psi(x) = A \cos(kx)$ es continua en $0 \leq x \leq L$, su derivada es continua y $\psi(x)$ es

solución de la ecuación de Schrödinger como verificamos en a), $\psi(x)$ debe cumplir con las condiciones de borde para asegurar que la función de onda sea continua $\forall x$.

Para que haya continuidad en los bordes, se tiene que cumplir:

$$\psi(0) = A \cos(k \cdot 0) = 0$$

$$\psi(L) = A \cos(k \cdot L) = 0$$

Si queremos que la primera de las ecuaciones se cumpla, la única posibilidad es que $A = 0$ (solución trivial), lo cual como vimos, no tiene sentido porque implicaría que $\psi(x) = 0 \forall x$ y por lo tanto la probabilidad de encontrar la partícula en algún lugar de la caja sería nula.

No existe una solución distinta a la trivial, en la que $A \neq 0$. Por lo tanto, $\psi(x) = A \cos(kx)$ no cumple con las condiciones de borde para que la función de onda sea continua $\forall x$.

d) Debido a las condiciones de frontera que debe cumplir la función de onda, aparece la cuantización de la energía. Sólo son permitidos ciertos valores de energía total E y su expresión se puede deducir igualando las expresiones halladas de k :

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow E = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m} = n^2 \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}\right) \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

e) Para hallar la constante arbitraria A se debe aplicar la condición de normalización sobre $\psi(x)$, en la cual, la probabilidad total de encontrar a la partícula en algún lugar sobre el eje x es igual a uno:

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

En este caso, la probabilidad de encontrar a la partícula en algún lugar en el intervalo $0 \leq x \leq L$ es igual a uno:

$$\Rightarrow \int_0^L |A \sin(kx)|^2 dx = A^2 \int_0^L \sin^2(kx) dx = A^2 \int_0^L \left(\frac{1 - \cos(2kx)}{2}\right) dx = A^2 \frac{L}{2}$$

$$\Rightarrow A^2 \frac{L}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Así, la función de onda independiente del tiempo, para una partícula confinada en un pozo infinito es:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

para $0 \leq x \leq L$ y cero en el resto del intervalo.

La función de onda dependiente del tiempo:

$$\Psi(x, t) = \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right] e^{-\frac{iE}{\hbar} t} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

para $0 \leq x \leq L$ y cero en el resto del intervalo.

Y la función densidad de probabilidad:

$$\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad n = 1,2,3 \dots$$

para $0 \leq x \leq L$ y cero en el resto del intervalo.

Problema 2: Una partícula cuántica en un pozo cuadrado de profundidad infinita tiene una función de onda dada por:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen}\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

para $0 \leq x \leq L$; de otro modo es cero.

- Determine la probabilidad de hallar la partícula entre: $x = 0$ y $x = L/3$.
- Utilice el resultado de este cálculo y argumentos de simetría para hallar la probabilidad de encontrar la partícula entre: $x = 2L/3$ y $x = L$. No evalúe de nuevo la integral.
- Utilice los resultados anteriores para hallar la probabilidad de encontrar la partícula entre: $x = L/3$ y $x = 2L/3$. No evalúe de nuevo la integral.

Solución:

Dada una partícula cuántica en un pozo cuadrado de profundidad infinita con una función de onda conocida:

$$\psi_1(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen}\left(\frac{\pi x}{L}\right) & \text{si } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{c. c} \end{cases}$$

a) Para calcular la probabilidad de hallar la partícula entre: $x = 0$ y $x = L/3$ debemos integrar en el intervalo deseado a la función densidad de probabilidad.

La función densidad de probabilidad se obtiene multiplicando la función por su conjugada:

$$\psi_1(x)\psi_1^*(x) = |\psi_1(x)|^2 = \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad 0 \leq x \leq L$$

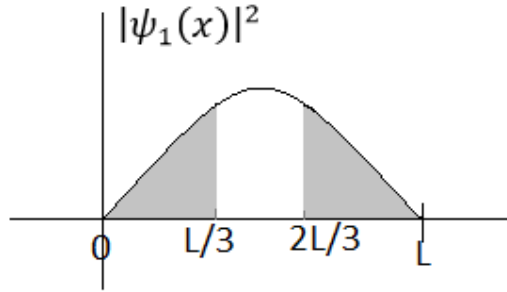
Luego integramos entre $x = 0$ y $x = L/3$:

$$P_1 = \int_0^{L/3} \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{2}{L} \int_0^{L/3} \left(\frac{1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)}{2} \right) dx$$

$$P_1 = \frac{1}{L} \left(\frac{L}{3} - \frac{L}{2\pi} \text{sen}\left(\frac{2\pi}{L} \frac{L}{3}\right) + \frac{L}{2\pi} \text{sen}(0) \right) = \frac{1}{L} \left(\frac{L}{3} - \frac{L}{2\pi} \text{sen}\left(\frac{2\pi}{3}\right) \right)$$

$$P_1 = \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi} \frac{\sqrt{3}}{2} = \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi} \sqrt{3}$$

b) Por simetría, la probabilidad de encontrar la partícula entre $x = 2L/3$ y $x = L$ es la misma que la probabilidad de encontrar la partícula $x = 0$ y $x = L/3$. La integral bajo la curva entre $x = 2L/3$ y $x = L$ es igual a la integral bajo la curva entre $x = 0$ y $x = L/3$:



$$P_2 = \int_{2L/3}^L \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = P_1 = \int_0^{L/3} \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi} \sqrt{3}$$

c) Sabemos que la probabilidad de encontrar la partícula dentro del pozo de paredes rígidas es 1:

$$\int_0^L \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = 1$$

Y por propiedad de integrales tenemos:

$$\int_0^L \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \int_0^{L/3} \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx + \int_{L/3}^{2L/3} \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx + \int_{2L/3}^L \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx$$

Igualando y despejando la integral que queremos calcular:

$$\int_{L/3}^{2L/3} \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = 1 - \int_0^{L/3} \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx - \int_{2L/3}^L \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx$$

Las integrales del término de la derecha ya las calculamos en los incisos anteriores, así que si reemplazamos:

$$P_3 = \int_{L/3}^{2L/3} \frac{2}{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = 1 - 2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi} \sqrt{3}\right) = \frac{1}{3} + \frac{1}{2\pi} \sqrt{3}$$

Problema 3: Un electrón y un deuterón intentan penetrar una barrera de potencial de altura 10MeV y ancho 10^{-14}m . Ambas partículas tienen una energía total de 3MeV . Evaluar la probabilidad de éxito para ambas partículas.

Solución:

Para el deuterón:

$$k_{II} \alpha = \alpha \sqrt{\frac{2m_d V_0}{\hbar^2} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} = 8,2$$

En este caso, como $k_{II} \alpha = 8,2 \gg 1$ se puede evaluar el coeficiente de transmisión con la expresión aproximada (7.51), sin tener un error apreciable por ello:

$$T \cong 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2k_{II} \alpha} = 2,4919 \times 10^{-7}$$

Al calcular el coeficiente de transmisión con la expresión completa (7.49), se obtiene el mismo resultado. La probabilidad de éxito de penetrar la barrera para el caso del deuterón es muy pequeña ($2,5 \times 10^{-5}$).

En cambio, para el electrón:

$$k_{II}\alpha = \alpha \sqrt{\frac{2m_e V_0}{\hbar^2} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} = 0,1355$$

Dado que $k_{II}\alpha = 0,1355 \ll 1$, la condición necesaria para utilizar la aproximación no se cumple. Entonces se debe utilizar la expresión (7.49) en el cálculo del coeficiente de transmisión:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{senh}^2(k_{II}a)} = 0,9785$$

Es decir, que la probabilidad del electrón, de penetrar esa barrera de potencial es muy alta (%97,85).

Problema 4: Evaluar el coeficiente de transmisión para un protón de energía total $2eV$ que incide sobre una barrera de potencial rectangular de altura $4eV$ y espesor $10^{-14}m$ utilizando Ec. (7.49) y (7.51). Comparar ambos resultados. b) Repetir la evaluación y la comparación para una barrera de 1\AA ancho. Justifique.

Solución:

Para $\alpha = 10^{-14}m$

$$k_{II}\alpha = \alpha \sqrt{\frac{2m_p V_0}{\hbar^2} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} = 3,1025 \times 10^{-3}$$

Si se utiliza la expresión (7.49) para calcular el coeficiente de transmisión, se obtiene:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{senh}^2(k_{II}a)} = 1$$

Con la expresión (7.51) se obtiene:

$$T \cong 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2k_{II}a} = 3,9753$$

Y este último resultado es un absurdo.

Al aplicar la Ec. (7.51) del coeficiente de transmisión, se utiliza una expresión que es válida, siempre que se cumpla $k_{II}a \gg 1$. En este caso, se tiene que $k_{II}\alpha = 3,1025 \times 10^{-3}$, la condición dista mucho de cumplirse, y la aproximación del coeficiente de transmisión no es válida, arrojando resultados absurdos.

Además, para el ancho $\alpha = 10^{-14}m$ de la barrera de potencial, el coeficiente de transmisión es 1, indicando que la probabilidad de que el protón atraviese la barrera es total.

Para $a = 1\text{\AA}$

$$k_{II}\alpha = \alpha \sqrt{\frac{2m_p V_0}{\hbar^2} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} = 31,025$$

Utilizando la expresión (7.49) para calcular el coeficiente de transmisión, se obtiene:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(k_{II}a)} = 4,507 \times 10^{-27}$$

Utilizando la expresión (7.51):

$$T \cong 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2k_{II}a} = 4,507 \times 10^{-27}$$

Problemas propuestos

Problema 1: Demostrar que si $\Psi_1(x, t)$ y $\Psi_2(x, t)$ son dos soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una $V(x, t)$ particular, entonces:

$$\Psi(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t)$$

también es una solución de esta ecuación, donde c_1 y c_2 son constantes de valor arbitrario.

Problema 2: ¿Cómo se determinan la posición y la velocidad de una partícula cuántica a partir de la función de onda asociada?

Problema 3: Sea una partícula en un potencial tal que $V(x) = 0$ para $0 < x < a$ y $V(x) = \infty$ para los demás valores: a) Resuelva la ecuación de Schrödinger hallando las funciones de onda en todo el espacio y las energías de los niveles permitidos. Grafique la función de onda y la densidad de probabilidad para $n = 1, 2, 3$. b) Calcule Δx y Δp para $n = 1$. c) Calcule las diferencias entre las energías de los estados $n = 1$ y $n = 2$ si la partícula tiene una masa de 9×10^{-31} kg o 1 g. Considere que el ancho del pozo es 0,1 nm. d) Mostrar que no es posible que la partícula tenga energía cinética nula dentro de la caja. Calcular la energía más baja que puede tener un neutrón ($m = 1,67 \times 10^{-27}$ kg) confinado en un espacio de 10^{-14} m.

Problema 4: Un electrón está confinado en un pozo cuadrado de $a = 0,75$ nm de ancho y profundidad $U_0 = 6E_\infty$, donde E_∞ , es la energía del estado fundamental de un pozo de potencial infinito de ancho $a = 0,75$ nm. Si el electrón está inicialmente en el nivel fundamental (suponga que la energía del estado fundamental es E_∞) y absorbe un fotón. ¿Qué longitud de onda máxima puede tener el fotón y aún liberar al electrón del pozo?

Problema 5: Un electrón con una energía cinética inicial $E = 3$ eV encuentra una barrera de altura V_0 y ancho $a = 0,5$ nm. ¿Cuál es el coeficiente de transmisión para los siguientes casos?

- $V_0 = 5$ eV
- $V_0 = 7$ eV
- $V_0 = 11$ eV

Problema 6: Un electrón con energía de 10 eV incide sobre una barrera de potencial de altura de 25 eV y ancho 1 nm. A partir de la expresión para el coeficiente de transmisión calcular un

orden de magnitud de la probabilidad que el electrón tunelee a través de la barrera. Repetir para un ancho de $0,1 \text{ nm}$ y comparar.

Problema 7: Un haz de electrones con energía cinética de 2 eV incide en una barrera de potencial de $V_0 = 6,5 \text{ eV}$ y ancho $5 \times 10^{-10} \text{ m}$. ¿Qué fracción de electrones en el haz se transmite a través de la barrera?

Problema 8: Estimar la distancia de penetración Δx para una partícula muy pequeña de radio $r = 10^{-6} \text{ m}$ y densidad $\rho = 104 \text{ kg/m}^3$ que se mueve a la velocidad muy pequeña $v = 10^{-2} \text{ m/s}$, si la partícula golpea en la región de la izquierda de un potencial escalón de altura igual al doble de la energía cinética de la partícula.

Problema 9: Sea un pozo de potencial finito en el que la profundidad es $V_0 = 4 \text{ eV}$ y el ancho es $a = 0,5 \text{ nm}$. Determinar los valores de energía permitidos para un electrón.

Referencias

Laserna D. B. (2012 a) Schrödinger. Las paradojas cuánticas. *Grandes ideas de la ciencia*. p.156.
Laserna D. B. (2012 b) Schrödinger. Las paradojas cuánticas. *Grandes ideas de la ciencia*. p.157 y158.

CAPÍTULO 8

Ecuación de Schrödinger 3D: el átomo de Hidrógeno y la Tabla Periódica

Solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de Hidrógeno

La solución de la ecuación de Schrödinger del átomo más simple, es decir el átomo de Hidrógeno representa la solución exacta al problema en el marco teórico de la mecánica cuántica. A partir de esta solución vamos a obtener las funciones de onda del electrón en el átomo, las energías permitidas y los números cuánticos correspondientes. Con esta solución se podrán determinar las propiedades atómicas reales, de las cuales algunas podían obtenerse desde el modelo semiclásico de Bohr mientras que otras no eran predichas por Bohr. Tales propiedades son: las funciones de densidad de probabilidad del electrón en el átomo que cumplen el principio de incerteza mientras que las órbitas deterministas de Bohr no lo cumplen; el impulso angular orbital del electrón en una órbita del átomo, determinado de manera errónea por el modelo de Bohr; efectos relativistas como el *spin* electrónico que no fue predicho por el modelo de Bohr. Finalmente, esta solución con sus números cuánticos correspondientes es de gran importancia para la física atómica debido a que constituye el marco teórico necesario para estudiar el resto de los átomos con más de un electrón, así como las moléculas a partir la mecánica cuántica.

Suponiendo que el núcleo del átomo H se encuentra en reposo en el origen de coordenadas, entonces la energía de atracción coulombiana que experimentará el electrón en el átomo puede expresarse como:

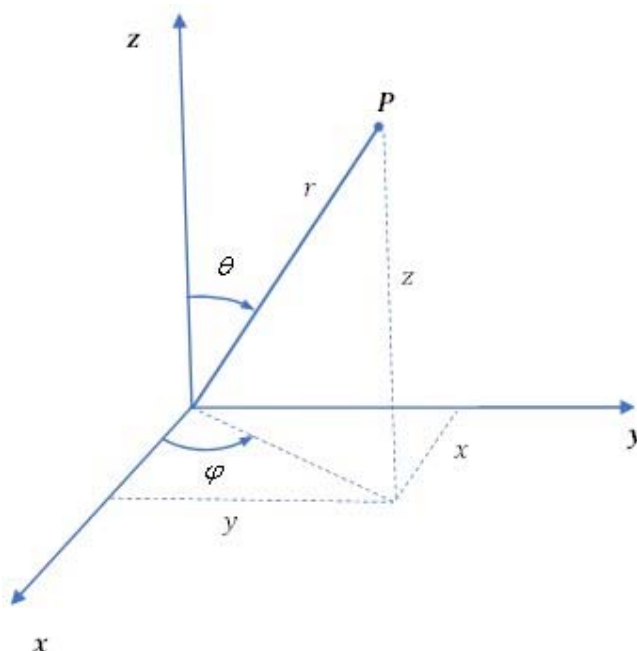
$$V(r) = \frac{-Z e^2}{4\pi \epsilon_0 r} \quad (8.1)$$

donde se evidencia la simetría esférica del potencial central de interacción entre el electrón y el núcleo. Cabe aclarar que se ha agregado el número atómico Z para el caso general de un electrón que experimenta la atracción coulombiana de un núcleo con Z protones.

Entonces, considerando la simetría esférica anteriormente descrita, convendrá escribir la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas. En la Fig. 8.1 se esquematizan las coordenadas cartesianas y las coordenadas esféricas de un punto P en el espacio. Tales coordenadas se relacionan según:

$$\begin{aligned} x &= r \operatorname{sen}(\theta) \cos(\varphi) \\ y &= r \operatorname{sen}(\theta) \operatorname{sen}(\varphi) \\ z &= r \cos(\theta) \end{aligned} \quad (8.2)$$

Figura 8.1



Nota. Coordenadas esféricas r, θ, φ y coordenadas cartesianas x, y, z de un punto P en el espacio

Entonces, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo del electrón en un átomo hidrogenoide de número atómico Z puede expresarse como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, \theta, \varphi) + V(r) \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi) \quad (8.3)$$

donde ∇^2 es el operador Laplaciano y en coordenadas esféricas se expresa como:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (8.4)$$

Además, m es la masa del electrón. Cabe destacar que, si bien el núcleo es del orden de dos mil veces más masivo que el electrón, tiene masa finita (M) por lo que hay que considerar el hecho que el centro de masas del sistema núcleo-electrón no se encuentra en el centro de dicho núcleo. La corrección de este error implica que en lugar de la masa m del electrón hay que utilizar la masa reducida del sistema $\mu = M \cdot m / (M + m)$. Realizaremos los cálculos con la masa m del electrón haciendo la salvedad que para obtener los valores exactos de las energías permitidas deberá usarse la masa reducida μ del sistema en lugar de m .

Entonces, considerando que el potencial coulombiano tiene simetría esférica, vamos a proponer separación de variables para expresar la función de onda del electrón independiente del tiempo:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \quad (8.5)$$

Entonces sustituyamos explícitamente la función de onda Ec. (8.5) en la ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R\Theta\Phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 R\Theta\Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial R\Theta\Phi}{\partial \theta} \right) \right] + \quad (8.6)$$

$$+V(r) R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi) = E R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

Realizando las derivadas parciales se tiene:

$$-\frac{\hbar}{2m} \left[\frac{\Theta\Phi}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R\Theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{R\Phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \right] + \quad (8.7)$$

$$+V(r) R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi) = E R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

Ahora despejamos la segunda derivada de la función Φ :

$$\frac{R\Theta \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}}{R\Theta\Phi} = \frac{-\left[\Theta\Phi \sin^2 \theta \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + R\Phi \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] - \frac{2m}{\hbar^2} r^2 \sin^2 \theta [E - V(r)] R\Theta\Phi}{R\Theta\Phi}$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = -\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{2m}{\hbar^2} r^2 \sin^2 \theta [E - V(r)] \quad (8.8)$$

Debido a que el primer miembro de la Ec. (8.8) solo depende de φ , mientras que el segundo miembro solo depende de r y θ , entonces ambos miembros deberán ser constantes. Por conveniencia tal como se verá más adelante, el valor de la constante se definirá igual a $-m_l^2$. Por lo expuesto, el primer miembro queda:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = -m_l^2 \Phi \quad (8.9)$$

El segundo miembro de la Ec. (8.8) luego de separar lo que depende de r en un miembro y lo que depende de θ en el otro miembro, queda:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2m}{\hbar^2} r^2 [E - V(r)] = \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \quad (8.10)$$

Nuevamente, hemos obtenido el primer miembro de la Ec. (8.10) que solo depende de r , mientras que el segundo miembro de la misma ecuación solo depende de θ por lo que ambos miembros deben ser iguales a una constante. Y otra vez, por conveniencia tal como se describirá más adelante, dicha constante se elige como $l(l+1)$:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] R = \frac{l(l+1)}{r^2} R \quad (8.11)$$

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \Theta = l(l+1)\Theta \quad (8.12)$$

Por lo tanto, a partir de aplicar separación de variables en la función de onda $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$, hemos reducido el problema de la ecuación diferencial original de tres variables a tres ecuaciones diferenciales ordinarias Ecs. (8.9), (8.11) y (8.12) cuyas soluciones nos darán las funciones $R(r)$, $\Theta(\theta)$ y $\Phi(\varphi)$. A continuación, veremos que la Ec. (8.9) solo tiene soluciones aceptables para determinados valores de m_l . A partir de estos valores, veremos que la Ec. (8.11) solo tiene soluciones aceptables para determinados valores de l . Y finalmente, con estos valores veremos que la Ec. (8.12) solo tiene soluciones aceptables para determinados valores de la energía E del átomo.

Entonces, presentemos primero la solución a la ecuación diferencial (8.9). Es fácil ver que las soluciones de la Ec. (8.9) se pueden expresar como:

$$\Phi(\varphi) = e^{i m_l \varphi} \quad (8.13)$$

Cabe destacar que la función $\Phi(\varphi)$ debe ser periódica en 2π . Por ejemplo, el ángulo azimutal $\varphi=0$ es el mismo que $\varphi = 2\pi$. Entonces, evaluemos la función Φ en dichos valores:

$$\begin{aligned} \Phi(0) &= e^{i m_l 0} \\ \Phi(2\pi) &= e^{i m_l 2\pi} = \cos(m_l 2\pi) + i \sin(m_l 2\pi) \end{aligned}$$

entonces

$$\Phi(0) = \Phi(2\pi) \Rightarrow \cos(m_l 2\pi) + i \sin(m_l 2\pi) = 1 \Rightarrow |m_l| = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (8.14)$$

Entonces, para que se cumpla (8.14) y Φ sea monovaluada, m_l deberá tomar uno de los valores $|m_l| = 0, 1, 2, 3, \dots$, o lo que es lo mismo $m_l = \dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots$.

Para encontrar las soluciones $\Theta(\theta)$ de la ecuación (8.12) se puede demostrar que l toma los valores $l = |m_l|, |m_l| + 1, |m_l| + 2, |m_l| + 3, \dots$. Y las soluciones se pueden expresar como:

$$\Theta_{lm_l}(\theta) = \text{sen}^{|m_l|} \theta F_{l|m_l|}(\cos \theta) \quad (8.15)$$

Las funciones $F_{l|m_l|}(\cos \theta)$ son polinomios en $\cos \theta$, y su forma depende del número cuántico l y del valor absoluto del número cuántico m_l .

Finalmente, procediendo de la misma manera con la Ec. (8.12) para hallar las funciones $R(r)$ aceptables, se encuentra que esto ocurre para valores de E tales que:

$$E_n = \frac{m Z^2 e^4}{(4 \pi \epsilon_0)^2 2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -Z^2 \frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \quad (8.16)$$

donde el número cuántico n en Ec. (8.16) puede tomar uno de los valores $n = l + 1, l + 2, l + 3, \dots$. Y las soluciones aceptables para $R(r)$ se pueden expresar como:

$$R_{nl}(r) = e^{-n Z r / a_0} \left(Z \frac{r}{a_0} \right)^l G_{nl} \left(Z \frac{r}{a_0} \right) \quad (8.17)$$

donde a_0 es el radio de Bohr dado por:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{ \AA} \quad (8.18)$$

Y las funciones $G_{nl}(Zr/a_0)$ son polinomios en Zr/a_0 .

Cabe destacar que a pesar de que las funciones R dependen de los números cuánticos n y l , sin embargo, los valores permitidos de E solo dependen de n .

Resumiendo, los números cuánticos para el electrón en el átomo de hidrógeno pueden expresarse como:

$$\begin{aligned} |m_l| &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ l &= |m_l|, |m_l| + 1, |m_l| + 2, |m_l| + 3, \dots \\ n &= l + 1, l + 2, l + 3, \dots \end{aligned} \quad (8.19)$$

Sin embargo, para analizar la Tabla Periódica es conveniente expresar los números cuánticos comenzando desde el número n . Primero veamos cual es el número mínimo para n , dicho valor

es $l + 1$, el valor mínimo para l es $|m_l|$ y el valor mínimo de $|m_l|$ es cero. Por lo tanto, el valor mínimo para n será $n = 0 + 1 = 1$. Por lo tanto, n tomará valores enteros y positivos comenzando en la unidad ($n = 1, 2, 3, \dots$).

Para cada valor de n , el valor máximo de l será aquel que satisface $n = l + 1$ o lo que es lo mismo $l = n - 1$. Entonces los valores posibles de l son $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$.

Finalmente, dado un valor de l , m_l puede tomar el valor máximo $m_l = +l$ y el valor mínimo $m_l = -l$ y el resto de los valores que puede tomar son los enteros entre $-l$ y $+l$, entonces $m_l = -l, -l + 1, -l + 2, \dots, 0, \dots, l - 2, l - 1, l$.

Esto puede resumirse en las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ l &= 0, 1, 2, \dots, n - 1 \\ m_l &= -l, -l + 1, -l + 2, \dots, 0, \dots, l - 2, l - 1, l \end{aligned} \quad (8.20)$$

Para terminar, es interesante analizar el hecho que E_n solo depende del número cuántico principal n y no de los números l y m_l . Esto implica que habrá más de un electrón con el mismo valor de energía E_n pero con diferentes números cuánticos. El número máximo de electrones con diferentes números cuánticos, pero con la misma energía E_n , se conoce como la degeneración de un nivel de energía E_n . Entonces, para determinar la degeneración de un nivel arbitrario n , deberemos considerar todos los números posibles de l para el nivel n , pero los valores posibles son $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. Es decir que para cada nivel n hay n posibles valores de l . Además, para cada valor de l , m_l puede tomar los valores $m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$, es decir que para cada l , m_l puede tomar $2l + 1$ valores diferentes. Adicionalmente, para cada nivel la degeneración calculada como se describió anteriormente deberá multiplicarse por un factor 2 debido a las dos posibles orientaciones del momento intrínseco de espín del electrón. Por lo tanto, la degeneración $d_{n,l}$ de un subnivel n, l será $d_{n,l} = 2(2l + 1)$, y la degeneración d_n de un nivel n será $d_n = 2n^2$ tal como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} d_n &= \sum_{l=0}^{n-1} 2 \times (2l + 1) = \\ &= 2(2 \times 0 + 1) + 2(2 \times 1 + 1) + 2(2 \times 2 + 1) + \dots + 2(2 \times (n - 1) + 1) = \\ &= 2[(2 \times 0 + 1) + (2 \times 1 + 1) + (2 \times 2 + 1) + \dots + (2 \times (n - 1) + 1)] = \quad (8.21) \\ &= 2[2(0 + 1 + 2 + \dots + n - 1) + (1 + 1 + 1 + \dots + 1)] = \\ &= 2 \left[2 \frac{n(n-1)}{2} + n \right] = 2[n^2 - n + n] = 2n^2 \end{aligned}$$

Impulso angular orbital

En el apartado anterior mostramos la solución de la ecuación de Schrödinger del átomo de Hidrógeno. A partir del método de separación de variables, vimos cómo se resolvía la ecuación diferencial del sistema. Mostramos la forma de las funciones de onda correspondientes, obtuvimos la expresión de la energía del electrón en un átomo hidrogenoide de número atómico Z . En este apartado mostraremos la relación entre el momento angular total L y el número

cuántico orbital l , y la relación entre la componente L_z del momento angular y el número cuántico azimutal m_l . Veremos que estas relaciones se pueden expresar como:

$$\begin{aligned} L_z &= m_l \hbar \\ L &= \sqrt{l(l+1)}\hbar \end{aligned} \quad (8.22)$$

Como información necesaria para obtener las relaciones presentadas en (8.22) utilizaremos la expresión de los operadores L y L_z en coordenadas esféricas actuando sobre la función de onda correspondiente:

$$\hat{L}^2 \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) \quad (8.23)$$

$$\hat{L}_z \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = -i\hbar \frac{\partial \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)}{\partial\phi} \quad (8.24)$$

Considerando explícitamente las expresiones (8.13), (8.15) y (8.17) en la función de onda total $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\phi)$, y aplicando los operadores \hat{L}^2 y \hat{L}_z a la función de onda total, se tiene:

$$\hat{L}^2 \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) \quad (8.25)$$

$$\hat{L}_z \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = m_l \hbar \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) \quad (8.26)$$

Formalmente, para encontrar el valor de expectación de L y L_z se utilizan las ecuaciones de cuantización (8.25) y (8.26) de dichos operadores y luego se calculan los valores de expectación correspondientes:

$$\bar{L}_z = \int \psi^*_{nlm_l} \hat{L}_z \psi_{nlm_l} d^3r = m_l \hbar \int \psi^*_{nlm_l} \psi_{nlm_l} d^3r = m_l \hbar \quad (8.27)$$

$$\bar{L}^2 = \int \psi^*_{nlm_l} \hat{L}^2 \psi_{nlm_l} d^3r = l(l+1)\hbar^2 \int \psi^*_{nlm_l} \psi_{nlm_l} d^3r = l(l+1)\hbar^2 \quad (8.28)$$

En función de estos resultados, en 1922 Stern y Gerlach intentaron determinar las diferentes orientaciones del momento angular orbital L del electrón en un átomo respecto de un eje arbitrario z haciendo pasar dichos átomos por una región del espacio en presencia de un campo magnético no homogéneo. Entonces antes de describir el experimento en sí, hagamos un repaso de la física del electrón en un átomo hidrogenoide en presencia de un campo magnético externo.

El electrón girando alrededor del núcleo en una órbita permitida puede interpretarse como una corriente circular i dada por:

$$i = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r} \quad (8.29)$$

donde e es la carga del electrón, T el período, v la velocidad de traslación del electrón en la órbita permitida y r el radio de dicha órbita.

En Física II vimos que una espira de corriente i y área A tiene un momento dipolar magnético orbital μ_l cuyo módulo está dado por:

$$\mu_l = i A \quad (8.30)$$

El momento magnético asociado a la espira es un vector perpendicular al plano de la órbita que resulta antiparalelo al vector momento angular orbital L debido a la carga negativa del electrón. Explícitamente, μ_l tiene la forma:

$$\mu_l = i A = \frac{e v}{2 \pi r} \pi r^2 = \frac{e v r}{2} \quad (8.31)$$

Y si usamos la expresión del módulo del momento angular orbital L :

$$L = m v r \quad (8.32)$$

Podemos hacer el cociente entre μ_l y L obteniendo:

$$\frac{\mu_l}{L} = \frac{e v r}{2 m v r} = \frac{e}{2 m} \quad (8.33)$$

Obtuvimos entonces un cociente de constantes fundamentales. A esta expresión se la suele reescribir como:

$$\frac{\mu_l}{L} = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} \quad (8.34)$$

donde μ_b se lo conoce como magnetón de Bohr, el cual representa el momento magnético de un electrón girando en la primera órbita del átomo de hidrógeno y g_l es el factor g orbital. Los valores de estas cantidades son:

$$\mu_b = \frac{e \hbar}{2 m} = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{Am}^2 \quad (8.35)$$

$$g_l = 1$$

Resumiendo, podemos entonces establecer la siguiente relación vectorial:

$$\boldsymbol{\mu}_l = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} \mathbf{L} \quad (8.36)$$

Además, como L y L_z están cuantificados según las relaciones (8.25) y (8.26), entonces se pueden establecer las siguientes relaciones de cuantificación:

$$\begin{aligned} \mu_l &= \frac{g_l \mu_b}{\hbar} L = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} \sqrt{l(l+1)} \hbar = g_l \mu_b \sqrt{l(l+1)} \\ \mu_{l_z} &= -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} L_z = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} m_l \hbar = -g_l \mu_b m_l \end{aligned} \quad (8.37)$$

Ahora escribamos el torque τ al que es sometido un momento magnético μ_l en presencia de un campo magnético externo B :

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu}_l \times \mathbf{B} \quad (8.38)$$

Este torque tiende a orientar al momento dipolar magnético en la dirección del campo B . Asociado con este torque hay una energía potencial de orientación dada por:

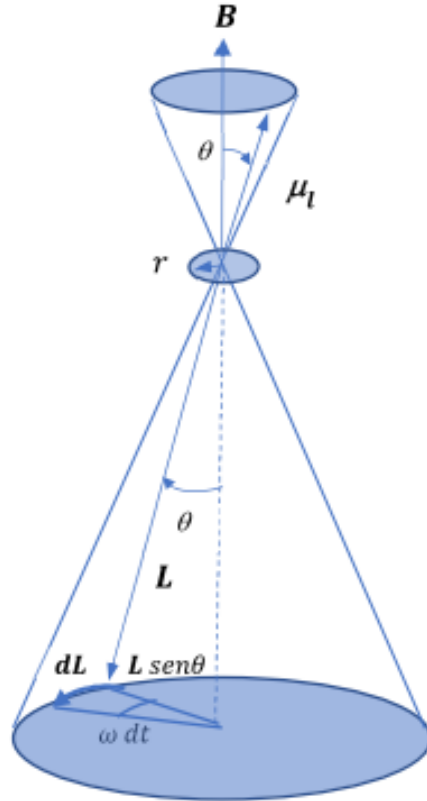
$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu}_l \cdot \mathbf{B} \quad (8.39)$$

Si el sistema no tiene forma de disipar esta energía, entonces μ_l precesará alrededor de la dirección de B permaneciendo constantes el ángulo entre dichos vectores. La frecuencia angular de giro se denomina frecuencia de Larmor y está dada por:

$$\omega = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} B \quad (8.40)$$

En la Fig. 8.2 se esquematiza la precesión de Larmor alrededor de B :

Figura 8.2



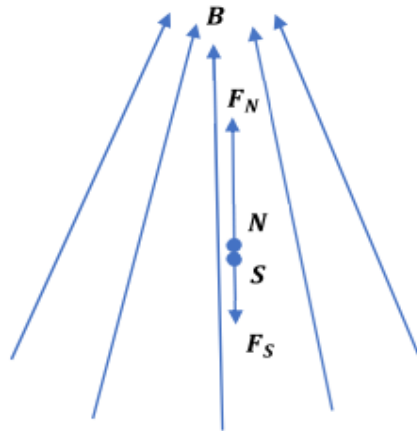
Nota. Esquema vectorial de la interacción entre el momento dipolar magnético orbital μ_l del electrón con el campo magnético externo B .

Y si además el campo B no es homogéneo, sino que tiene un gradiente diferente de cero, entonces el momento dipolar magnético experimentará una fuerza F_z proporcional al gradiente de B en la dirección del mismo que lo hará desplazarse en la dirección z :

$$F_z = \frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_{l_z} \quad (8.41)$$

En la Fig. 8.3 se esquematiza la fuerza que experimenta el momento dipolar magnético orbital cuando el campo posee un gradiente no nulo creciente en la dirección z . Se puede apreciar que el momento magnético experimenta una fuerza neta hacia arriba, es decir en la dirección en que crece el gradiente del campo externo.

Figura 8.3



Nota. Esquema de las fuerzas F_N y F_S que actúan sobre los polos magnéticos del momento dipolar magnético.

Experimento de Stern y Gerlach

En la Fig. 8.4 se esquematiza el dispositivo experimental utilizado por Stern y Gerlach en su experimento. El equipo consistía en un horno necesario para evaporar los átomos de plata, los cuales eran colimados por un colimador y posteriormente atravesaban la región de campo magnético B no homogéneo. Como se discutió anteriormente, se esperaba que la fuerza F_z desplace los momentos magnéticos en la dirección z debido a la dependencia momento dipolar magnético μ_{l_z} con el número azimutal m_l . De este modo, considerando los posibles valores que puede tomar m_l :

$$m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l \quad (8.42)$$

Se esperaba que el número de deflexiones del haz de átomos de plata en la dirección z sea impar. Además, el átomo de plata en estado aislado posee un solo electrón de valencia con $n = 5$ y $l = 0$ y por ende $m_l = 0$. Es decir que no se esperaba ninguna deflexión.

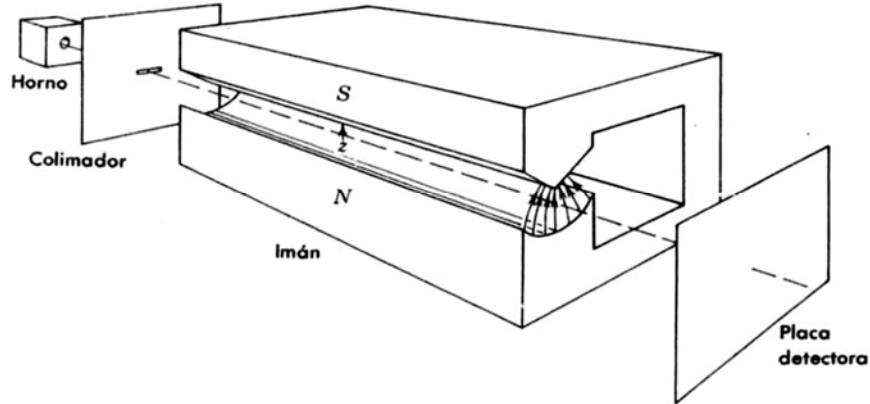
Sin embargo, se observaron dos deflexiones tal como se muestra en la Fig. 8.5.

Por lo tanto, no solo que no se observó lo predicho por la física clásica sino que tampoco se observó lo esperado según la teoría de Schrödinger, lo cual predecía un número impar de deflexiones. Es decir que lo observado debía ser descrito a partir de alguna propiedad física del electrón no conocida hasta ese momento. Este resultado fue interpretado a partir de suponer que el electrón poseía un momento angular intrínseco S definido como espín y, desde un punto de vista semiclassical, fue descrito como si el electrón girara sobre sí mismo. Analíticamente, se le asoció al momento intrínseco de espín del electrón, un número cuántico s y a su componente z un número cuántico m_s , en analogía al momento angular orbital y su componente z :

$$S_z = m_s \hbar$$

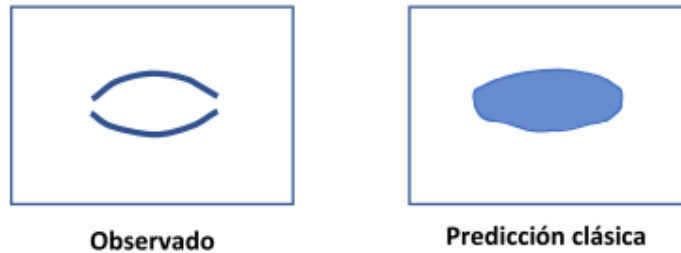
$$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar \quad (8.43)$$

Figura 8.4



Nota. Esquema del dispositivo experimental utilizado por Stern y Gerlach. Las flechas de B se concentran hacia arriba indicando el sentido creciente del gradiente de B.

Figura 8.5



Nota. Esquema del patrón observado por Stern y Gerlach y del patrón predicho por la física clásica.

Además, en analogía al momento dipolar magnético orbital se definió el momento dipolar magnético de espín y su componente z como:

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{g_s \mu_b}{\hbar} \mathbf{S} \Rightarrow \mu_s = \frac{g_s \mu_b}{\hbar} \sqrt{s(s+1)} \hbar = g_s \mu_b \sqrt{s(s+1)} \quad (8.44)$$

$$\mu_{S_z} = -\frac{g_s \mu_b}{\hbar} S_z = -\frac{g_s \mu_b}{\hbar} m_s \hbar = -g_s \mu_b m_s \quad (8.45)$$

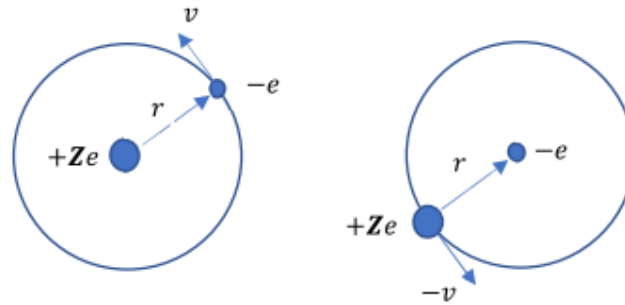
Y en función de los resultados obtenidos por Stern y Gerlach primero, y por Phipps y Taylor después, se determinaron los números cuánticos $s = 1/2$ y $m_s = \pm 1/2$. Y se midió un factor g de espín $g_s = 2$.

Interacción espín-órbita

Ahora estudiemos la interacción entre el momento magnético intrínseco de espín del electrón con el campo magnético interno de un átomo con un solo electrón. Como veremos a continuación, el momento magnético interno del átomo se relaciona con el momento angular orbital del electrón en el átomo, por lo que a esta relación se la denomina interacción espín-órbita.

Para estudiar la interacción espín-órbita en un átomo con un electrón, analicemos el movimiento del núcleo desde el sistema de referencia del electrón. En este sistema, el núcleo se mueve alrededor del electrón tal como se esquematiza en la Fig. 8.6:

Figura 8.6



Nota. Esquema del electrón-núcleo en un átomo hidrogenoide. (Izquierda) Vista desde el sistema de referencia del núcleo. (Derecha) Vista desde el sistema de referencia del electrón.

De este modo, el núcleo visto desde el sistema del electrón representa una carga Ze moviéndose con velocidad $-v$ alrededor del electrón lo que constituye un elemento de corriente j dado por:

$$\mathbf{j} = -Zev \quad (8.46)$$

Según la ley de Ampere, este elemento de corriente produce un campo magnético \mathbf{B} en la posición del electrón dado por:

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0 \mathbf{j} \times \mathbf{r}}{4\pi r^3} = -\frac{Ze\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3} \quad (8.47)$$

Ahora, si se considera el campo eléctrico \mathbf{E} producido por el núcleo y actuante sobre el electrón:

$$\mathbf{E} = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r^3} \quad (8.48)$$

Reemplazando la Ec. (8.48) en (8.47), el campo magnético \mathbf{B} toma la forma:

$$\mathbf{B} = -\epsilon_0\mu_0 \mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad (8.49)$$

Por lo tanto, este es el campo magnético \mathbf{B} experimentado por el electrón cuando se mueve con velocidad v alrededor del núcleo en presencia del campo eléctrico \mathbf{E} generado por el núcleo

en la posición del electrón. Esta relación tiene validez general y se deriva de consideraciones relativistas.

El momento magnético de espín del electrón puede tener diferentes orientaciones en presencia del campo magnético \mathbf{B} y, por ende, su energía potencial de orientación será diferente para cada posible orientación. Esta energía puede calcularse a partir de una expresión análoga a (8.39):

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} \quad (8.50)$$

La expresión anterior se puede escribir en términos del momento angular de espín \mathbf{S} utilizando la relación (8.23):

$$\Delta E = \frac{g_s \mu_b}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (8.51)$$

Cabe aclarar que esta energía ha sido evaluada en el sistema de referencia del electrón. Sin embargo, lo conveniente es medir esta energía en el sistema de referencia donde el núcleo atómico está en reposo. Al transformar las velocidades relativistas al sistema de referencia del núcleo, debido a la *precesión de Thomas*, la energía potencial calculada en el sistema del núcleo se reduce a la mitad respecto al cálculo en el sistema de referencia del electrón. Por lo tanto, la energía de interacción espín-órbita queda:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \frac{g_s \mu_b}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (8.52)$$

Ahora, veamos que es posible expresar la energía potencial de orientación Ec. (8.52) en términos del producto escalar entre el momento angular orbital y el momento angular de espín. Para esto, es conveniente utilizar la definición del campo eléctrico \mathbf{E} como la fuerza de interacción electrostática por unidad de carga eléctrica. Y como la fuerza es el gradiente de la energía potencial electrostática, entonces:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{e} \frac{dV(r)}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (8.53)$$

Reemplazando (8.53) en la expresión (8.49), se tiene:

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{ec^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{v} \times \mathbf{r} \quad (8.54)$$

Pero entonces podemos escribir \mathbf{B} en términos del momento angular orbital:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v} = -m\mathbf{v} \times \mathbf{r} \quad (8.55)$$

Reemplazando Ec. (8.55) en la expresión de \mathbf{B} :

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{emc^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{L} \quad (8.56)$$

Entonces, la energía de orientación magnética en función del momento angular orbital \mathbf{L} y del momento angular intrínseco \mathbf{S} toma la siguiente forma:

$$\Delta E = \frac{g_s \mu_b}{2.e.m.c^2 \hbar} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (8.57)$$

Y si evaluamos los valores de g_s y μ_b se obtiene:

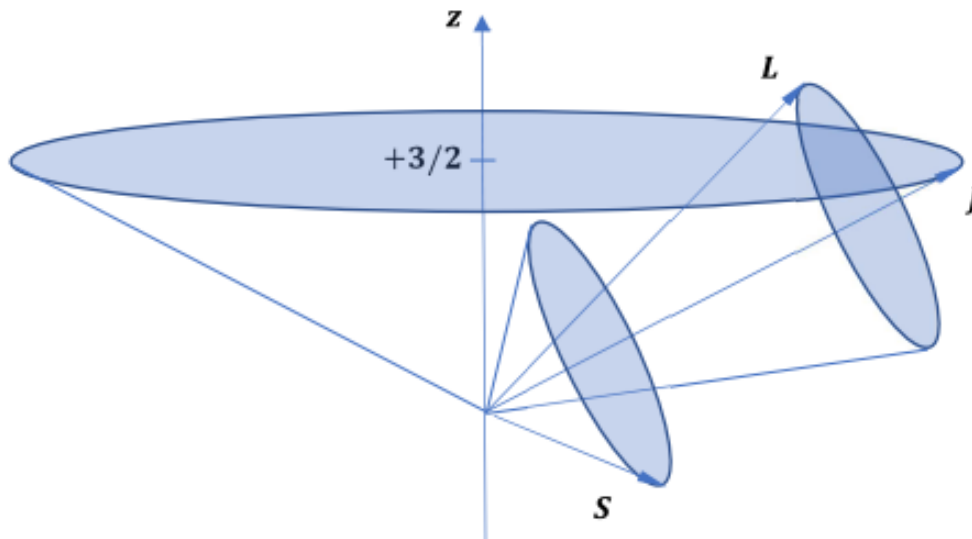
$$\Delta E = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (8.58)$$

Impulso angular total

Si no existiera la interacción espín-órbita, los vectores L y S del electrón en un átomo hidrogenoide serían independientes entre sí, es decir que de manera independiente cada uno de ellos cumpliría la ley de conservación del impulso angular. De este modo, si tuviésemos un átomo en el espacio sin interacción espín-órbita, los vectores L y S precesarían aleatoriamente alrededor del eje z de manera tal que sus componentes L_z, S_z deberían tener sus valores constantes dependientes de l, m_l, s y m_s , respectivamente.

Pero la naturaleza es diferente y la interacción espín-órbita es un hecho. Como vimos anteriormente, sobre el electrón actúa un campo magnético interno proporcional al momento angular orbital. Este campo magnético produce un impulso rotativo sobre el momento magnético de espín de orientación antiparalela al momento angular de espín S . Este impulso rotativo no cambia la magnitud ni de S ni de L pero provoca un acoplamiento entre ellos haciendo que el vector L y el vector S precesen alrededor de la suma de ambos vectores en lugar de hacerlo alrededor del eje z . Este movimiento de precesión acoplado se esquematiza en la Fig. 8.7:

Figura 8.7



Nota. Esquema de los vectores L y S precesando alrededor del vector J .

El movimiento acoplado parece complejo, por ello resulta útil describirlo en función del vector suma J definido como momento angular total:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (8.59)$$

De este modo, la ley de conservación del momento angular queda expresado en función del vector momento angular total J . Es decir, si no hay torques externos actuando sobre el átomo, el módulo de J y su componente J_z se mantienen constantes, mientras que sus componentes J_x, J_y promedian a cero. Del mismo modo que para los momentos L y S , la magnitud y la componente del momento angular total J cumplen las siguientes reglas de cuantificación en función de los números cuánticos j y m_j , respectivamente:

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad (8.60)$$

$$J_z = m_j\hbar \quad (8.61)$$

donde los valores posibles para m_j son $m_j = -j, -j+1, \dots, 0, \dots, j-1, j$.

Se pueden determinar los valores posibles de j en función de la componente z de J :

$$J_z = L_z + S_z \quad (8.62)$$

Por lo que m_j en función de m_l y m_s queda:

$$m_j = m_l + m_s \quad (8.63)$$

Como el máximo valor posible de m_l es l , y el de m_s es $1/2$, entonces el máximo valor posible de m_j es $l + 1/2$. También será el máximo valor posible de j , y como deben diferir en valores enteros, entonces, los valores posibles de j serán en orden decreciente:

$$j = l + 1/2, l - 1/2, l - 3/2, l - 5/2, \dots \quad (8.64)$$

Y para determinar dónde termina la serie, se deberá analizar la desigualdad vectorial:

$$|\mathbf{J}| = |\mathbf{L} + \mathbf{S}| \geq \left| |\mathbf{L}| - |\mathbf{S}| \right| \quad (8.65)$$

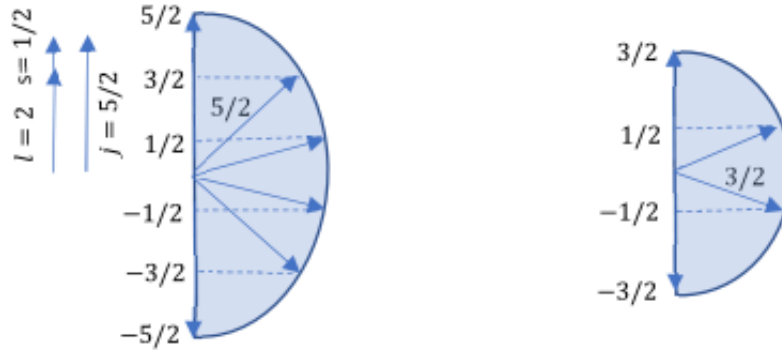
Si usamos explícitamente los números cuánticos asociados a J, L y S , se tiene:

$$\sqrt{j(j+1)}\hbar \geq \left| \sqrt{l(l+1)}\hbar - \sqrt{s(s+1)}\hbar \right| \quad (8.66)$$

Se puede demostrar que si l no es cero, hay dos posibles valores que j que satisfacen la desigualdad, $j = l + 1/2$ y $j = l - 1/2$. Mientras que para $l = 0$ la igualdad se da para $j = 1/2$.

En la Fig. 8.8 se esquematizan los posibles valores de j y m_j obtenidos a partir de los valores de l y s para el caso particular de $l = 2$ y $s = 1/2$. Se aprecia que j toma los valores $j = 3/2, 1/2$. Para el primer caso ($j=5/2$) las posibles orientaciones de J_z dan los valores de $m_j = 5/2, 3/2, 1/2, -1/2, -3/2, -5/2$; mientras que para $j = 3/2$ se tiene $m_j = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$.

Figura 8.8



Nota. Diagrama de los posibles valores de j y m_j (i.e. posibles orientaciones de J y J_z) obtenidos a partir de los números cuánticos $l = 2$ y $s = 1/2$

Finalmente, a partir del análisis cuántico-relativista del electrón en el átomo de hidrógeno, se demuestra que se debe corregir la energía obtenida a partir de resolver la ecuación de Schrödinger haciendo el análisis cuántico no relativista que antes dependía solo de n :

$$E_n = \frac{m e^4}{(4 \pi \epsilon_0)^2 2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = - \frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \quad (8.67)$$

Con el tratamiento relativista, la energía E ahora dependerá de n y de j según:

$$E_{n,l} = - \frac{m e^4}{(4 \pi \epsilon_0)^2 2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \left[1 + \frac{e^4}{(4 \pi \epsilon_0)^2 \hbar^2 c^2} \frac{1}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (8.68)$$

Definiendo el parámetro α como:

$$\alpha = \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 \hbar c} \cong \frac{1}{137} \quad (8.69)$$

La expresión (8.68) se puede reescribir como:

$$E_{n,j} = - \frac{m c^2 \alpha^2}{2} \frac{1}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (8.70)$$

donde $m c^2 \alpha^2 / 2 = 13,6 \text{ eV}$.

Mientras que para un átomo hidrogenoide de número atómico Z , la expresión (8.70) toma la forma:

$$E_{n,j} = - \frac{m c^2 \alpha^2 Z^2}{2} \frac{1}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (8.71)$$

Si bien el segundo término de la expresión (8.71) es del orden de α^2 veces el valor del primer término, no deja de ser una corrección al valor calculado desde la mecánica cuántica no relativista. Además, a partir de analizar el comportamiento de la expresión $E_{n,j}$ en función de j para un n fijo, se observa que a medida que j aumenta la energía también aumenta, es decir se hace menos negativa, y como j es proporcional a l , se aprecia la misma relación de proporcionalidad entre la energía y el número cuántico orbital l . Este comportamiento también se observa para átomos con más de un electrón, y adicionalmente, en los átomos multielectrónicos

el segundo término de la expresión (8.71) se hace comparable al primer término. Como veremos a continuación, este hecho tiene importancia en el llenado de las capas y subcapas atómicas.

Llenado de la Tabla Periódica

En este apartado vamos a analizar cómo se completa la Tabla Periódica. Para esto tenemos que definir un conjunto de principios y reglas, con los cuales se puede entender el llenado de la Tabla Periódica en función del crecimiento del número atómico Z . Estos principios y reglas son el principio de exclusión de Pauli, el principio de Aufbau de Bohr y Pauli, y las reglas de Hund.

En 1925, Wolfgang Ernst Pauli luego de estudiar en detalle los niveles de energía de los átomos, enunció su principio de exclusión, el cual puede enunciarse como sigue: “en un átomo multielectrónico, nunca podrán existir más de un electrón en el mismo estado cuántico”. En otras palabras, lo que establece el principio de exclusión de Pauli es que en un átomo no pueden coexistir dos o más electrones en el mismo nivel de energía con los mismos números cuánticos. Este principio es una ley de la naturaleza y explica entre otras cosas porque la materia es, en efecto, espacialmente vacía.

Debido a que los electrones en un átomo multielectrónico cumplen con el principio de exclusión de Pauli, resulta conveniente conocer cómo se disponen los electrones en un átomo con más de un electrón en su configuración más estable. De hecho, si pudiésemos predecir cómo se disponen los electrones en cada átomo a medida que aumenta el número atómico Z , podríamos comprender el orden de la Tabla Periódica como función de Z . De hecho, este orden puede explicarse a partir del principio de Aufbau.

El principio de *Aufbau* toma su nombre del alemán *Aufbauprinzip*, que significa “principio de construcción”. Fue formulado por Niels Bohr y Wolfgang Pauli a principios de la década de 1920. Esta fue una aplicación temprana de la mecánica cuántica a las propiedades de los electrones y explica las propiedades químicas en términos físicos. El principio establece que las capas y subcapas atómicas se llenan en el orden de energía creciente, utilizando dos reglas generales con las que se determina la configuración electrónica más estable de cada átomo. Estas dos reglas se pueden enunciar como sigue:

1. Los electrones se asignan a los orbitales en orden de valor creciente de $(n + l)$.
2. Para subcapas con el mismo valor de $(n + l)$, los electrones se asignan primero a la subcapa con n menor.

En la Fig. 8.9 se esquematiza el principio de Aufbau, mostrando el modo en que se llenan las subcapas atómicas n, l en función del aumento de energía del átomo. En esta figura se aprecia que las subcapas atómicas se empiezan a llenar en la subcapa $1s$ ($n = 1, l = 0$) y se completa con los dos elementos de la primera fila de la Tabla Periódica (Periodo N°1). Para la capa $n = 1$ no existe otro valor posible de l por lo que el llenado continúa en la capa $n = 2$.

En la capa $n = 2$ se llena primero la subcapa $2s$ antes que la $2p$ cumpliendo con la primera regla del principio de Aufbau. Al llenarse ambas subcapas, $2s$ y $2p$, completamos la segunda fila de la Tabla Periódica (Periodo N°2).

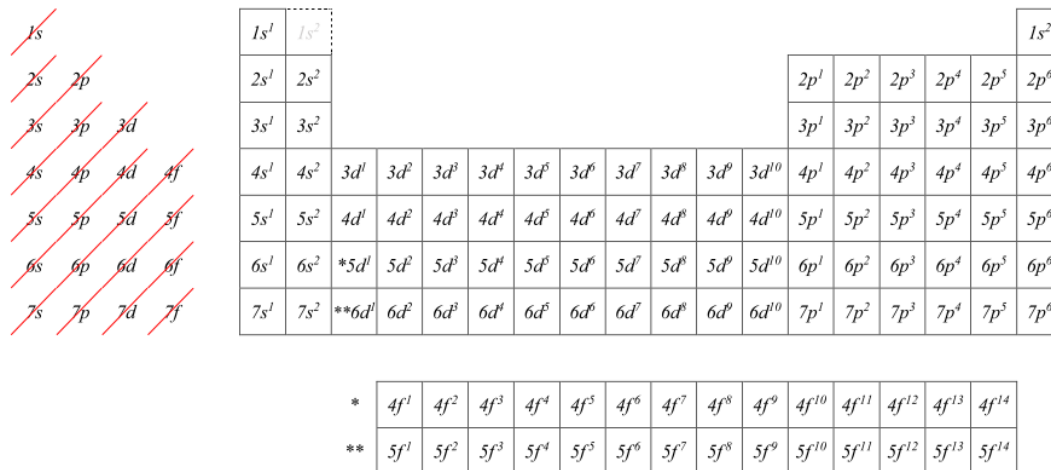
Ahora bien, como para $n = 2$, l solo puede tomar los valores $l = 0$ y $l = 1$, entonces el llenado continúa en la capa $n = 3$. En esta capa, primero se llena la capa $3s$, y luego la $3p$. De este modo, completamos la 3° fila de la Tabla Periódica (Periodo N°3).

Intuitivamente esperaríamos que se llene la subcapa $3d$, pero en el caso de $3d$, la suma $n + l = 5$ es mayor que la suma correspondiente a la subcapa $4s$ ($n + l = 4$) por lo que según la primera regla se llena primero la subcapa $4s$ antes que la $3d$, tal como se aprecia en la Figura N°8. Ahora, observemos las subcapas $3d$ y $4p$, en este caso ambas tienen la misma suma $n + l = 5$, entonces deberemos aplicar la segunda regla del principio de Aufbau que establece que, en el caso de igualdad en dicha suma, se llena subcapa con n menor, por lo que tal como se muestra en la Figura N°8, primero se llenará la subcapa $3d$ antes que la $4p$. Y al llenar la subcapa $4p$, se completa la 4° fila de la Tabla Periódica (Periodo N°4).

Posteriormente, se llena la subcapa $5s$ ($n = 5, l = 0$), continuando con la subcapa $4d$ ($n = 4, l = 2$) y completando la 5° fila de la tabla (Periodo N°5) con el llenado de la subcapa $5p$ ($n = 5, l = 1$). El análisis de la 5° fila es análogo al de la 4°.

Finalmente, para terminar el análisis del llenado de la Tabla Periódica a partir del principio de Aufbau, estudiemos las filas N°6 y N°7 (Periodos N°6 y N°7, respectivamente). Como el llenado en ambas filas es similar, veamos el caso de la 6° fila. El llenado comienza con la subcapa $6s$ ($n = 6, l = 0$). Ahora, la subcapa $4f$ ($n = 4, l = 3$) nos da una suma $n + l = 7$ igual a la suma de la subcapa $5d$ ($n = 5, l = 2$). Por lo que, por la 2° regla del principio de Aufbau, la subcapa que se llena primero es la que tiene menor n , es decir la subcapa $4f$. Posteriormente se llena la $5d$ y se completa la 6° fila con el llenado de la subcapa $6p$.

Figura 8.9



Nota. (Izquierda) Esquema del llenado de las subcapas n, l en función del aumento de energía. Las diagonales hacia abajo indican el sentido en que crece la energía del átomo. (Derecha) Esquema del llenado de la Tabla Periódica especificando los bloques s, p, d y f .

Y finalmente, para comprender como se completa cada subcapa de la Tabla Periódica, además del principio de exclusión de Pauli y del Principio de Aufbau de Bohr y Pauli, necesitamos definir las reglas de Hund.

Estas reglas fueron descubiertas por Friedrich Hund en 1925, y se las conoce como reglas de Hund. Tienen un uso importante en física atómica, espectroscopia y química cuántica, y a menudo se abrevian como una sola regla de Hund (precisamente la primera), ignorando las otras dos reglas de Hund. La primera regla de Hund, y la más conocida, se la puede enunciar como sigue: "Al llenar una subcapa atómica n, l los electrones se distribuyen cumpliendo el principio de exclusión con sus espines paralelos, llenando la subcapa con la multiplicidad mayor. La configuración atómica es más estable (es decir, tiene menos energía) cuantos más electrones desapareados (espines paralelos) posee".

A continuación, se enuncian las tres reglas de Hund las cuales se cumplen en orden descendente para establecer la configuración electrónica del átomo más estable:

1. Para una configuración electrónica dada, el término de menor energía es aquel que tenga el mayor espín total S .

2. Para un espín total dado, el término de más baja energía es aquel que tiene el número L más grande.

3. Para un término de espectroscopía dado, en un átomo teniendo su capa externa medio llena o menos, el nivel de menor energía será el que tenga el menor número J posible. En un átomo que tenga su capa externa más que medio llena, el nivel de menor energía es aquel que tenga el mayor número J posible.

En la Fig. 8.10 se esquematiza como es el llenado de los orbitales electrónicos para el caso de los átomos del grupo N°2 según las reglas de Hund. Se puede apreciar que en el caso del litio ($Z = 3$), sus dos electrones $1s$ tienen sus espines apareados (orientados antiparalelos entre si) cumpliendo el principio de exclusión, y el tercer electrón se encuentra en el único $2s$. En el átomo de berilio ($Z = 4$), el cuarto electrón se orienta antiparalelo completando la subcapa $2s$ y cumpliendo con el principio de exclusión de Pauli. En el caso del átomo de boro ($Z = 5$), el quinto electrón comienza a completar el primer orbital de la subcapa $2p$. En el átomo de carbono ($Z = 6$) el sexto electrón se ubica en el segundo orbital de la subcapa $2p$ y orientado paralelamente al espín del electrón del primer orbital $2p$ tal como lo predicen las reglas de Hund. En el átomo de nitrógeno ($Z = 7$), tal como lo establece Hund el séptimo electrón se ubica en el tercer orbital de la subcapa $2p$. En el átomo de oxígeno ($Z = 8$), el octavo electrón completa el primer orbital $2p$ y, tal como lo establece el principio de exclusión, se orienta antiparalelamente al electrón preexistente en dicho orbital. Análogamente, el noveno electrón del átomo flúor ($Z = 9$) completa el segundo orbital $2p$. Y finalmente, el tercer orbital $2p$ se completa con el décimo electrón del átomo de neón ($Z = 10$).

Como dijimos anteriormente, en los átomos neutros, el orden en el que se llenan las subcapas viene dado por la regla N°1 del principio de Aufbau, también conocida como Regla de Madelung.

Por ejemplo, según esta regla, la configuración electrónica del estado fundamental del titanio ($Z = 22$) utilizando la notación espectroscópica es: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$. Algunos autores escriben la configuración electrónica siempre en orden creciente de n , en el caso de Ti ($Z = 22$): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$. Para un átomo neutro dado, las dos notaciones son equivalentes ya que las subcapas más externas son energéticamente comparables y, por ende, tienen la misma relevancia física.

Figura 8.10

	<i>1s</i>	<i>2s</i>	<i>2p</i>			<i>Configuración</i>
Li	↑↓	↑				$1s^2 2s^1$
Be	↑↓	↑↓				$1s^2 2s^2$
B	↑↓	↑↓	↑			$1s^2 2s^2 2p^1$
C	↑↓	↑↓	↑	↑		$1s^2 2s^2 2p^2$
N	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	$1s^2 2s^2 2p^3$
O	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	$1s^2 2s^2 2p^4$
F	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	$1s^2 2s^2 2p^6$

Nota. Esquema del llenado de los orbitales electrónicos según lo establecido por las reglas de Hund.

Hay algunos elementos para los cuales la regla de Madelung predice una configuración electrónica que difiere de la determinada experimentalmente, a pesar de que las configuraciones electrónicas predichas por Madelung se aproximan bastante a las experimentales. Veamos las excepciones a la regla de Madelung en el bloque *d* de la Tabla Periódica tal como se puede apreciar en la Figura N°11.

En los elementos donde no se cumple esta regla, la subcapa *d* de valencia de estos átomos de los Periodos 4, 5 y 6 adquiere un electrón (en el caso del paladio dos electrones) a expensas de un electrón menos en la subcapa *s* de valencia. Para el caso del Periodo 4, esto sucede en el átomo Cr ($[Ar] 3d^5 4s^1$) y en el átomo Cu ($[Ar] 3d^{10} 4s^1$). Para el caso del Periodo 5, la excepción se da en el átomo Nb ($[Kr] 4d^4 5s^1$), en el átomo Mo ($[Kr] 4d^5 5s^1$), en el átomo Ru ($[Kr] 4d^7 5s^1$), en el átomo Rh ($[Kr] 4d^8 5s^1$), en el átomo Pd ($[Kr] 4d^{10}$) y en el átomo Ag ($[Kr] 4d^{10} 5s^1$). Y finalmente para el Periodo 6, la excepción se da en el átomo Pt ($[Xe] 4f^{14} 5d^9 6s^1$) y en el átomo Au ($[Xe] 4f^{14} 5d^{10} 6s^1$).

Y finalmente, veamos las excepciones a la regla de Madelung en el bloque f . En el Periodo 6 del bloque f , la subcapa $5d$ de valencia adquiere un electrón de la subcapa $4f$ en los elementos Ce, Gd y Tb. En el periodo 7 del bloque f , la subcapa $6d$ adquiere un electrón a expensas de un electrón menos en la subcapa $5f$ en los elementos Pa, U, Np y Cm. Y en el caso particular del elemento Th, la subcapa $6d$ adquiere dos electrones que provienen de la subcapa $5f$. Por ejemplo, en el uranio ($Z = 92$), de acuerdo con la regla de Madelung, la subcapa $5f$ ($n + l = 5 + 3 = 8$) está ocupada antes que la subcapa $6d$ ($n + l = 6 + 2 = 8$). Entonces, la regla predice la configuración electrónica $[Rn] 7s^2 5f^4$. Sin embargo, la configuración electrónica medida del átomo de uranio es $[Rn] 7s^2 5f^3 6d^1$.

Figura 8.11

H 1 $1s^1$																	He 2 $1s^2$
Li 3 $2s^1$	Be 4 $2s^2$											B 5 $2p^1$	C 6 $2p^2$	N 7 $2p^3$	O 8 $2p^4$	F 9 $2p^5$	Ne 10 $2p^6$
Na 11 $3s^1$	Mg 12 $3s^2$											Al 13 $3p^1$	Si 14 $3p^2$	P 15 $3p^3$	S 16 $3p^4$	Cl 17 $3p^5$	Ar 18 $3p^6$
K 19 $4s^1$	Ca 20 $4s^2$	Sc 21 $3d^1 4s^2$	Ti 22 $3d^2 4s^2$	V 23 $3d^3 4s^2$	Cr 24 $3d^5 4s^1$	Mn 25 $3d^5 4s^2$	Fe 26 $3d^6 4s^2$	Co 27 $3d^7 4s^2$	Ni 28 $3d^8 4s^2$	Cu 29 $3d^{10} 4s^1$	Zn 30 $3d^{10} 4s^2$	Ga 31 $4p^1$	Ge 32 $4p^2$	As 33 $4p^3$	Se 34 $4p^4$	Br 35 $4p^5$	Kr 36 $4p^6$
Rb 37 $5s^1$	Sr 38 $5s^2$	Y 39 $4d^1 5s^2$	Zr 40 $4d^2 5s^2$	Nb 41 $4d^4 5s^1$	Mo 42 $4d^5 5s^1$	Tc 43 $4d^5 5s^2$	Ru 44 $4d^7 5s^1$	Rh 45 $4d^8 5s^1$	Pd 46 $4d^{10}$	Ag 47 $4d^{10} 5s^1$	Cd 48 $4d^{10} 5s^2$	In 49 $5p^1$	Sn 50 $5p^2$	Sb 51 $5p^3$	Te 52 $5p^4$	I 53 $5p^5$	Xe 54 $5p^6$
Cs 55 $6s^1$	Ba 56 $6s^2$	57-71*	Hf 72 $5d^2 6s^2$	Ta 73 $5d^3 6s^2$	W 74 $5d^4 6s^2$	Re 75 $5d^5 6s^2$	Os 76 $5d^6 6s^2$	Ir 77 $5d^7 6s^2$	Pt 78 $5d^9 6s^1$	Au 79 $5d^{10} 6s^1$	Hg 80 $5d^{10} 6s^2$	Tl 81 $6p^1$	Pb 82 $6p^2$	Bi 83 $6p^3$	Po 84 $6p^4$	At 85 $6p^5$	Rn 86 $6p^6$
Fr 87 $7s^1$	Ra 88 $7s^2$	89-103**	Rf 104 $6d^2 7s^2$	Db 105 $6d^3 7s^2$	Sg 106 $6d^4 7s^2$	Bh 107 $6d^5 7s^2$	Hs 108 $6d^6 7s^2$	Mt 109 $6d^7 7s^2$	Ds 110 $6d^9 7s^1$	Rg 111 $6d^{10} 7s^1$	Cn 112 $6d^{10} 7s^2$	Nh 113 $7p^1$	Fl 114 $7p^2$	Mc 115 $7p^3$	Lv 116 $7p^4$	Ts 117 $7p^5$	Og 118 $7p^6$
			* La 57 $5d^1 6s^2$	Ce 58 $5d^1 4f^1 6s^2$	Pr 59 $4f^3 6s^2$	Nd 60 $4f^4 6s^2$	Pm 61 $4f^5 6s^2$	Sm 62 $4f^6 6s^2$	Eu 63 $4f^7 6s^2$	Gd 64 $5d^1 4f^6 6s^2$	Tb 65 $5d^1 4f^6 6s^2$	Dy 66 $4f^{10} 6s^2$	Ho 67 $4f^{11} 6s^2$	Er 68 $4f^{12} 6s^2$	Tm 69 $4f^{13} 6s^2$	Yb 70 $4f^{14} 6s^2$	Lu 71 $5d^1 4f^6 6s^2$
			** Ac 89 $6d^1 7s^2$	Th 90 $6d^2 7s^2$	Pa 91 $5f^2 6d^1 7s^2$	U 92 $5f^3 6d^1 7s^2$	Np 93 $5f^4 6d^1 7s^2$	Pu 94 $5f^6 6d^1 7s^2$	Am 95 $5f^7 6d^1 7s^2$	Cm 96 $5f^10 6d^1 7s^2$	Bk 97 $5f^10 6d^1 7s^2$	Cf 98 $5f^{14} 6d^1 7s^2$	Es 99 $5f^{14} 6d^1 7s^2$	Fm 100 $5f^{14} 6d^1 7s^2$	Md 101 $5f^{13} 6d^1 7s^2$	No 101 $5f^{14} 6d^1 7s^2$	Lr 102 $5f^{14} 7s^2$

Nota. Tabla Periódica con las configuraciones electrónicas de cada átomo.

Problemas resueltos

Problema 1: Considerando la expresión de la energía $E_{n,l}$ predicha por la mecánica cuántica relativista para el electrón en el átomo de hidrógeno demuestre que para un número n fijo, $E_{n,l}$ aumenta a medida que aumenta el número cuántico orbital l .

$$E_{n,l} = -\frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \left[1 + \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 c^2} \frac{1}{n} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

Definiendo el parámetro $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \cong \frac{1}{137}$, la expresión de $E_{n,l}$ toma la forma:

$$E_{n,l} = -\frac{mc^2\alpha^2}{2} \frac{1}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

Solución:

Para ver que $E_{n,l}$ aumenta con l , en la siguiente tabla calculamos E_n y $E_{n,l}$ para diferentes valores de l , manteniendo n fijo, se puede apreciar que a medida que l crece, si bien $E_{n,l}$ cambia en el 3° o 4° decimal pero igualmente se hace menos negativo:

n	l	E_n (eV)	$E_{n,l}$ (eV)
1	0	-13.636	-13.637
2	0	-3.409	-3.4091
	1	-3.409	-3.4090
3	0	-1.515	-1.51507
	1	-1.515	-1.51502
	2	-1.515	-1.51501
4	0
	1
	2
	3

Finalmente, para comprobar analíticamente la dependencia, calculemos la derivada de $E_{n,l}$ respecto de l :

$$E_{n,l} = -\frac{mc^2\alpha^2}{2} \frac{1}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

$$\frac{\partial E_{n,l}}{\partial l} = -\frac{mc^2\alpha^2}{2} \frac{1}{n^2} \left[\frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{-1}{(l+1/2)^2} \right) \right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial E_{n,l}}{\partial l} = \frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \frac{1}{(l+1/2)^2} > 0 \quad \forall l.$$

Por lo tanto, $E_{n,l}$ es una función creciente con el número cuántico l .

Problema 2: Considerando el orden del llenado de las subcapas atómicas, escriba la configuración electrónica en notación espectroscópica de los siguientes átomos de gases nobles: He, Ne, Ar, Kr, Xe.

Solución:

Ahora escribamos las configuraciones electrónicas de He, Ne, Ar, Kr, Xe:

[He]: $1s^2$.

[Ne]: $1s^2 2s^2 2p^6$.

[Ar]: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$.

[Kr]: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$.

[Xe]: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6$.

Problema 3: Considerando los números cuánticos obtenidos en la solución de Schrödinger del electrón del átomo de Hidrógeno:

(a) Muestre que el número cuántico m_l está relacionado con el operador de la componente z del momento angular orbital L_z . Diga cuál es el valor de L_z cuando actúa matemáticamente en la función de onda. Sugerencia: utilice la ecuación (8.9) y la expresión del operador L_z en coordenadas esféricas operando en la función de onda $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$:

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \Theta_{lm_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\phi)$$

$$L_z \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = -i\hbar \frac{\partial \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)}{\partial \phi}$$

(b) Muestre que el número cuántico l está relacionado con el operador módulo momento angular orbital L . Diga cuál es el valor de L^2 cuando actúa matemáticamente en la función de onda. Sugerencia: utilice la ecuación (8.12) y la expresión del operador L en coordenadas esféricas operando en la función de onda $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$:

$$L^2 \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$$

Solución:

(a) Recordemos que usando separación de variables, La función de onda se puede escribir como $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \Theta_{lm_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\phi)$ y si usamos la forma explícita de $\Phi(\phi) = e^{im_l\phi}$:

$$L_z \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = -i\hbar \frac{\partial \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)}{\partial \phi} = -i\hbar \frac{\partial R_{nl}(r) \Theta_{lm_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\phi)}{\partial \phi} = -i\hbar R_{nl}(r) \Theta_{lm_l}(\theta) \frac{d\Phi_{m_l}(\phi)}{d\phi}$$

$$=$$

$$= -i^2 m_l \hbar R_{nl}(r) \Theta_{lm_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\phi) = m_l \hbar \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) \Rightarrow L_z \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = m_l \hbar \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$$

Y calculando el valor de expectación tenemos:

$$\bar{L}_z = \int \psi^*_{nlm_l} \hat{L}_z \psi_{nlm_l} dV = m_l \hbar \int \psi^*_{nlm_l} \psi_{nlm_l} dV = m_l \hbar$$

b) Nuevamente usando separación de variables en la función de onda y $\Phi(\phi) = e^{im_l\phi}$, tenemos:

$$\frac{L^2}{-\hbar^2} \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) =$$

$$= \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial R_{nl}(r) \Theta_{lm_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 R_{nl}(r) \Theta_{lm_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\phi)}{\partial \phi^2} =$$

$$= \frac{R_{nl}(r) \Phi_{m_l}(\phi)}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta_{lm_l}(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{R_{nl}(r) \Theta_{lm_l}(\theta)}{\sin^2\theta} \frac{d^2 \Phi_{m_l}(\phi)}{d\phi^2} =$$

$$= R_{nl}(r) \Phi_{m_l}(\phi) \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta_{lm_l}(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{(-m_l^2)}{\sin^2\theta} \Theta_{lm_l}(\theta) \right] = -l(l+1) R_{nl}(r) \Theta_{lm_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\phi)$$

$$\therefore L^2 \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = l(l+1) \hbar^2 \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$$

donde hemos usado como hipótesis la expresión (8.12) para reemplazar el corchete dependiente de $\Theta(\theta)$:

$$-\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} \Theta = l(l+1)\Theta$$

Y si ahora calculamos el valor de expectación de L^2 , tenemos:

$$\bar{L}^2 = \int \psi^*_{nlm_l} \hat{L}^2 \psi_{nlm_l} d^3r = l(l+1)\hbar^2 \int \psi^*_{nlm_l} \psi_{nlm_l} d^3r = l(l+1)\hbar^2$$

Problema 4: Suponiendo que se utilizan átomos de potasio en forma gaseosa para hacer el experimento de Stern y Gerlach. Diga cuál es el resultado observado luego de que los átomos atraviesan la región con el campo magnético no homogéneo. Justifique su elección.

I) II) III) IV) Ninguna de las anteriores.



Solución:

Recordemos que el átomo de potasio tiene 19 protones en su núcleo y 19 electrones orbitando alrededor de este. Ahora veamos cuales son las capas y subcapas ocupadas:

1° capa ($n=1$): 2 electrones

Números cuánticos posibles: $n = 1; l = 0; m_l = 0; m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

2° capa ($n=2$): 8 electrones

Números cuánticos posibles con $l=0$: $n = 2; l = 0; m_l = 0; m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ (2 electrones)

Números cuánticos posibles con $l=1$: $n = 2; l = 1; m_l = -1, 0, 1; m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ (6 electrones)

3° capa ($n=3$): 8 electrones (se llenan las subcapas $n=3, l=0$ y $l=1$)

Números cuánticos posibles con $l=0$: $n = 3; l = 0; m_l = 0; m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ (2 electrones)

Números cuánticos posibles con $l=1$: $n = 3; l = 1; m_l = -1, 0, 1; m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ (6 electrones)

4° capa ($n=4$): 1 electrón (la subcapa $n=4, l=0$ tiene menos energía que la subcapa $n=3, l=2$, por lo que se llena antes)

Números cuánticos posibles con $l=0$: $n = 4; l = 0; m_l = 0; m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

Es decir, el átomo de potasio tiene las capas internas completas y un solo electrón en la última capa. Por lo que en el experimento de Stern y Gerlach, el átomo de potasio interactuará con el campo externo a partir de dicho electrón. Por lo que se observarán dos líneas debido a las dos orientaciones posibles del espín del electrón ($m_s = +1/2$ o $m_s = -1/2$). Por lo tanto, el resultado observado corresponde al esquema (I).

Problema 5: a) Supongamos que el electrón se encuentra en el estado $2p$ del átomo de hidrógeno. Determine la energía del electrón en este estado suponiendo la corrección debido a la interacción espín-órbita:

$$E_{n,l} = -\frac{mc^2\alpha^2}{2} \frac{1}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (8-1)$$

donde $mc^2\alpha^2/2 = 13,6 \text{ eV}$ y $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \cong \frac{1}{137}$.

b) Si ahora el electrón desciende al nivel $2s$, determine cuanto ha disminuido la energía del sistema.

c) suponiendo que, en esta transición, el átomo emite un fotón ¿es posible que Lyman, Balmer o Paschen hayan medido dicho fotón? Justifique.

Solución:

a) El estado $2p$ corresponde a $n=2$ y $l=1$, entonces:

$$E_{2,1} = -\frac{mc^2\alpha^2}{2} \frac{1}{2^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{2} \left(\frac{1}{1+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4.2} \right) \right] = -3,4090 \text{ eV}$$

b) El estado estado $2s$ corresponde a $n=2$ y $l=0$, de este modo:

$$E_{2,0} = -\frac{mc^2\alpha^2}{2} \frac{1}{2^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{2} \left(\frac{1}{0+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4.2} \right) \right] = -3,4091 \text{ eV}$$

La disminución de energía será:

$$\Delta E = E_{2,1} - E_{2,0} = -\frac{mc^2\alpha^2}{2} \frac{1}{2^2} \frac{\alpha^2}{2} \left[\left(\frac{1}{1+\frac{1}{2}} \right) - \left(\frac{1}{0+\frac{1}{2}} \right) \right] = 0,0001 \text{ eV}$$

c) Para ver si Lyman, Balmer o Paschen hubiesen medido dicho fotón, calculemos la longitud de onda asociada:

$$\Delta E = E_{2,1} - E_{2,0} = 0,0001 \text{ eV} \Rightarrow \lambda = \frac{h \cdot c}{\Delta E} = 0,01 \text{ m}$$

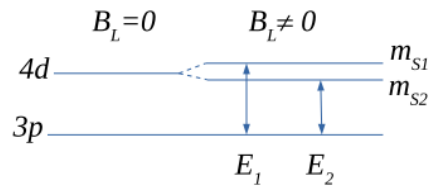
Por lo tanto, como el fotón emitido no está ni en el espectro UV, ni en el espectro visible ni en el Infrarrojo, entonces los espectroscopistas citados nunca podrían haber observado este fotón.

Problema 6: Si se considera la interacción relativista entre el momento intrínseco de espín del electrón y su momento orbital atómico, entonces si un electrón con momento magnético μ_S interactúa con el campo magnético B_L (relacionado con el momento angular orbital L del electrón), experimentará un cambio en su estado de energía dada por $E_B = -\mu_S \cdot B_L = -\mu_{S_z} B_L$, como consecuencia de la orientación del momento magnético intrínseco del electrón en la dirección de B_L . De este modo, el sistema campo-electrón puede encontrarse en un estado de energía inferior con la componente z de su momento magnético en el lado opuesto del campo asociado a L , o en un estado de energía superior con la componente z del momento magnético en dirección del campo asociado a L . La diferencia en energía entre los dos estados es $\Delta E_{B_L} = 2\mu_B B_L$, donde μ_B es el magnetón de Bohr.

Por otro lado, al examinar las líneas de emisión atómicas con alta resolución, resulta que muchas de las líneas espectrales son dobletes (ver Figura). Un ejemplo conocido son las dos líneas amarillas que aparecen en el espectro del sodio, con longitudes de onda de $\lambda_1 = 568,263 \text{ nm}$ y $\lambda_2 = 568,819 \text{ nm}$.

Goudsmit y Uhlenbeck explicaron su existencia en el año de 1925, al postular que el electrón tiene una cantidad de movimiento angular de espín intrínseco. Cuando el átomo de sodio es excitado con su electrón exterior en el estado $4d$, el movimiento orbital de este electrón crea un

campo magnético B_L . La energía del átomo varía en cierta medida, dependiendo de si el electrón tiene un espín hacia arriba o hacia abajo en este campo. Después, la energía del fotón que radia el átomo cuando vuelve al estado $3p$ depende de la energía del estado excitado (ver figura).



a) Calcule la magnitud del campo magnético interno B_L , teniendo en cuenta este acoplamiento de espín-órbita.

b) Determine el conjunto de números cuánticos n , l y m_s (omite el número m_l) de cada uno de los dos estados cuánticos del electrón $4d$ del átomo de sodio que da lugar a las dos emisiones citadas. Diga cuál de estos dos estados es de mayor energía y cuál de menor energía.

Solución:

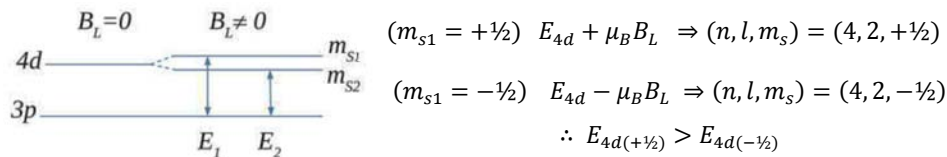
$$a) E_1 = \frac{hc}{\lambda_1}; E_2 = \frac{hc}{\lambda_2} \Rightarrow \Delta E = E_1 - E_2 = \frac{hc}{\lambda_1} - \frac{hc}{\lambda_2} \approx 3,34 \cdot 10^{-22} J \sim 0,0021 eV$$

$$\Delta E = 2\mu_B B_L = 2 \frac{e\hbar}{2m} B_L \Rightarrow B_L = \frac{\Delta E}{2\mu_B} = \frac{m}{e\hbar} \Delta E = 18,12 T$$

$$b) 4d \rightarrow n = 4, l = 2 \text{ y } m_s = \mp \frac{1}{2}$$

$$E_{4d}(B_L \neq 0) = E_{4d}(B_L = 0) + E_{B_L}(m_s)$$

$$\text{Con } E_{B_L}(m_s) = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_L = -\mu_{s_z} B_L = 2\mu_B B_L m_s$$



Problemas propuestos

Problema 1: Un conjunto de átomos de hidrógeno en estado fundamental absorbe un haz de luz monocromático de tal forma que se observan 10 longitudes de onda diferentes cuando el hidrógeno decae de vuelta al estado fundamental. a) Establezca el número cuántico principal n del nivel superior. Muestre en un esquema de cuantas maneras posibles puede decaer el electrón desde este nivel superior al nivel fundamental ¿Cuál es la longitud de onda del haz incidente? b) Escriba todos los conjuntos posibles de números cuánticos que puede tener el electrón en el átomo de hidrógeno si este se encuentra en el nivel $n=4$ ¿Cuál es la degeneración de la capa $n=4$? c) ¿Cuál es la longitud de onda más larga en el espectro de emisión de estos átomos? ¿A qué porción del espectro electromagnético y a qué serie pertenece?

Problema 2: a) Un átomo de hidrógeno está en su quinto estado excitado, cuyo número cuántico principal es 6. El átomo emite un fotón con una longitud de onda de 1090 nm. Determine la cantidad de movimiento angular orbital máxima posible del átomo después de la emisión. b) El mesón ρ^- tiene una carga de e , un número cuántico de espín igual a 1, y una masa 1507 veces mayor que la del electrón. Los valores posibles para su número cuántico magnético del espín son 1, 0 y -1. Imagine que los electrones en los átomos fueran reemplazados con mesones ρ^- . Haga una lista de los posibles conjuntos de números cuánticos para mesones ρ^- en la subcapa $3d$ y calcule la degeneración de dicha subcapa. c) Calcule la energía del mesón ρ^- en el estado fundamental del átomo de hidrógeno.

Problema 3: Considere el electrón en el átomo de hidrógeno en una capa n arbitraria con número cuántico orbital $l = 2$. Calcule la magnitud de L , los valores permitidos de L_z , y los correspondientes ángulos θ que L forma con el eje z .

Problema 4: La función de onda radial para un electrón en el estado $2p$ del hidrógeno es igual a:

$$\psi_{2p}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$$

a) ¿Existe algún valor de r distinto de $r=0$ o bien $r \rightarrow \infty$ para el cuál la probabilidad $P_{2p}(r) dr = |\psi_{2p}(r)|^2 4\pi r^2 dr$ es igual a cero?

b) Para un átomo de hidrógeno en el estado $2p$, ¿para qué valor de r es máxima $P_{2p}(r)$? Compare su resultado con $4a$, la distancia entre el electrón y el núcleo en el estado $n=2$ del modelo de Bohr.

Problema 5: El estado $n=1$ del electrón en el átomo de hidrógeno es esféricamente simétrico. a) Demuestre que la función de onda $1s$ para un electrón en el hidrógeno satisface la ecuación de Schrödinger.

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

b) Para un átomo de hidrógeno en el estado $1s$, ¿para qué valor de r es máxima $P_{1s}(r) = |\psi_{1s}(r)|^2 4\pi r^2 dr$? Compare su resultado con a_0 , la distancia entre el electrón y el núcleo en el estado $n=1$ del modelo de Bohr.

CAPÍTULO 9

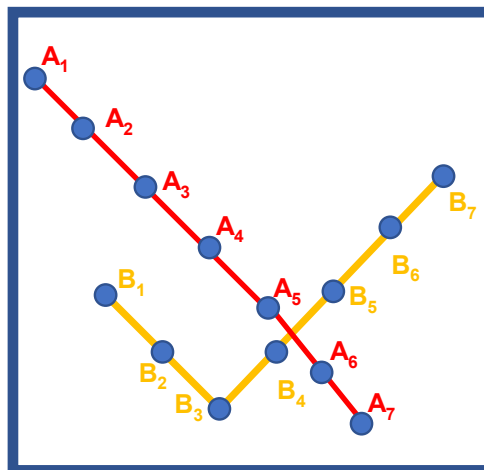
Estadísticas cuánticas

Partículas idénticas

Introducción

En la Mecánica Clásica se puede siempre identificar una dada partícula y seguirla en su movimiento, dado que mientras no la perdamos de vista, conserva su identidad y la podemos distinguir de las demás partículas, aunque éstas sean idénticas a ella. Para visualizar esta situación vamos a imaginar que se tiene una caja bidimensional dentro de la cual hay dos partículas idénticas A y B en movimiento, como se muestra en la Figura 9.1. Si se realiza un video, se pueden conocer ambas trayectorias registrando la evolución con el tiempo de las posiciones de cada partícula a partir de la secuencia de fotogramas del video.

Figura 9.1



Nota. Secuencia según la física clásica de dos partículas (A_i y B_i donde el subíndice indica los sucesivos fotogramas del video) moviéndose en una caja bidimensional.

Mientras en la física clásica es posible identificar cada partícula y seguir su evolución individual en cada instante, en física cuántica la identificación de la partícula no es posible debido al principio de incerteza de Heisenberg. La descripción cuántica a partir del principio de incerteza implica que en lugar de tener dos partículas con trayectorias y cantidades de movimiento

definidas como ocurre clásicamente, ahora tendremos una función de onda que es solución de la ecuación de Schrödinger del sistema de dos partículas. En un sistema físico cuántico formado por dos partículas idénticas con funciones de onda que se superponen, al observar una de las partículas no podemos determinar de cuál de ellas se trata. Es decir, no hay un experimento que permita distinguir una partícula de la otra. Por otra parte, no cambian sus propiedades ni su posterior evolución si intercambiamos los roles de ambas partículas en el sistema. Esto es lo que se conoce como indistinguibilidad.

Los efectos de la indistinguibilidad se ponen de manifiesto solamente cuando las funciones de onda de las dos partículas se solapan (Figura 9.2 b). Si no hay solapamiento las partículas se comportan como si fueran distinguibles (Figura 9.2 a).

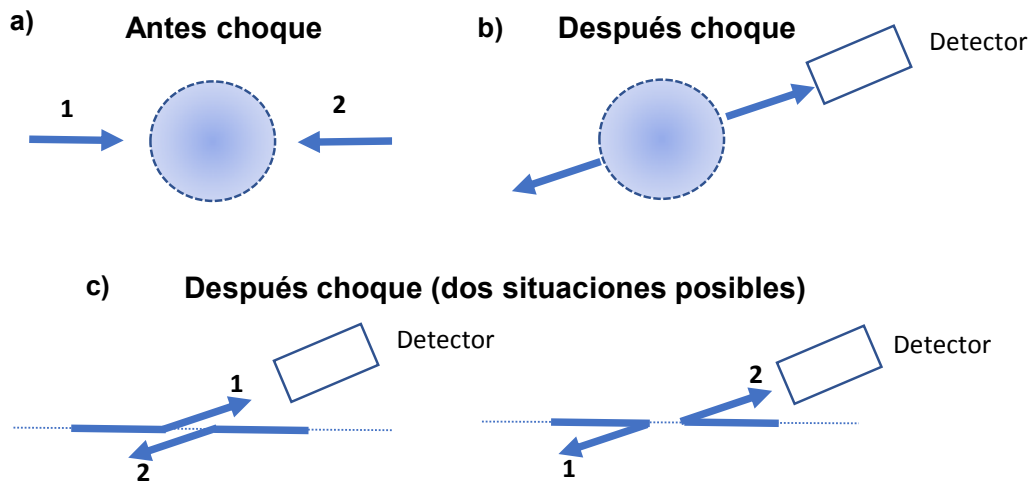
Figura 9.2



Nota. Funciones de onda de dos partículas que: (a) no se solapan y (b) se solapan.

Para poner en claro las ideas anteriores, pensemos en un sistema cuántico formado por dos partículas idénticas acercándose a un dado punto del espacio. En estas condiciones, podemos rotular ambas partículas para identificarlas, por ejemplo, asignándole a la partícula que se aproxima desde la izquierda el número “1” y a la que se aproxima desde la derecha el número “2” (Fig. 9.3 a). En estas condiciones iniciales sus funciones de onda no se hallan solapadas en ningún lugar. Supongamos que, luego de cierto tiempo, estas partículas chocan elásticamente entre sí. Analicemos qué ocurre con las funciones de onda durante el choque. A medida que las partículas se acercan, la superposición de ambas funciones de onda es cada vez mayor hasta que en el instante de la colisión la superposición es máxima. Luego del choque las partículas se alejan del CM del sistema en una dada dirección y con sentidos opuestos. Con el paso del tiempo, la superposición de sus funciones de onda es cada vez menor hasta que desaparece cuando se hallan muy distantes entre sí. La región del espacio donde sus funciones de onda se superponen es la región de probabilidad no nula de detectar a ambas partículas. En la figura de abajo, representamos a esta región con una esfera centrada en el CM (Fig. 9.3 a). Finalmente, consideremos que ubicamos un detector y logramos registrar a una de las partículas que ha colisionado. Dado que el impulso lineal se conserva antes y después del choque, la otra partícula se alejará del detector con dirección opuesta (Fig. 3 b). Hay dos situaciones posibles compatibles con la detección de una de las partículas, que hallamos detectado a la partícula “1” o a la partícula “2” (Fig. 9.3 c). El detector solo nos permite conocer que en esa dirección se ha detectado a una de las partículas, pero no podemos determinar de cuál de ellas se trata.

Figura 9.3



Nota. Choque entre dos partículas idénticas

Indistinguibilidad de partículas idénticas

La indistinguibilidad de las partículas idénticas inherente a la descripción cuántica del sistema tiene consecuencias muy importantes que analizaremos en detalle en este capítulo. Si tenemos partículas indistinguibles, la densidad de probabilidad calculada a partir de la función de onda del sistema no deberá distinguir en qué estado se encuentra cada partícula de modo de respetar su indistinguibilidad. Por lo tanto, en la situación analizada la densidad de probabilidad del sistema no puede cambiar si se intercambian las dos partículas dado que no se puede distinguir en qué estado final se encuentra cada una (Figura 9.3 c). Esto trae aparejada una dificultad adicional para calcular la probabilidad de una determinada medición, ya que necesitamos conocer el estado final del sistema y no podemos distinguir entre uno y otro. En este punto nos debemos preguntar cómo calculamos la probabilidad.

Inicialmente, analizaremos si la densidad de probabilidad asociada a la función de onda de dos partículas tal como se escribe en física clásica permite describir sistemas de partículas indistinguibles. Para responder a esta pregunta, primero escribamos la ecuación de Schrödinger del problema planteado:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi_T}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi_T}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \psi_T}{\partial z_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi_T}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi_T}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2 \psi_T}{\partial z_2^2} \right) + V_T \psi_T = E_T \psi_T \quad (9.1)$$

donde m es la masa de cada partícula, ψ_T es la función de onda total, V_T es la energía potencial del sistema, E_T es la energía total del sistema; x_1 , y_1 y z_1 las coordenadas de la partícula 1; x_2 , y_2 y z_2 las coordenadas de la partícula 2. El primer término del primer miembro de la Ec. (9.1) corresponden a la energía cinética de la partícula 1 mientras el segundo corresponde a la partícula 2. Debemos notar que, si bien las partículas son indistinguibles, necesariamente

debemos rotular las coordenadas de cada partícula, de lo contrario todas las partículas estarían en la misma posición x, y, z lo cual no tiene sentido físico.

Si suponemos que las partículas 1 y 2 son no interactuantes entre sí, la energía potencial total será la suma de las energías potenciales individuales:

$$V_T(x_1, \dots, z_2) = V(x_1, y_1, z_1) + V(x_2, y_2, z_2) \quad (9.2)$$

es decir, no hay términos que dependan de las dos coordenadas. Siempre que el potencial cumpla las condiciones anteriores (es decir sea una suma de términos en cada coordenada) podremos escribir la ecuación de Schrödinger del siguiente modo:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial z_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial z_2^2} \right) + V_1(x_1, y_1, z_1) \Psi_T \\ + V_2(x_2, y_2, z_2) \Psi_T = E_T \Psi_T \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial z_1^2} \right) + V_1(x_1, y_1, z_1) \Psi_T - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial z_2^2} \right) \\ + V_2(x_2, y_2, z_2) \Psi_T = E_T \Psi_T \end{aligned}$$

es decir, los casos son separables y la función de onda solución de la ecuación de Schrödinger será el producto de las funciones de onda individuales de cada partícula:

$$\psi_T(x_1, \dots, z_2) = \psi(x_1, y_1, z_1) \psi(x_2, y_2, z_2) \quad (9.3)$$

Vamos a suponer que estamos describiendo electrones en un átomo, entonces para cada electrón existirán cuatro números cuánticos: el número cuántico principal n , el número cuántico asociado al impulso angular orbital l , el número cuántico azimutal m_l y el número cuántico de espín m_s . Para simplificar la notación, cada conjunto de números cuánticos asociado a un electrón se identificará con una sola letra, en nuestro caso para el primer electrón y para el segundo electrón. Además, para simplificar la notación, en lugar de identificar las coordenadas como x_1, y_2, z_1 o x_2, y_2, z_2 utilizaremos el número asociado al electrón es decir 1 y 2, respectivamente. Por lo tanto, si queremos describir al electrón 1 en el estado α y al electrón 2 en el estado β , las funciones de onda individuales las anotaremos como $\psi_\alpha(1)$ y $\psi_\beta(2)$, respectivamente.

La función de onda total que describe al electrón 1 en α y al electrón 2 en β esta dada por:

$$\psi_T(x_1, \dots, z_2) = \psi_\alpha(1) \psi_\beta(2) \quad (9.4)$$

y la correspondiente densidad de probabilidad está dada por:

$$\psi_T^* \psi_T = \psi_\alpha^*(1) \psi_\beta^*(2) \psi_\alpha(1) \psi_\beta(2) \quad (9.5)$$

Por otra parte, la función de onda total que describe al electrón 1 en β y al electrón 2 en α se expresa como:

$$\psi_T(x_1, \dots, z_2) = \psi_\beta(1) \psi_\alpha(2) \quad (9.6)$$

y la densidad de probabilidad es:

$$\psi_T^* \psi_T = \psi_\beta^*(1)\psi_\alpha^*(2)\psi_\beta(1)\psi_\alpha(2) \quad (9.7)$$

Como se puede apreciar, explícitamente la expresión (9.5) representa a la partícula 1 en el estado α y a la partícula 2 en el estado β mientras que la expresión (9.7) describe a la partícula 1 en β y la partícula 2 en α . Es decir, las expresiones (9.5) y (9.7) permiten determinar en qué estado se encuentra cada partícula en cada una de las dos configuraciones.

Como mencionamos la indistinguibilidad de las partículas inherente a la descripción cuántica de un sistema de partículas idénticas trae aparejada la condición que no es posible distinguir la densidad de probabilidad entre las dos situaciones mencionadas. Es decir, si las partículas son indistinguibles una permutación de los parámetros asociados a cada una de las partículas debería ser irrelevante. Por lo tanto, la función de onda total descrita por las Ecs. (9.5) y (9.7) no describe partículas indistinguibles. Entonces, deberemos redefinir la forma de la función de onda total para que describa sistemas de partículas indistinguibles.

Funciones de onda simétricas y antisimétricas

En esta sección determinaremos como debe ser la función de onda total si el sistema es invariante frente al intercambio de las partículas. Tal como mencionamos anteriormente y se observó en el ejemplo del choque, los dos estados finales posibles del sistema son equivalentes y corresponden a haber intercambiado el rol de cada partícula. Además, la densidad de probabilidad del sistema conjunto no puede cambiar si se intercambian las dos partículas. Es decir, debemos construir funciones de onda que satisfagan:

$$|\psi(1,2)|^2 = |\psi(2,1)|^2 \quad (9.8)$$

Esto solamente se cumple si la función de onda es simétrica o antisimétrica frente al intercambio de partículas, es decir si:

$$\psi(1,2) = +\psi(2,1) \quad (9.9)$$

$$\psi(1,2) = -\psi(2,1) \quad (9.10)$$

Teniendo en cuenta la linealidad de la ecuación de Schrödinger cualquier combinación lineal de soluciones es también una solución. Como las funciones dadas por Ecs. (9.4) y (9.6) son soluciones, cualquier combinación lineal también lo será. Entonces debemos buscar combinaciones lineales que cumplan la Ec. (9.8), estas soluciones veremos que serán funciones simétricas o antisimétricas que cumplen las Ecs. (9.9) y (9.10).

Entonces, vamos a definir la función de onda simétrica $\psi_S(1,2)$, solución de la ecuación de Schrödinger asociada al sistema, dada por una combinación lineal de la función de las funciones de onda dada por las Ecs. (9.4) y (9.6):

$$\psi_S(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)] \quad (9.11)$$

donde α y β representan los conjuntos de números cuánticos asociados a cada partícula y donde se incluyó el factor $(\frac{1}{\sqrt{2}})$ para que la función de onda esté normalizada.

Asimismo, vamos a definir la función de onda antisimétrica $\psi_A(1,2)$, solución de la ecuación de Schrödinger del sistema, dada por una combinación lineal de las Ecs. (9.4) y (9.6):

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)] \quad (9.12)$$

Para confirmar que realmente estas nuevas funciones de onda dada por Ecs. (9.11) y (9.12) describen sistemas de partículas indistinguibles, intercambiemos la partícula 1 por la partícula 2 para confirmar si estas funciones de onda permanecen invariantes.

$$\psi_S(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)] \xrightarrow[2 \rightarrow 1]{1 \rightarrow 2} \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1) + \psi_\beta(2)\psi_\alpha(1)] = \psi_S(2,1) \quad (9.13)$$

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)] \xrightarrow[2 \rightarrow 1]{1 \rightarrow 2} \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1) - \psi_\beta(2)\psi_\alpha(1)] = -\psi_A(2,1) \quad (9.14)$$

La Ec. (9.13) muestra que la función de onda simétrica permanece invariante ante el cambio de partículas $1 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$, mientras la Ec. (9.14) muestra que la función de onda antisimétrica cambia de signo ante el cambio de partículas $1 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$. Por otra parte, las densidades de probabilidad tanto para las funciones de onda simétrica y antisimétrica permanecen en ambos casos invariantes ante el cambio de partículas $1 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$:

$$\psi_S^* \psi_S \xrightarrow[2 \rightarrow 1]{1 \rightarrow 2} \psi_S^* \psi_S \quad (9.15)$$

$$\psi_A^* \psi_A \xrightarrow[2 \rightarrow 1]{1 \rightarrow 2} (-1)^2 \psi_A^* \psi_A = \psi_A^* \psi_A \quad (9.16)$$

Por lo tanto, la medida de cualquier observable físico arbitrario también será invariante ante la permutación de la partícula 1 con la 2.

Ahora analizaremos que sucede con las funciones simétrica y antisimétrica cuando suponemos que ambas partículas están en el mismo estado:

$$\psi_S(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\beta(1)\psi_\beta(2) + \psi_\beta(1)\psi_\beta(2)] = \frac{2}{\sqrt{2}} \psi_\beta(1)\psi_\beta(2) = \sqrt{2} \psi_\beta(1)\psi_\beta(2) \dots \quad (9.17)$$

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\beta(1)\psi_\beta(2) - \psi_\beta(1)\psi_\beta(2)] = 0 \quad (9.18)$$

Como se puede observar en la Ec. (9.17), la función simétrica es proporcional a la función de onda clásica cuando las dos partículas estén en el mismo estado. En este caso, la densidad de probabilidad simétrica resulta:

$$\psi_S^* \psi_S = 2\psi_\beta^*(1)\psi_\beta^*(2)\psi_\beta(1)\psi_\beta(2) \quad (9.19)$$

es decir, es el doble de la probabilidad clásica. Este resultado se puede generalizar pudiéndose demostrar que: la densidad de probabilidad simétrica de N partículas indistinguibles es $N!$ veces la densidad de probabilidad de N partículas distinguibles.

La Ec. (9.18) muestra que la función de onda antisimétrica se anula cuando ambas partículas están en el mismo estado cuántico. En consecuencia, la densidad de probabilidad antisimétrica será nula cuando ambas partículas se encuentren en el mismo estado cuántico. Si las partículas indistinguibles son descritas por funciones de onda antisimétricas entonces la probabilidad de que ambas partículas se encuentren en el mismo estado cuántico será nula.

El resultado anterior se puede relacionar con el principio de exclusión de Pauli que establece que “en un átomo multielectrónico nunca podrán existir más de un electrón en el mismo estado cuántico”.

Pauli formuló este principio en 1925 luego de analizar una infinidad de datos relativos a niveles de energía atómicos

Por lo tanto, a partir de la Ec. (9.18) y relacionándola con el principio de exclusión de Pauli podemos concluir que las partículas indistinguibles descritas por funciones de onda antisimétricas cumplirán el principio de exclusión. En particular, los electrones cumplen el principio de exclusión y deben ser descritos por funciones de onda antisimétricas.

Bosones y Fermiones

El hecho que la función de onda de un sistema de partículas idénticas sea simétrica o antisimétrica permite agrupar a todas las partículas del universo en dos categorías: fermiones y bosones.

Los fermiones deben su nombre en honor a Enrico Fermi y cuya función de onda es antisimétrica; los bosones son llamados así en honor de Satyendra Nath Bose cuya función de onda es simétrica.

Existe una relación entre la simetría o antisimetría de la función de onda que describe un sistema de partículas idénticas y el spin de las partículas:

- Los sistemas de partículas de spin semientero (electrones, protones, neutrones, etc.) se describen por medio de funciones de onda antisimétricas.
- Los sistemas de partículas de spin entero (fotones, mesones, etc.) se describen por medio de funciones de onda simétricas.

La justificación de estas relaciones se realiza en el marco de la teoría mecánica cuántica relativista, estos temas avanzados no forman parte de los contenidos de este libro de cátedra.

Para determinar si partículas compuestas son fermiones o bosones se debe analizar si la función de onda de las partículas compuestas es simétrica o antisimétrica al permutar las partículas entre sí. Permutarlas significa permutar simultáneamente todas las partículas elementales de 1 con las de 2. Esta permutación deja inalterada la función de onda si las partículas compuestas están formadas por bosones o un número par de fermiones. En ese caso, la partícula compuesta es un bosón. Si las partículas compuestas contienen un número impar de fermiones, entonces van a ser fermiones.

Funciones de onda para un número N de partículas (con N mayor que 2)

La función de onda de un sistema de dos partículas idénticas que responden a la estadística de Fermi, está dada como ya analizamos por la Ec. (9.12). Esta expresión puede reescribirse como un determinante:

$$\psi_A = \begin{vmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\alpha(2) \\ \psi_\beta(1) & \psi_\beta(2) \end{vmatrix} \quad (9.20)$$

conocido como *determinante de Slater*. Este determinante puede generalizarse de manera de generar funciones de ondas antisimétricas que describan los sistemas compuestos de N fermiones.

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\alpha(2) & \cdots & \psi_\alpha(N) \\ \psi_\beta(1) & \psi_\beta(2) & \cdots & \psi_\beta(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_\omega(1) & \psi_\omega(2) & \cdots & \psi_\omega(N) \end{vmatrix} \quad (9.21)$$

El determinante de Slater es una alternativa para generador de la función de ondas antisimétrica. La función de onda satisface las propiedades de los determinantes, así, si tiene dos filas o dos columnas iguales, será nulo, lo que proviene del principio de antisimetría.

Las funciones de onda generadas a partir de este determinante se anulan si dos de las funciones de ondas de una partícula fueran iguales o, lo que es equivalente, dos de los fermiones tuvieran en el mismo estado cuántico lo que es equivalente a que satisfacen el principio de exclusión de Pauli y nos dice que no es posible encontrar a dos (o más) partículas en un mismo estado cuántico.

Para generar funciones de ondas simétricas que describen a los sistemas compuestos de N bosones es mediante el determinante de Slater con la variante que todos los términos de la expresión deben ser considerados positivos.

Estadísticas cuánticas

Introducción

En los sistemas físicos constituidos por un gran número de partículas no es práctico analizar el comportamiento de cada una de las partículas, resulta más adecuado obtener información sobre el comportamiento colectivo del sistema en conjunto, es decir, de sus propiedades macroscópicas.

La Mecánica Estadística estudia estas situaciones en las cuales a partir de las leyes que gobiernan a cada partícula y a las interacciones entre ellas se obtiene el comportamiento de un sistema con un número muy grande de partículas. Uno de sus objetivos, por ejemplo, es obtener

la energía en un sistema macroscópico constituido por muchas partículas (electrones, fotones, etc.) sin necesidad de determinar el estado de cada una de las partículas que lo componen. Este enfoque estadístico es el que emplearemos para determinar la forma en que una dada cantidad de energía se distribuye entre las partículas que constituyen un sistema particular.

Antes de estudiar la Mecánica Estadística Cuántica, resulta conveniente hacer un repaso de la Mecánica Estadística desde un punto de vista “clásico”. Para describir lo que sucede en un sistema formado clásicamente por un gran número de partículas, por ejemplo, el gas ideal, se suele recurrir a la teoría desarrollada originalmente por James Clerk Maxwell y Ludwig Boltzmann. En particular James Clerk Maxwell desarrolló la teoría cinética de los gases sobre argumentos estadísticos considerando al gas ideal formado por una gran cantidad de partículas submicroscópicas. Por otra parte, Ludwig Boltzmann desarrolló la Mecánica Estadística tal como hoy la conocemos sobre la base de las reglas de la combinatoria. Es importante tener en cuenta que cuando Maxwell y Boltzmann propusieron la Mecánica Estadística, la Mecánica Cuántica aún no había sido desarrollada.

Para describir el estado de una partícula la metodología es diferente en el caso clásico que en el caso cuántico. Como ya mencionamos la diferencia entre el caso clásico y el cuántico es la indistinguibilidad de las partículas.

En el caso clásico, aunque las partículas sean idénticas, se las trata como distinguibles y la estadística es la de Maxwell-Boltzmann (MB). En el caso cuántico las partículas idénticas se consideran indistinguibles y esto impone condiciones de simetría a la función de onda frente al intercambio de dos partículas cualesquiera como analizamos anteriormente.

Distribución de Maxwell-Boltzmann

En nuestro análisis, supondremos que en nuestro sistema la energía total es constante y se puede considerar como la suma de las energías de cada partícula, es decir

$$U = \sum_{\alpha=1}^N E_{\alpha} \quad (9.22)$$

En principio consideraremos que tenemos un conjunto discreto de niveles de energía que denominaremos E_1, E_2, \dots, E_i (ver Fig. 9.4). Asimismo, supondremos que tenemos un sistema constituido por un gran número de partículas que puede localizarse en diferentes niveles de energía y deseamos determinar cómo se distribuyen dichas partículas en los diferentes niveles sujeta a las condiciones de vínculo.

En primer lugar, el número total de partículas N es constante y está dada por:

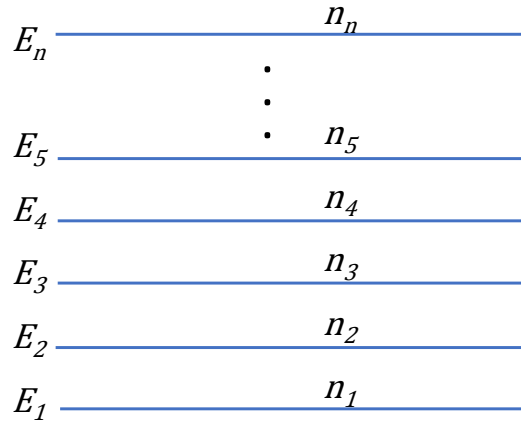
$$N = n_1 + n_2 + \dots = \sum_i n_i \quad (9.23)$$

donde n_i es el número de partículas en el nivel E_i . Además, la energía total del sistema de partículas que proviene de la contribución de cada una de las partículas resulta:

$$U = n_1 E_1 + n_2 E_2 + \dots = \sum_i n_i E_i \quad (9.24)$$

donde la suma es realizada sobre todos los niveles de energía posibles.

Figura 9.4



Nota. Niveles de energía permitidos para la partícula

En general, habrá un número muy grande de configuraciones o formas de distribuir las partículas cumpliendo las condiciones dadas por Ec. (9.23) y (9.24). La probabilidad de ocurrencia de una distribución de partículas (configuración) es proporcional al número de maneras diferentes en que las partículas pueden distribuirse entre los estados disponible de energía para producir esta configuración.

Lo que haremos inicialmente no es una demostración de la distribución de Maxwell Boltzmann obtenida empleando el formalismo propio de la mecánica estadística sino es un análisis que nos permite entender que son las configuraciones, que significan las probabilidades y obtener la probabilidad que un estado de un sistema de partículas este ocupado cuando ese sistema se encuentra a una dada temperatura o lo podemos interpretar como la cantidad de partículas que se halla en cada estado o nivel de energía.

Si las partículas son partículas clásicas y se encuentran en equilibrio térmico a una temperatura T , a pesar de estar en equilibrio térmico, todas las partículas no tendrán la misma energía, es decir la energía de cada partícula no es la energía promedio. La energía de las partículas fluctuará alrededor de este valor y la manera de cómo se distribuye alrededor de ese valor surge de la distribución de Maxwell-Boltzmann.

Analizaremos la forma más probable de distribuir una cantidad finita de energía entre un número también finito de partículas. En primer lugar, consideraremos un sistema constituido de cuatro partículas idénticas distinguibles que tienen disponibles 4 estados cuyas energías están equiespaciadas y sus valores posibles son: 0 (energía mínima), ΔE (1er nivel excitado), $2 \Delta E$, $3 \Delta E$, $4 \Delta E$ es decir consideramos que la energía disponible se puede entregar en forma de cuantos, donde cada cuanto de energía vale ΔE . Todas las formas de distribuir la energía total del sistema entre las partículas del sistema son igualmente probables es decir no hay una distribución preferencial.

Como primer caso supongamos que la energía total disponible de $3 \Delta E$. En la Fig. 9.5 se esquematizan las diferentes configuraciones o las diferentes formas de distribuir la energía entre las partículas correspondientes al caso planteado. Luego se calcula la probabilidad P_i de cada configuración y el número probable de partículas para cada valor de energía:

Una configuración posible que denominamos $i = 1$ consiste en poner una partícula en el tercer nivel excitado con una energía $3 \Delta E$ y las restantes partículas en el nivel fundamental con energía 0 de manera que se cumple que la energía total del sistema sea $3 \Delta E$. Notar que si bien es posible distinguir la partícula en el tercer nivel excitado respecto de aquellas que se encuentran en el nivel fundamental no es posible distinguir entre las partículas en el estado fundamental. Teniendo en cuenta lo anterior habrá cuatro posibilidades o cuatro maneras de distribuir la energía.

La configuración que denominamos $i = 2$ consiste en poner una partícula en el primer estado excitado, otra partícula en el segundo nivel excitado y dos partículas en el nivel fundamental (ver Fig. 9.5). Teniendo en cuenta que se debe cumplir que la energía total del sistema es $3 \Delta E$, se verifica que hay 12 maneras de distribuir las partículas para generar esta configuración

En la configuración que denominamos $i = 3$, tengo tres partículas en el primer nivel excitado y otra partícula en el nivel fundamental. En este caso también habrá 4 posibilidades o 4 maneras de distribuir la energía.

El número probable de partículas con energía E está dado por:

$$n'(E) = \sum_i n_i(E) P_i(E) \quad (9.25)$$

donde $n_i(E)$ es el número de partículas con energía E en la configuración i -ésima y $P_i(E)$ es la probabilidad que una partícula tenga la energía E en la configuración i -ésima y está dada por:

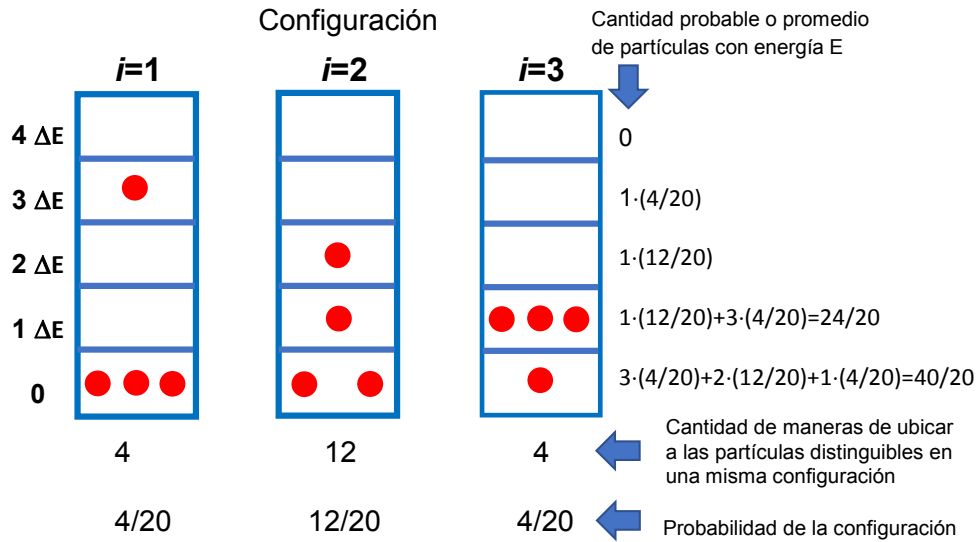
$$P_i(E) = \frac{N_i^*}{\sum_i N_i^*} = \frac{N_i^*}{N^*} \quad (9.26)$$

donde N_i^* es número de maneras diferentes de obtener la configuración i -ésima y $N^* = \sum_i N_i^*$: número total de maneras diferentes. Cabe aclarar que el número de casos totales N^* no depende de la configuración particular considerada. En el caso planteado, el número total de posibilidades que tengo de distribuir las cuatro partículas en estos cinco niveles para alcanzar la energía $3 \Delta E$, resulta $N^* = 20$ (4 (configuración $i = 1$), 12 (configuración $i = 2$) y 4 (configuración $i = 3$)). La probabilidad $P_i(E)$ de la configuración i -ésima calculada a partir de la Ec. (9.26) se indica en la última fila de la Fig. 9.5. De los resultados incluidos en la figura queda en evidencia que las configuraciones $i = 2$ es la más probable.

Ahora lo que nos interesa es determinar la probabilidad de encontrar partículas en cada uno de los niveles de energía. La cantidad promedio de partículas con una dada energía depende del nivel que se está caracterizando y por su energía. El cuarto nivel excitado ($4 \Delta E$) no estará ocupado porque tiene más energía que la energía total del sistema $3 \Delta E$. Por lo tanto, la cantidad promedio de partículas en el cuarto nivel excitado es 0. En el caso de los restantes niveles para obtener la cantidad promedio debemos multiplicar a la probabilidad de la configuración por el número de partículas que tenemos a ese nivel o energía. Por ejemplo, en el primer nivel excitado ($1 \Delta E$) para la primera configuración ($i = 1$) no tengo partículas ($0 \times (4/20)$), para la segunda

configuración tengo una partícula ($1 \times (12/20)$), y para la tercera configuración tengo tres partículas ($3 \times (4/20)$), de aquí resulta que la cantidad probable o promedio de partículas con energía $1 \Delta E$ es $(24/20)$.

Figura 9.5



Nota. Esquema de cálculo para el caso de 4 partículas distinguibles y una energía disponible $3 \Delta E$.

El segundo caso analizado corresponde a considerar también un sistema con 4 partículas, pero aumentando la energía disponible a $4 \Delta E$. Los resultados en este caso se resumen en la Fig. 9.6.

El tercer caso corresponde a considerar un sistema con 4 partículas, pero aumentamos la energía disponible a $5 \Delta E$. Los resultados en este caso se resumen en la Fig. 9.7.

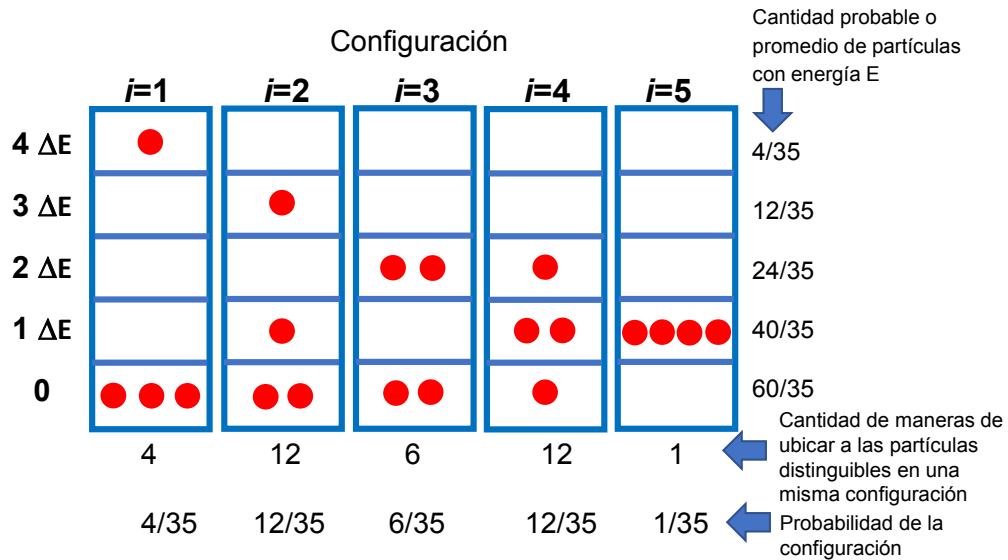
Para analizar la forma más probable de distribuir la energía disponible entre las partículas distinguibles del sistema, grafiquemos el número probable de partículas como función de la energía E que obtuvimos en los ejemplos analizados anteriormente (Fig.9.8).

A partir de esta grafica podemos ver que los niveles donde es mayor la ocupación son los niveles de más baja energía. En particular la cantidad partículas que ocupa cada nivel decrece a medida que aumenta la energía de cada nivel. Se puede demostrar que si $\Delta E \rightarrow 0$ y el número de niveles de energía tiende a infinito manteniendo la energía total del sistema constante, la distribución más probable para describir el modo de distribuir la energía en un sistema de partículas distinguibles tenderá a una función continua y esa curva se aproximará a una exponencial negativa, la *distribución de Maxwell-Boltzmann*:

$$n'(E) = e^{-\alpha} e^{-E/kT} \quad (9.27)$$

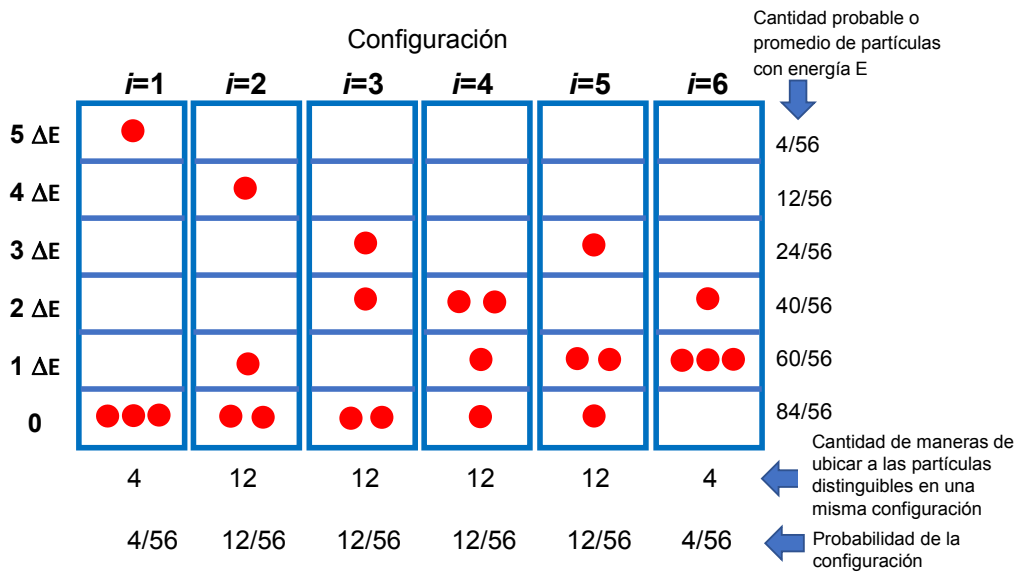
donde el $e^{-\alpha}$ es una constante que se determina en función del número de partículas del sistema, k es la constante de Boltzmann ($k = 1,38 \cdot 10^{-16} \text{ erg } K^{-1} = 8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV } K^{-1}$) y T es la temperatura absoluta del sistema.

Figura 9.6



Nota. Esquema de cálculo para el caso de 4 partículas distinguibles y una energía disponible $4 \Delta E$.

Figura 9.7

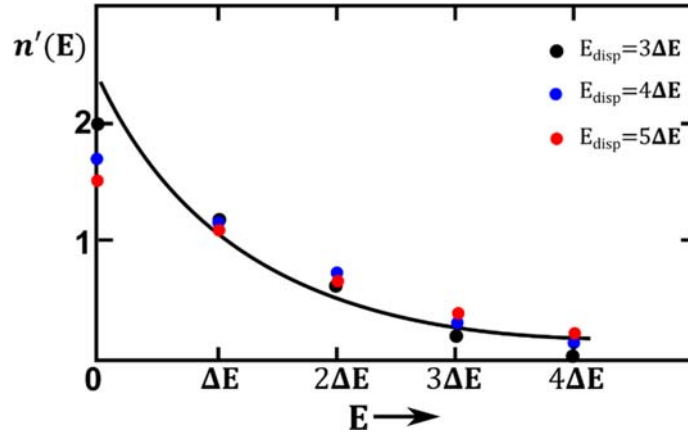


Nota. Esquema de cálculo para el caso de 4 partículas distinguibles y una energía disponible $5 \Delta E$.

En la Fig. 9.8 se puede observar que los tres casos analizados tienden a la distribución de Boltzmann.

La distribución de Maxwell-Boltzmann nos permite determinar el número de ocupación de cada estado, es decir, nos permite conocer la cantidad más probable de partículas que se encuentran en cada nivel de energía cuando el sistema se encuentra a una temperatura T .

Figura 9.8



Nota. Gráfico de $n'(E)$ vs. E para tres casos de energía disponible finita ($3\Delta E$, $4\Delta E$ y $5\Delta E$) y para $n'(E)$ calculado a partir de la distribución de Maxwell-Boltzmann.

En el Apéndice al final de este capítulo se obtiene la expresión para la distribución de Maxwell-Boltzmann (Ec. 9.27) empleando el formalismo de la mecánica estadística.

En la distribución de Maxwell-Boltzmann cuando la temperatura es baja solamente estarán poblados los niveles de energía más bajos y a medida que la temperatura aumenta crece el número de partículas en niveles de energía más altos y decrecen los niveles de menor energía, aunque estos son siempre los niveles más poblados.

Distribución de Bose-Einstein

En la sección anterior hemos analizado la distribución clásica de Maxwell-Boltzmann. Sin embargo, la descripción mecánico-estadística de un sistema de partículas debe tener en cuenta rigurosamente la naturaleza cuántica de las partículas. En particular, la indistinguibilidad y las propiedades de simetría de la función de onda del sistema de partículas determinan dos estadísticas cuánticas: la estadística de Fermi-Dirac y la estadística de Bose-Einstein.

En primer lugar, vamos a deducir la distribución de partículas para el caso en que éstas sean descritas por funciones de onda simétricas. La deducción la realizaremos a partir de la distribución de Maxwell-Boltzmann, es decir, suponiendo que inicialmente tenemos un sistema de partículas distinguibles y posteriormente impondremos el hecho de que son indistinguibles y descritas por funciones simétricas.

Supongamos que tenemos un sistema cuántico de partículas indistinguibles descritas por funciones de onda simétricas con dos estados de energía E_1 y E_2 , cuyos números de ocupación son n_1 y n_2 , respectivamente. Además, usaremos el símbolo $P_{1 \rightarrow 2}$ para indicar la probabilidad de transición de que las partículas pasen del estado 1 al 2. De manera análoga, denotaremos con $P_{2 \rightarrow 1}$ a la probabilidad de transición del estado 2 al 1. Entonces la condición de equilibrio térmico se puede expresar como:

$$n_1 P_{1 \rightarrow 2} = n_2 P_{2 \rightarrow 1} \quad (9.28)$$

o como:

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{P_{2 \rightarrow 1}}{P_{1 \rightarrow 2}} \quad (9.29)$$

Según vimos anteriormente, si las partículas son distinguibles, el número más probable n_1 de partículas que se encuentran en el estado 1 está dado por la distribución de Maxwell-Boltzmann:

$$n_1 = e^{-\alpha} e^{-E_1/kT} \quad (9.30)$$

y de manera análoga para n_2 . Entonces, el cociente (9.29) puede expresarse en función de E_1 y E_2 , como:

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{e^{-E_1/kT}}{e^{-E_2/kT}} \Rightarrow \frac{P_{2 \rightarrow 1}}{P_{1 \rightarrow 2}} = \frac{e^{-E_1/kT}}{e^{-E_2/kT}} \quad (9.31)$$

Ahora supongamos que las partículas en lugar de ser distinguibles, son indistinguibles y descritas por funciones de onda simétricas, es decir bosones. Entonces, la condición de equilibrio térmico resulta:

$$n_1 P_{1 \rightarrow 2}^{Boson} = n_2 P_{2 \rightarrow 1}^{Boson} \quad (9.32)$$

donde se hace referencia explícitamente a la probabilidad de transición para un sistema de bosones. Para el caso de pocas partículas cuando se agrega un bosón más si ya hay n en un determinado estado, la probabilidad aumenta en una cantidad $(n + 1)$ respecto del caso de partículas distinguibles, es decir

$$P_{1 \rightarrow 2}^{Boson} = (1 + n_2) P_{1 \rightarrow 2} \quad (9.33)$$

$$P_{2 \rightarrow 1}^{Boson} = (1 + n_1) P_{2 \rightarrow 1} \quad (9.34)$$

Entonces, reemplazando en la condición de equilibrio térmico para bosones dada por ecuación (9.32) resulta:

$$n_1 (1 + n_2) P_{1 \rightarrow 2} = n_2 (1 + n_1) P_{2 \rightarrow 1} \quad (9.35)$$

Si despejamos el cociente de las probabilidades de transición en función de n_1 y n_2 , obtenemos:

$$\frac{n_1 (1+n_2)}{n_2 (1+n_1)} = \frac{P_{2 \rightarrow 1}}{P_{1 \rightarrow 2}} = \frac{e^{-E_1/kT}}{e^{-E_2/kT}} \quad (9.36)$$

Es posible agrupar en un miembro lo que depende del estado 1 y en el otro lo que depende del estado 2:

$$\frac{n_1}{(1+n_1)} e^{E_1/kT} = \frac{n_2}{(1+n_2)} e^{E_2/kT} \quad (9.37)$$

Tenemos un sistema de partículas independientes entre sí y en equilibrio térmico la igualdad no depende de la temperatura ni de n_1 ni n_2 entonces ambos miembros de la igualdad son iguales a una constante:

$$\frac{n_1}{(1+n_1)} e^{E_1/kT} = e^{-\alpha} \quad (9.38)$$

Entonces si despejamos n_1 como función de E_1 :

$$\frac{n_1}{(1+n_1)} = e^{-(\alpha+E_1/kT)}$$

entonces

$$n_1 = \frac{e^{-(\alpha+E_1/kT)}}{1-e^{-(\alpha+E_1/kT)}} = \frac{1}{e^{\alpha} e^{E_1/kT} - 1} \quad (9.39)$$

Hemos obtenido el número más probable de bosones en el estado arbitrario 1 de energía E_1 también arbitraria. Por lo tanto, podemos concluir que el número más probable de bosones en un estado de energía E de un sistema en equilibrio térmico a temperatura T es:

$$n'(E) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{E/kT} - 1} \quad (9.40)$$

Esta expresión es conocida como *distribución de Bose-Einstein*. Es equivalente a la distribución de Maxwell-Boltzmann, pero es aplicable a partículas cuánticas descritas por funciones de onda simétricas y que tienen spin entero.

En forma similar a lo que sucedía en la estadística de Maxwell-Boltzmann a temperaturas bajas los niveles de menor energía están mucho más poblados y al aumentar la temperatura estos disminuyen su población y aumenta la de los niveles de mayor energía, pero manteniéndose siempre más poblados los niveles de más baja energía. La presencia del signo negativo en el denominador hace que sea relativamente mayor la población para energías menores respecto a lo que daría la estadística de Maxwell-Boltzmann. Esto lo discutiremos en la sección Comparación de las distribuciones.

Distribución de Fermi-Dirac

Del mismo modo que con los bosones, vamos a obtener la distribución para el caso de fermiones. Suponemos un sistema cuántico de partículas indistinguibles, que cumplen el principio de exclusión de Pauli y están descritas por funciones de onda antisimétricas y con spin semientero.

Consideremos dos estados de energía E_1 y E_2 , cuyos números de ocupación son n_1 y n_2 , respectivamente. Entonces la condición de equilibrio térmico para el sistema de fermiones se puede expresar como:

$$n_1 P_{1 \rightarrow 2}^{Fermion} = n_2 P_{2 \rightarrow 1}^{Fermion} \quad (9.41)$$

Dado que las partículas son fermiones, entonces el número de partículas en un determinado nivel solo puede ser 0 o 1 dado que por ser fermiones si hay un fermión en un nivel, la

probabilidad de poner un fermión más será nula debido al principio de exclusión de Pauli. De este modo, cada probabilidad de transición fermiónica se puede expresar en función de la probabilidad de transición de partículas distinguibles como:

$$P_{1 \rightarrow 2}^{Fermion} = (1 - n_2)P_{1 \rightarrow 2} \quad (9.42)$$

$$P_{2 \rightarrow 1}^{Fermion} = (1 - n_1)P_{2 \rightarrow 1} \quad (9.43)$$

Las ecuaciones anteriores me indican que si no hay ningún fermión en un dado nivel la probabilidad de transición de un nivel a otro es igual a la probabilidad clásica en cambio si se tiene un fermión en ese nivel el término $(1 - n_2)$ o $(1 - n_1)$ daría cero. En resumen, se cumple el principio de exclusión de Pauli.

Combinando Ecs. (9.41), (9.42) y (9.43) obtenemos:

$$n_1(1 - n_2)P_{1 \rightarrow 2} = n_2(1 - n_1)P_{2 \rightarrow 1} \quad (9.44)$$

Si ahora despejamos n_1 y n_2 en función del cociente de probabilidades de transición de partículas distinguibles y usamos Ec. (9.31) resulta:

$$\frac{n_1(1-n_2)}{n_2(1-n_1)} = \frac{P_{2 \rightarrow 1}}{P_{1 \rightarrow 2}} = \frac{e^{-E_1/kT}}{e^{-E_2/kT}} \quad (9.45)$$

Análogamente al caso de los bosones, despejamos en un miembro lo que depende del estado 1 y en el otro lo que depende del estado 2:

$$\frac{n_1}{(1-n_1)} e^{E_1/kT} = \frac{n_2}{(1-n_2)} e^{E_2/kT} \quad (9.46)$$

De la misma manera que en el caso de bosones, cada miembro depende de estados independientes por lo tanto ambos miembros son iguales a una constante:

$$\frac{n_1}{(1-n_1)} e^{E_1/kT} = e^{-\alpha/kT} \quad (9.47)$$

Entonces si despejamos n_1 como función de E_1 :

$$\frac{n_1}{(1 - n_1)} = e^{-(\alpha+E_1/kT)}$$

entonces

$$n_1 = \frac{e^{-(\alpha+E_1/kT)}}{1+e^{-(\alpha+E_1/kT)}} = \frac{1}{e^{\alpha} e^{E_1/kT} + 1} \quad (9.48)$$

Hemos obtenido el número más probable de fermiones en el estado arbitrario 1 de energía E_1 también arbitrario. Por lo tanto, podemos concluir que el número más probable de fermiones en un estado de energía E de un sistema en equilibrio térmico a temperatura T está dada por:

$$n'(E) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{E/kT} + 1} \quad (9.49)$$

conocida como distribución de Fermi-Dirac. En esta ecuación es posible observar que $n'(E)$ tiende a cero cuando E es suficientemente grande y además como la exponencial es siempre positiva el denominador es mayor 1 lo cual refleja la limitación impuesta por el principio de exclusión de Pauli.

La *energía o nivel de Fermi* (E_F) es un concepto importante relacionado con esta distribución. Para cada una temperatura $T > 0$, E_F se define como la energía que debería tener un nivel para que su ocupación fuera del 50%, es decir, $\frac{1}{e^{\alpha} e^{E/kT} + 1} = 0.5$. Entonces la energía de Fermi esta dada por:

$$E_F = -\alpha k T \quad (9.50)$$

donde el parámetro α se determina por la condición $\sum_i n_i = N$. La Ec. (9.49) en términos de E_F resulta:

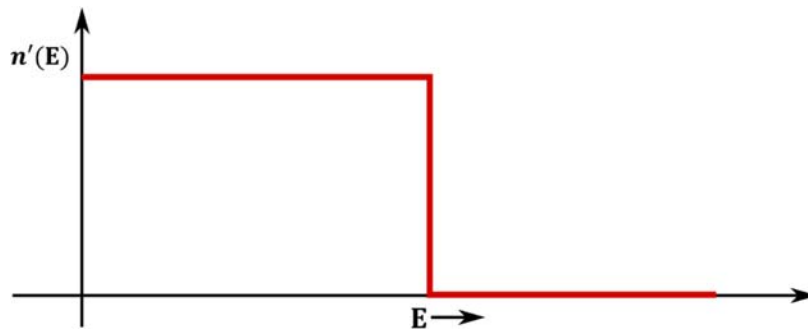
$$n'(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \quad (9.51)$$

El valor de la energía de Fermi cuando T tiende a cero tiene un significado particular. Para T tendiendo a 0 K, la exponencial tendera a infinito o a cero de acuerdo al signo de $(E - E_F)$

$$e^{(E-E_F)/kT} = \begin{cases} \infty & \text{si } E > E_F \\ 0 & \text{si } E < E_F \end{cases} \quad (9.52)$$

Por lo que la distribución de Fermi-Dirac a $T = 0$ tiene el comportamiento indicado en Fig. 9.9.

Figura 9.9.



Nota. Distribución de Fermi a 0 K

Como el principio de exclusión exige que no haya más de una partícula por estado, el nivel de energía más bajo posible se obtiene ubicando las partículas en los estados desocupados más bajos disponibles hasta que todas las partículas estén acomodadas, la última partícula agregada tiene la energía E_F que es considerable si N es grande.

Comparación de las distribuciones

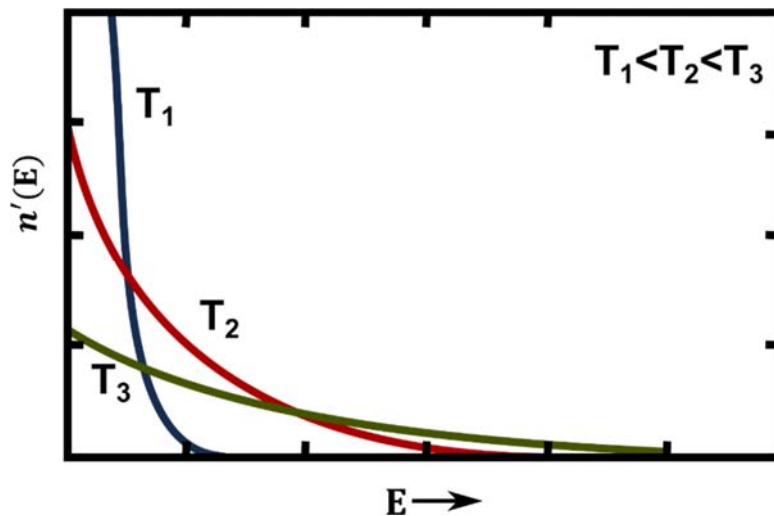
En esta sección vamos a analizar y comparar las tres distribuciones deducidas anteriormente. Primero, vamos a representar gráficamente la distribución de Maxwell-Boltzmann para tres valores de temperatura diferentes. En la Fig. 9.10 para la más baja temperatura (T_1) los niveles de más baja energía están altamente ocupados (curva que se va al infinito) es decir hay muchas partículas con estas energías y un aumento de la energía hace que la curva decaiga a cero. Se puede observar que a medida que aumenta la temperatura (T_2 y T_3) los valores de $n'(E)$

aumentan para valores grandes de energía en detrimento de $n'(E)$ cuando $E \rightarrow 0$. Esto se debe a que la agitación térmica debido al aumento de temperatura promueve más partículas desde los niveles de baja energía a los niveles de energía más alta. Y este aumento se ve favorecido cuanto mayor es el aumento de temperatura (contrastar la transición entre las curvas $T_1 < T_2 < T_3$).

En la Fig. 9.11 se gráfica la distribución de Bose-Einstein para tres valores de temperatura. Se debe notar que si bien las curvas son similares hay más partículas concentradas en energías más bajas en bosones que para las partículas clásicas o de Maxwell-Boltzmann. En este caso se puede apreciar que a medida aumenta la agitación térmica de los bosones como consecuencia del aumento la temperatura, el número probable de partículas $n'(E)$ aumenta, pero a diferencia de lo observado en el caso de la distribución de Maxwell-Boltzmann, para la distribución de Bose-Einstein se observa que $n'(E)$ aumenta para todo valor de E . Este hecho se debe a que, al ser bosones, al efecto de la agitación térmica también contribuye al aumento de $n'(E)$ el comportamiento de los bosones, cuantos más bosones hay en un estado mayor será la probabilidad de que haya otros bosones (observar el cambio gradual de las curvas $T_1 < T_2 < T_3$).

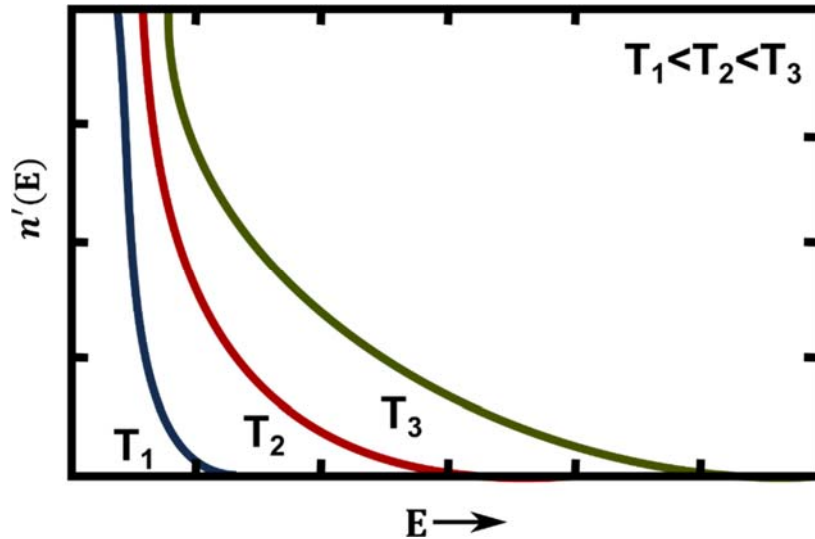
Si ahora se analiza la distribución de Bose-Einstein para energías altas se observa algo parecido al caso de Maxwell-Boltzmann clásico los estados de mayor energía se empiezan a llenar a medida aumenta la temperatura. Sin embargo, al tomar valores de energía cercanos a cero igualmente aumenta el número de partículas en ese estado cuando aumenta la temperatura y esto está relacionado con el comportamiento de los bosones debido a que, cuantos más bosones haya en un estado del sistema, mayor será a probabilidad de ocupación de este estado. En cambio, en el caso clásico cuando aumenta la temperatura se vacían los niveles para energías cercana a cero. En bosones, al aumentar la temperatura los valores cercanos a cero también se llenan cada vez más.

Figura 9.10



Nota. Gráfico del número probable de partículas distinguibles en función de E según la distribución de Maxwell-Boltzmann.

Figura 9.11



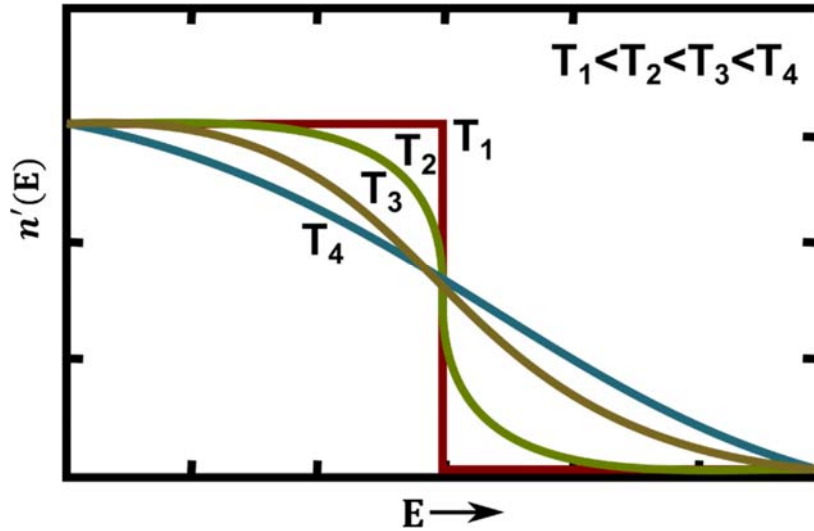
Nota. Gráfico del número probable de bosones en función de la energía E según la distribución de Bose-Einstein.

En la Fig. 9.12 se gráfica la distribución de Fermi-Dirac para tres valores diferentes de temperatura. Como se puede observar, el número probable de fermiones en función de E es diferente de la forma observada para las otras dos distribuciones. Para el caso de $0 K$ la curva corresponde a una función escalón en la cual por debajo de E_F el valor de $n'(E)$ es igual a la unidad y por encima de E_F es cero. A $0 K$ la energía de Fermi se define como la energía del último estado ocupado en el sistema de fermiones.

Para temperaturas $T > 0$, la energía de Fermi se define como el valor de energía para la cual la distribución de Fermi toma el valor $\frac{1}{2}$, es decir $n'(E_F) = 1/2$.

Debido al principio de exclusión de Pauli y al principio natural de minimización de la energía, a $0 K$ todos los fermiones ocuparán un estado de energía y estos serán los de menor valor. Por otro lado, a medida que aumenta la temperatura, se observa que los niveles que se encuentran cercanos y por debajo de E_F se desocupan y comienzan a llenarse los niveles cercanos y por encima del nivel de Fermi E_F . Además, cuanto mayor es la temperatura se aprecia que este comportamiento se hace más notorio (observar la transición de las curvas $T_1 < T_2 < T_3 < T_4$). Para T altas, la curva se parece cada vez más a una exponencial decreciente. Téngase en cuenta que para T altas se hacen menos relevantes los comportamientos cuánticos y las curvas de Maxwell Boltzmann, Bose y Fermi se hacen parecidas. Por otra parte, para temperaturas cercana a $0 K$ los comportamientos son muy distintos.

Figura 9.12



Nota. Gráfico del número probable de fermiones en función de E según la distribución de Fermi-Dirac

Límite clásico de las estadísticas de Fermi-Dirac y Bose-Einstein

Las dos estadísticas las podemos poner como

$$n'(E) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{(E/kT) \mp 1}} \quad (9.53)$$

donde el signo positivo (+) corresponde a Fermi-Dirac y el signo negativo (-) a Bose-Einstein. En los casos que $e^{\alpha} e^{(E/kT)} \gg 1$ ambas ecuaciones tienden a la distribución de Maxwell-Boltzmann. Esto ocurre en dos límites cuando la concentración es suficientemente baja (N suficientemente pequeño) o cuando la temperatura es suficientemente alta.

Para verlo recordemos que

$$N = \sum_i n_i = \sum_i \frac{1}{e^{(\alpha + E_i/kT) \mp 1}} \quad (9.54)$$

Si N disminuye deberán disminuir alguno (o todos los términos), si suponemos $1/kT$ fijo lo único que puede variar es α que deberá aumentar y al hacerlo disminuyen todos los términos. Si N es suficientemente pequeño resulta que los términos son menores que 1 para todo i .

Consideremos N fijo y aumentemos T , supongamos que el cero de energía es tal que los E_i son positivos, al disminuir $1/kT$ si al mismo tiempo no cambiamos α cada término de la suma aumentará y por lo tanto aumentará N ; luego al disminuir $1/kT$ debe aumentar α si queremos N constante, para temperaturas suficientemente altas será:

$$e^{\alpha} e^{(E/kT)} \gg 1 \quad \text{para todo } i.$$

Concluimos entonces que en el límite clásico de bajas concentraciones o altas temperaturas las estadísticas cuánticas tienden a la de Maxwell-Boltzmann y solo serán muy diferentes para bajas temperaturas a altas concentraciones (ejemplo de este último caso los metales)

Las ideas mencionadas en este capítulo para las tres distribuciones se pueden resumir en el siguiente gráfico.

Distribución	MAXWELL-BOLTZMANN	BOSE-EINSTEIN	FERMI-DIRAC
Características	Aplicable a partículas distinguibles	Aplicable a partículas indistinguibles que no cumplen el principio de exclusión	Aplicable a partículas indistinguibles que cumplen el principio de exclusión
Sistemas	De partículas indistinguibles o sistemas cuánticos en el límite clásico	De bosones partículas idénticas de spin entero	De fermiones partículas idénticas de spin semientero
Funciones de onda	sin simetría	Simétrica	antisimétrica
Función de distribución	$e^{-\alpha} e^{-\frac{E}{kT}}$	$\frac{1}{e^{\alpha} e^{E/kT} - 1}$	$\frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1}$
Comportamiento de la función de distribución	Exponencial	Limite clásico: exponencial Limite cuántico: $n_{BE} > n_{MB}$	Limite clásico: exponencial Limite cuántico: función escalón

Problemas resueltos

Problema 1: Para el caso de dos partículas indistinguibles, es posible construir una función de onda que satisfaga la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y la densidad de probabilidad se mantenga invariante ante un cambio de marcas de las partículas. Sean dos partículas indistinguibles, con estados cuánticos diferentes α y β , se puede construir una función de onda simétrica:

$$\psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]$$

Y una función de onda antisimétrica:

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]$$

Como ambas partículas son indistinguibles, debe ser posible intercambiar sus marcas sin alterar una cantidad medible como la densidad de probabilidad.

a) Verifique que la densidad de probabilidad para ψ_s y ψ_A no se alteran por un intercambio en las marcas de las partículas ($1 \rightarrow 2$ y $2 \rightarrow 1$).

b) Verifique que se cumple el principio de exclusión de Pauli para el caso de fermiones (considere dos partículas indistinguibles con el mismo estado cuántico $\alpha = \beta$, reemplace en la función de onda correspondiente a dos fermiones, obtenga el resultado y a partir de eso justifique que se cumple el principio de exclusión de Pauli).

c) Compare la densidad de probabilidad de dos bosones y de dos partículas clásicas e indique si dos partículas descritas por funciones de onda simétricas tienen mayor o menor probabilidad de encontrarse en el mismo estado cuántico respecto a dos partículas clásicas.

Solución:

a) Sean dos partículas indistinguibles, con estados cuánticos diferentes α y β , se puede construir una función de onda simétrica:

$$\psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]$$

Y una función de onda antisimétrica:

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]$$

Como ambas partículas son indistinguibles, se pueden intercambiar sus marcas ($1 \rightarrow 2$ y $2 \rightarrow 1$) sin alterar una cantidad medible como la densidad de probabilidad:

En el caso de la función de onda simétrica:

$$\psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)] = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1) + \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)] = \psi_s(2,1)$$

$$\Rightarrow \psi_s^*(1,2)\psi_s(1,2) = \psi_s^*(2,1)\psi_s(2,1)$$

$$\Rightarrow |\psi_s(1,2)|^2 = |\psi_s(2,1)|^2$$

En el caso de la función de onda antisimétrica:

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)] = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1) - \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)] = -\psi_A(2,1)$$

$$\Rightarrow \psi_A^*(1,2)\psi_A(1,2) = (-\psi_A^*(2,1))(-\psi_A(2,1))$$

$$\Rightarrow |\psi_A(1,2)|^2 = |\psi_A(2,1)|^2$$

b) Para verificar que se cumple el principio de exclusión de Pauli para el caso de fermiones, suponemos dos de tales partículas con el mismo estado cuántico $\alpha = \beta$ y las reemplazamos en la función de onda correspondiente:

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\alpha(1)] = 0$$

Si calculamos la densidad de probabilidad nos va a dar $|\psi_A(1,2)|^2 = 0$. Así, la probabilidad de encontrar dos fermiones con el mismo estado cuántico es nula, es decir, las partículas descritas por una función de onda antisimétrica cumplen el principio de Exclusión de Pauli.

c) Sean dos bosones en el mismo estado cuántico $\alpha = \beta$, la función de onda estará dada por:

$$\psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2) + \psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)] = \frac{2}{\sqrt{2}} \psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)$$

Y la densidad de probabilidad:

$$\Rightarrow |\psi_s(1,2)|^2 = \left(\frac{2}{\sqrt{2}}\right)^2 |\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)|^2 = 2|\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)|^2$$

Es decir que la densidad de probabilidad de dos bosones que tienen función de onda simétrica, es el doble de la densidad de probabilidad de las partículas clásicas y tienen el doble de probabilidad de encontrarse en el mismo estado cuántico respecto a dos partículas clásicas.

Problema 2: Sean dos partículas (partícula N°1 y N°2) y dos estados cuánticos diferentes (estado α y β).

a) Indique cuál de las siguientes funciones de onda son simétricas, antisimétricas o ninguna de dichas opciones. Justifique analíticamente.

$$i) \psi_I(1,2) = \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)$$

$$ii) \psi_{II}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]$$

$$iii) \psi_{III}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]$$

b) Indique en cuáles de los casos anteriores, las funciones de onda describen sistemas con partículas indistinguibles. Justifique analíticamente.

c) Indique cuál de las funciones de onda anteriores describe un sistema de dos bosones. Justifique a partir de la densidad de probabilidad suponiendo que ambos bosones están en el mismo estado cuántico y compare con la densidad de probabilidad clásica.

d) Indique cuál de las funciones de onda describe un sistema de partículas que cumplen con el principio de exclusión de Pauli. Justifique analíticamente.

Solución:

a) Analizaremos qué ocurre en cada caso con las funciones de onda si invertimos las partículas con estados cuánticos diferentes α y β :

$$i) \psi_I(1,2) = \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)$$

Si intercambiamos sus marcas ($1 \rightarrow 2$ y $2 \rightarrow 1$)

$$\Rightarrow \psi_I(2,1) = \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)$$

Las funciones de onda obtenidas son diferentes y no tienen ninguna relación de simetría.

$$ii) \psi_{II}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]$$

En este caso si intercambiamos las marcas ($1 \rightarrow 2$ y $2 \rightarrow 1$) obtenemos:

$$\psi_{II}(2,1) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1) - \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)] = -\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)] = -\psi_{II}(1,2)$$

Las funciones de onda son antisimétricas.

$$iii) \psi_{III}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]$$

En este caso si intercambiamos las marcas ($1 \rightarrow 2$ y $2 \rightarrow 1$) obtenemos:

$$\psi_{III}(2,1) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1) + \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)] = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)] = \psi_{III}(1,2)$$

Las funciones de onda son simétricas.

b) i) En el primer caso estamos ante el caso de partículas distinguibles, ya que si calculamos la densidad de probabilidad al intercambiar las marcas ($1 \rightarrow 2$ y $2 \rightarrow 1$), nos dará diferente:

$$\psi_I(1,2) = \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)$$

Si calculamos la densidad de probabilidad:

$$\Rightarrow \psi_I^*(1,2)\psi_I(1,2) = |\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)|^2$$

Si intercambiamos sus marcas ($1 \rightarrow 2$ y $2 \rightarrow 1$)

$$\psi_I(2,1) = \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)$$

Si calculamos la densidad de probabilidad:

$$\Rightarrow \psi_I^*(2,1)\psi_I(2,1) = |\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)|^2$$

ii) En el caso de la función de onda antisimétrica:

$$\psi_{II}(1,2) = -\psi_{II}(2,1)$$

Si calculamos la densidad de probabilidad:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \psi_{II}^*(1,2)\psi_{II}(1,2) &= (-\psi_{II}^*(2,1))(-\psi_{II}(2,1)) \\ &\Rightarrow |\psi_{II}(1,2)|^2 = |\psi_{II}(2,1)|^2 \end{aligned}$$

Vemos así que ambas partículas son indistinguibles, ya que se pueden intercambiar sus marcas ($1 \rightarrow 2$ y $2 \rightarrow 1$) sin alterar una cantidad medible como la densidad de probabilidad.

iii) En el caso de la función de onda simétrica:

$$\psi_{III}(1,2) = \psi_{III}(2,1)$$

Si calculamos la densidad de probabilidad:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \psi_{III}^*(1,2)\psi_{III}(1,2) &= \psi_{III}^*(2,1)\psi_{III}(2,1) \\ &\Rightarrow |\psi_{III}(1,2)|^2 = |\psi_{III}(2,1)|^2 \end{aligned}$$

Vemos así que ambas partículas son indistinguibles, ya que se pueden intercambiar sus marcas ($1 \rightarrow 2$ y $2 \rightarrow 1$) sin alterar una cantidad medible como la densidad de probabilidad.

c) Dos bosones estarán descrito por la función de onda simétrica.

Sean dos bosones en el mismo estado cuántico $\alpha = \beta$, la función de onda estará dada por:

$$\psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2) + \psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)] = \frac{2}{\sqrt{2}}\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)$$

Y la densidad de probabilidad:

$$\Rightarrow |\psi_s(1,2)|^2 = \left(\frac{2}{\sqrt{2}}\right)^2 |\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)|^2 = 2|\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)|^2$$

Es decir que la densidad de probabilidad de dos bosones en el mismo estado cuántico que tienen función de onda simétrica, es el doble de la densidad de probabilidad de las partículas clásicas y tienen el doble de probabilidad de encontrarse en el mismo estado cuántico respecto a dos partículas clásicas.

d) Las funciones de onda que describen un sistema que cumple con el principio de exclusión de Pauli son las funciones de onda antisimétricas.

Para verificar que se cumple el principio de exclusión de Pauli para el caso de fermiones, suponemos dos de tales partículas con el mismo estado cuántico $\alpha = \beta$ y las reemplazamos en la función de onda correspondiente:

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\alpha(1)] = 0$$

Si calculamos la densidad de probabilidad nos va a dar $|\psi_A(1,2)|^2 = 0$. Así, la probabilidad de encontrar dos fermiones con el mismo estado cuántico es nula, es decir, las partículas descritas por una función de onda antisimétrica, cumplen el principio de Exclusión de Pauli.

Problema 3: a) Obtenga la expresión de la función de onda para tres partículas (partículas N°1, N°2 y N°3) en tres estados cuánticos diferentes (estado α , β y γ), suponiendo que las primeras dos partículas son fermiones y que la tercera partícula es distinguible. Además, suponga la tercera partícula (N°3) se encuentra en el estado γ .

b) Calcule la densidad de probabilidad del sistema suponiendo que los dos fermiones están en el mismo estado cuántico, por ejemplo, en el estado α . ¿Qué resultado obtuvo? Relacione este resultado con el principio de exclusión de Pauli.

Solución:

a) Sean tres partículas (partículas N°1, N°2 y N°3) en tres estados cuánticos diferentes (estado α , β y γ).

Si las dos primeras partículas son fermiones (y por lo tanto indistinguibles) su función de onda será antisimétrica:

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]$$

Y como la tercera partícula es distinguible y se encuentra en el estado γ , su función de onda será:

$$\psi(3) = \psi_\gamma(3)$$

Así, la expresión de la función de onda para el sistema formado por las tres partículas en tres estados cuánticos diferentes será:

$$\psi_1(1,2,3) = \left[\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)] \right] \psi_\gamma(3)$$

b) La densidad de probabilidad del sistema estará dada por:

$$|\psi_1(1,2,3)|^2 = \psi_1^*(1,2,3)\psi_1(1,2,3)$$

$$|\psi_1(1,2,3)|^2 = \frac{1}{2} \left([\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]\psi_\gamma(3) \right)^* \left([\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]\psi_\gamma(3) \right)$$

$$|\psi_1(1,2,3)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)|^2 |\psi_\gamma(3)|^2$$

Y si los dos fermiones están en el mismo estado cuántico α , mientras que la tercera partícula distinguible está en el estado cuántico γ , la densidad de probabilidad es:

$$|\psi_1(1,2,3)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2) - \psi_\alpha(2)\psi_\alpha(1)|^2 |\psi_\gamma(3)|^2 = 0$$

Si la densidad de probabilidad es 0, significa que la probabilidad de encontrar a las tres partículas, con los dos fermiones en el mismo estado cuántico es nula, lo cual concuerda con el principio de exclusión de Pauli.

Problema 4: a) Obtenga la expresión de la función de onda para tres partículas (partículas N°1, N°2 y N°3) en tres estados cuánticos diferentes (estados α , β y γ). suponiendo que las primeras

dos partículas son bosones y que la tercera partícula (N°3) es distinguible. Además, suponga la partícula N°3 se encuentra en el estado γ .

b) Calcule la densidad de probabilidad del sistema suponiendo que los dos bosones están en el mismo estado cuántico (por ejemplo, en el estado α) y relacione esta densidad de probabilidad con el caso de tres partículas distinguibles.

Solución:

a) Sean tres partículas (partículas N°1, N°2 y N°3) en tres estados cuánticos diferentes (estados α , β y γ).

Si las dos primeras partículas son bosones (y por lo tanto indistinguibles) su función de onda será simétrica:

$$\psi_S(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]$$

Y como la tercera partícula es distinguible y se encuentra en el estado γ , su función de onda será:

$$\psi(3) = \psi_\gamma(3)$$

Así, la expresión de la función de onda para el sistema formado por las tres partículas en tres estados cuánticos diferentes será:

$$\psi_2(1,2,3) = \left[\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)] \right] \psi_\gamma(3)$$

b) La densidad de probabilidad del sistema estará dada por:

$$|\psi_2(1,2,3)|^2 = \psi_2^*(1,2,3)\psi_2(1,2,3)$$

$$|\psi_2(1,2,3)|^2 = \frac{1}{2} \left([\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]\psi_\gamma(3) \right)^* \left([\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)]\psi_\gamma(3) \right)$$

$$|\psi_2(1,2,3)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)|^2 |\psi_\gamma(3)|^2$$

Y si los dos bosones están en el mismo estado cuántico α , mientras que la tercera partícula distinguible está en el estado cuántico γ , la densidad de probabilidad es:

$$|\psi_2(1,2,3)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2) + \psi_\alpha(2)\psi_\alpha(1)|^2 |\psi_\gamma(3)|^2 = \frac{4}{2} |\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)|^2 |\psi_\gamma(3)|^2$$

$$|\psi_2(1,2,3)|^2 = 2 |\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)\psi_\gamma(3)|^2 \quad (I)$$

Si tuviéramos un sistema con tres partículas distinguibles, en tres estados cuánticos diferentes, la función de onda asociada sería:

$$\psi(1,2,3) = \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3)$$

Y la densidad de probabilidad estaría dada por:

$$|\psi_2(1,2,3)|^2 = \left(\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3) \right)^* \left(\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3) \right) = |\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3)|^2$$

Si dos de las partículas se hallan en el mismo estado cuántico α y una en el estado cuántico γ :

$$|\psi_2(1,2,3)|^2 = |\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)\psi_\gamma(3)|^2 \quad (II)$$

Si comparamos la densidad de probabilidad de la ecuación (I) y (II) podemos observar que la densidad de probabilidad de un sistema formado por dos bosones en un mismo estado cuántico y una partícula distinguible en un estado cuántico diferente es el doble de la densidad de probabilidad

de un sistema formado por tres partículas distinguibles, dos de las cuales se hallan en el mismo estado cuántico.

Problema 5: El núcleo del átomo de Helio (He) está formado por dos protones y dos neutrones. Los dos estados de energía más bajos son el estado α y el estado β , respectivamente. Además, como el protón y el neutrón tienen espín semientero, entonces en un mismo estado cuántico no pueden estar simultáneamente dos partículas idénticas.

a) Considerando que los protones tienen espín $s_p = 1/2$, escriba la función de onda para los protones de modo que haga indistinguibles a los protones P_1 y P_2 en los estados α y β (utilice ρ para la función de onda de los protones, por ejemplo, si el protón P_2 está en el estado α , su función de onda la anotamos como $\rho_\alpha(P_2)$).

b) Considerando que los neutrones tienen espín $s_N = 1/2$, escriba la función de onda para los neutrones de modo que haga indistinguibles a los neutrones N_1 y N_2 en los estados α y β (utilice μ para la función de onda de los neutrones, por ejemplo, si el neutrón N_2 está en el estado α su función de onda es $\mu_\alpha(N_2)$).

c) Esquematice todas las configuraciones posibles en las que pueden estar los dos protones y los dos neutrones en el núcleo de He. En la figura se esquematiza una de ellas, en el estado α se encuentran el protón P_2 y el neutrón N_2 . Mientras que en el estado β el protón P_1 y el neutrón N_1 . De modo que la función de onda total para esta configuración será:

$$\Psi_T(P_1, P_2, N_1, N_2) = \rho_\alpha(P_2)\mu_\alpha(N_2)\rho_\beta(P_1)\mu_\beta(N_1)$$



Escriba la función de onda total que haga indistinguibles simultáneamente los dos protones y los dos neutrones en los estados α y β del núcleo de helio. (Sugerencia: recuerde que cada término de la función de onda total debe ser de la forma mostrada anteriormente. Además, cada término representa una de las configuraciones posibles, es decir que la cantidad total de términos debe ser igual al número total de configuraciones posibles).

Solución:

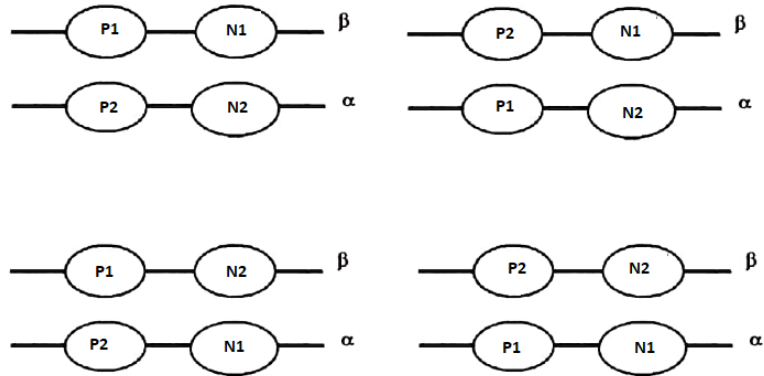
a) La función de onda de modo que haga indistinguibles a los protones P_1 y P_2 en los estados α y β es la función de onda antisimétrica, dada por:

$$\rho_A(P_1, P_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\rho_\alpha(P_1)\rho_\beta(P_2) - \rho_\alpha(P_2)\rho_\beta(P_1)]$$

b) La función de onda de modo que haga indistinguibles a los neutrones N_1 y N_2 en los estados α y β es la función de onda antisimétrica, dada por:

$$\mu_A(N_1, N_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\mu_\alpha(N_1)\mu_\beta(N_2) - \mu_\alpha(N_2)\mu_\beta(N_1)]$$

c) Esquema de todas las configuraciones posibles en las que pueden estar los dos protones y los dos neutrones en el núcleo de He:



La función de onda total que hace indistinguibles simultáneamente a los dos protones y a los dos neutrones en los estados α y β del núcleo de helio es:

$$\begin{aligned} \psi_{tot}(P_1, P_2, N_1, N_2) &= \rho_A(P_1, P_2) \mu_A(N_1, N_2) = \\ &= \left[\frac{1}{\sqrt{2}} [\rho_\alpha(P_1) \rho_\beta(P_2) - \rho_\alpha(P_2) \rho_\beta(P_1)] \right] \left[\frac{1}{\sqrt{2}} [\mu_\alpha(N_1) \mu_\beta(N_2) - \mu_\alpha(N_2) \mu_\beta(N_1)] \right] \\ &= \frac{1}{2} [\rho_\alpha(P_1) \rho_\beta(P_2) \mu_\alpha(N_1) \mu_\beta(N_2) - \rho_\alpha(P_1) \rho_\beta(P_2) \mu_\alpha(N_2) \mu_\beta(N_1) - \\ &\quad - \rho_\alpha(P_2) \rho_\beta(P_1) \mu_\alpha(N_1) \mu_\beta(N_2) + \rho_\alpha(P_2) \rho_\beta(P_1) \mu_\alpha(N_2) \mu_\beta(N_1)] \end{aligned}$$

Problema 6: Demuestre que la probabilidad de ocupar un estado de energía ε en un sistema de partículas que se encuentra a la temperatura T , la probabilidad es mayor si las partículas son bosones, y la probabilidad es menor si las partículas son fermiones. Y que la probabilidad de partículas distinguibles es un valor intermedio a los dos anteriores. (Sugerencia: utilice las distribuciones de Bose-Einstein, de Maxwell-Boltzmann y de Fermi-Dirac para el mismo factor e^α para la misma energía ε y la misma temperatura T y demuestre que: $n_{Bose}(\varepsilon) > n_{Boltz}(\varepsilon) > n_{Fermi}(\varepsilon)$)

Solución:

Para calcular la probabilidad de ocupar un estado de energía ε en un sistema de partículas distinguibles se utiliza la distribución de Boltzmann:

$$n_{Boltz}(\varepsilon) = \frac{1}{e^\alpha e^{\varepsilon/kT}}$$

Para calcular la probabilidad de ocupar un estado de energía ε en un sistema de fermiones se utiliza la distribución de Fermi-Dirac:

$$n_{Fermi}(\varepsilon) = \frac{1}{e^\alpha e^{\varepsilon/kT} + 1}$$

Para calcular la probabilidad de ocupar un estado de energía ε en un sistema de bosones se utiliza la distribución de Bose-Einstein:

$$n_{Bose}(\varepsilon) = \frac{1}{e^\alpha e^{\varepsilon/kT} - 1}$$

Si queremos encontrar una relación entre ellas, podemos partir de:

$$1 > 0$$

Sumar a ambos lados el término positivo $e^\alpha e^{\varepsilon/kT}$:

$$e^\alpha e^{\varepsilon/kT} + 1 > e^\alpha e^{\varepsilon/kT}$$

Reacomodamos:

$$\frac{1}{e^\alpha e^{\varepsilon/kT}} > \frac{1}{e^\alpha e^{\varepsilon/kT} + 1}$$

Así llegamos a tener la relación entre la desigualdad de Fermi-Dirac y Boltzmann:

$$n_{\text{Boltz}}(\varepsilon) > n_{\text{Fermi}}(\varepsilon) \quad (I)$$

Y de la misma manera podemos partir de:

$$0 > -1$$

Sumar a ambos lados el término positivo $e^\alpha e^{\varepsilon/kT}$:

$$e^\alpha e^{\varepsilon/kT} > e^\alpha e^{\varepsilon/kT} - 1$$

Reacomodamos:

$$\frac{1}{e^\alpha e^{\varepsilon/kT} - 1} > \frac{1}{e^\alpha e^{\varepsilon/kT}}$$

Así llegamos a tener la relación entre la desigualdad de Fermi-Dirac y Boltzmann:

$$n_{\text{Bose}}(\varepsilon) > n_{\text{Boltz}}(\varepsilon) \quad (II)$$

De (I) y (II):

$$n_{\text{Fermi}}(\varepsilon) < n_{\text{Boltz}}(\varepsilon) < n_{\text{Bose}}(\varepsilon)$$

Así hemos demostrado que la probabilidad de ocupar un estado de energía ε en un sistema de partículas que se encuentra a la temperatura T , la probabilidad es mayor si las partículas son bosones, y la probabilidad es menor si las partículas son fermiones. Y la probabilidad de las partículas distinguibles es un valor intermedio a los dos anteriores.

Problemas propuestos

Problema 1: ¿Qué tipo de funciones de onda describen las partículas que cumplen el principio de exclusión de Pauli? Demuestre que dos de estas partículas no pueden coexistir en el mismo estado cuántico.

Problema 2: ¿Dos partículas descritas por funciones de onda simétricas tienen mayor o menor probabilidad de encontrarse en el mismo estado cuántico respecto a dos partículas clásicas? (Sugerencia: compare la densidad de probabilidad simétrica con la densidad clásica).

Problema 3: Demuestre que la probabilidad de que tres bosones se encuentren en el mismo estado es 6 veces más grande que la probabilidad clásica.

Problema 4: La función de distribución de Fermi-Dirac puede escribirse como:

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1} = \frac{1}{\exp\left(\left(\frac{E}{E_F} - 1\right)\frac{T_F}{T}\right) + 1}$$

donde $T_F = E_F / k$ es la *Temperatura de Fermi*. Graficar $f(E)$ en función de E/E_F para los siguientes valores de temperatura: $T = 0,1 T_F, 0,2 T_F, 0,5 T_F$.

Problema 5: Calcule la probabilidad de que un estado 0,073 eV por arriba de la energía de Fermi esté ocupado para las temperaturas: $T = 0$ K, $T = 320$ K.

Problema 6: La energía de Fermi de la plata es de 5,5 eV. (a) ¿Cuáles son las probabilidades que los estados con energías siguientes estén ocupados a 273 K: 4,4 eV; 5,4 eV, 6,4 eV? (b) ¿A qué temperatura la probabilidad de ocupación del estado de 5,6 eV de energía es 0,16?

Apéndice

Distribución de Maxwell–Boltzmann empleando el formalismo de la mecánica estadística

En nuestro análisis, como ya mencionamos anteriormente consideraremos un sistema de N partículas idénticas distinguibles. Para calcular la probabilidad de una dada configuración o sea de un determinado conjunto n_1, n_2, \dots de partículas supondremos que los niveles de energía E_1, E_2, \dots tienen la misma probabilidad de ser ocupados es decir no hay estados privilegiados. Evaluaremos el número de maneras de colocar n_i partículas en el primer nivel de energía E_1 . Para empezar a ocupar el primer nivel podemos escoger la primera partícula de las N disponibles es decir hay N formas distinguibles de realizarlo, para la segunda partícula hay $(N - 1)$ maneras; para la tercera $(N - 2)$ modos distinguibles y así siguiendo. Por lo tanto, para n_1 partículas tendría

$$N(N - 1) \dots \dots (N - n_1 + 1) = \frac{N!}{(N - n_1)!} \quad (\text{A9.1})$$

Como ya mencionamos en nuestro análisis previo, el orden en que hemos puesto las partículas en un dado nivel de energía es irrelevantes es decir que las partículas se pueden permutar y ordenar de diferente manera, pero todas corresponden a la misma forma (configuración) de distribuir la energía del sistema. Si se tiene en cuenta lo antes mencionado los modos distinguibles de poner n_1 partículas en el nivel E_1 resulta:

$$\frac{N!}{n_1! (N - n_1)!} \quad (\text{A9.2})$$

A continuación, consideraremos el segundo nivel de energía E_2 . En este caso disponemos de $(N - n_1)$ partículas y el número de maneras de colocar n_2 partículas en el nivel E_2 resulta:

$$\frac{(N-n_1)!}{n_2! (N-n_1-n_2)!} \quad (\text{A9.3})$$

y para el nivel E_3 está dada por

$$\frac{(N-n_1-n_2)!}{n_3! (N-n_1-n_2-n_3)!} \quad (\text{A9.4})$$

De manera análoga podríamos ubicar todas las partículas en todos los niveles de energía. Finalmente, la probabilidad P de localizar las N partículas en los niveles disponibles a partir de las ecuaciones anteriores está dado por:

$$P = \frac{N!}{n_1! (N-n_1)!} \frac{(N-n_1)!}{n_2! (N-n_1-n_2)!} \frac{(N-n_1-n_2)!}{n_3! (N-n_1-n_2-n_3)!} \dots = \frac{N!}{n_1! n_2! n_3! \dots} = N! \prod_i \frac{1}{n_i!} \quad (\text{A9.5})$$

donde i varía sobre todos los niveles de energía posibles.

Para generalizar nuestro análisis a continuación eliminaremos la restricción de que todos los niveles de energía tengan la misma probabilidad de ser ocupados y consideraremos que poseen probabilidades intrínsecas diferentes que denominaremos g_i . En una descripción cuántica g_i será la degeneración del nivel dado que para algún nivel de energía aparecen desdoblamientos que corresponden por ejemplo al spin. Si g_i es la probabilidad intrínseca de encontrar una partícula en el nivel E_i y $g_i n_i$ será la probabilidad intrínseca de encontrar n_i partículas en E_i . Entonces la expresión de la probabilidad P dada por ecuación (A.9.5) debe ser reescrita y está dada por:

$$P = \frac{N! g_1^{n_1} g_2^{n_2} \dots}{n_1! n_2! n_3! \dots} = N! \prod_i \frac{g_i^{n_i}}{n_i!} \quad (\text{A9.6})$$

Para hallar la configuración más probable debemos obtener la distribución de n_i que hace máximos P , dado que este es proporcional a la probabilidad, o sea debemos imponer

$$dP = 0 \quad (\text{A9.7})$$

ante variaciones dn_i . Por otra parte, será conveniente utilizar la fórmula de Stirling:

$$\ln n! \cong n \ln n - n \quad (\text{A9.8})$$

que es válida cuando el número n es grande

Teniendo en cuenta que trabajamos con sistemas con muchas partículas (n_i grande) entonces:

$$\begin{aligned} \ln P &= \ln N! + n_1 \ln g_1 + n_2 \ln g_2 + \dots - \ln n_1! - \ln n_2! - \dots \cong \\ &\cong \ln N! + \sum_i n_i \ln g_i - \sum_i n_i \ln n_i + \sum_i n_i \end{aligned} \quad (\text{A9.9})$$

O sea

$$\ln P \cong \ln N! + N - \sum_i n_i \ln \left(\frac{n_i}{g_i} \right) \quad (\text{A9.10})$$

La condición $dP = 0$ es equivalente a $d(\ln P) = 0$

$$d(\ln P) = - \sum_i \ln \left(\frac{n_i}{g_i} \right) dn_i - \sum_i n_i \frac{g_i}{n_i^2 g_i} dn_i = - \sum_i \left[\ln \left(\frac{n_i}{g_i} \right) + 1 \right] dn_i = 0 \quad (\text{A9.11})$$

Dado que dn_i no son todos linealmente independientes ya que deben satisfacerse las relaciones dadas por Ecs. (9.23) y (9.24) en las cuales el número total de partículas N y la energía

total del sistema de partículas U son constante entonces en la Ec. (A.9.11) no podemos anular cada término. Se utiliza para resolver este tipo de problema el método de los multiplicadores de Lagrange. De Ec. (9.23) resulta:

$$\sum_i dn_i = 0 \quad (\text{A9.12})$$

y por lo tanto:

$$\alpha \sum_i dn_i = 0 \quad (\text{A9.13})$$

cualquiera sea α .

A su vez, de ecuación (9.24) resulta:

$$\sum_i E_i dn_i = 0 \quad (\text{A9.14})$$

y por lo tanto:

$$\beta \sum_i E_i dn_i = 0 \quad (\text{A9.15})$$

cualquiera sea β .

Si sumamos las Ecs. (A.9.13), (A9.15) a Ec. (A9.11) y considerando Ec. (A9.12) resulta

$$\sum_i \left[\ln \left(\frac{n_i}{g_i} \right) + \alpha + \beta E_i \right] dn_i = 0 \quad (\text{A9.16})$$

Si a continuaciones consideramos que n_1 y n_2 son dependientes de los restantes (la elección n_1 y n_2 es arbitraria) y los restantes n_i son arbitrarios. Ahora, elegimos α y β de manera que anulen los coeficientes de dn_1 y dn_2 en la ecuación (A.9.16), resultando

$$\ln \left(\frac{n_1}{g_1} \right) + \alpha + \beta E_1 = 0 \quad (\text{A9.17})$$

$$\ln \left(\frac{n_2}{g_2} \right) + \alpha + \beta E_2 = 0 \quad (\text{A9.18})$$

la ecuación (A.9.16) queda

$$\sum_{i=3} \left[\ln \left(\frac{n_i}{g_i} \right) + \alpha + \beta E_i \right] dn_i = 0 \quad (\text{A9.19})$$

donde los dn_i son linealmente independientes, luego

$$\ln \left(\frac{n_i}{g_i} \right) + \alpha + \beta E_i = 0 \quad i = 3, 4, \dots \quad (\text{A9.20})$$

Considerando la ecuación anterior y las expresiones (A.9.17) y (A.9.18) resulta:

$$\ln \left(\frac{n_i}{g_i} \right) + \alpha + \beta E_i = 0 \quad \text{para todo } i \quad (\text{A9.21})$$

De aquí es posible despejar n_i correspondiente a la configuración más probable:

$$n'_i = g_i e^{-(\alpha + \beta E_i)} \quad (\text{A9.22})$$

Luego considerando que el número total de partículas N es constante podemos determinar el valor de la constante α :

$$N = \sum_i n'_i = e^{-\alpha} \sum_i g_i e^{-\beta E_i} \quad (\text{A9.23})$$

de donde surge que:

$$e^{-\alpha} = \frac{N}{\sum_i g_i e^{-\beta E_i}} \quad (\text{A9.24})$$

Si reemplazo la expresión (A9.24) en (A.9.23) resulta la distribución de Maxwell Boltzmann

$$n'_i = \frac{N g_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i g_i e^{-\beta E_i}} \quad (\text{A9.25})$$

donde la suma se debe realizar sobre todos los niveles de energía posible. El parámetro $\beta = \frac{1}{kT}$ donde T es la temperatura absoluta y k es la constante de Boltzmann ($k = 1,38 \cdot 10^{-16} \text{erg K}^{-1} = 8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$) y A ($A = e^{-\alpha}$) es una constante, entonces la distribución para una dada energía puede ser re-escrita como:

$$n'(E) = A g(E) e^{-\frac{E}{kT}} \quad (\text{A9.26})$$

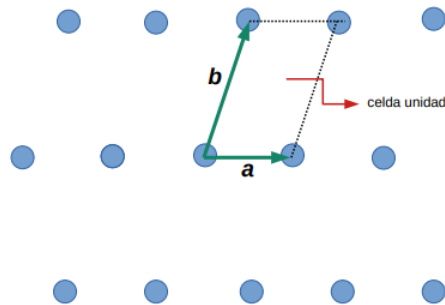
CAPÍTULO 10

Teoría de Bandas

Estructura periódica de los sólidos

En los materiales sólidos, idealmente, los átomos ocupan posiciones fijas en el espacio, a diferencia de los líquidos o los gases en los cuales los átomos se pueden mover. En los denominados sólidos cristalinos, estas posiciones atómicas, además, forman estructuras que se llaman periódicas. Una estructura es periódica cuando partiendo de un volumen lo más pequeño posible, con alguna forma, al trasladarlo en el espacio repetidamente siguiendo la dirección de tres vectores no coplanares se puede llenar todo el espacio, sin huecos ni superposiciones, como se muestra en la Fig. 10.1 para el caso de dos dimensiones. Entonces, el arreglo de átomos que caben dentro de ese volumen inicial, que se llama *celda unidad*, se repite en forma infinita siguiendo esas tres direcciones que llamaremos vectores \mathbf{a} , \mathbf{b} y \mathbf{c} , y a cuyos módulos llamaremos *constantes de red*. La periodicidad de la red implica a su vez, periodicidad en cualquier magnitud física, ya que, al desplazarse, por ejemplo, de una celda unidad a otra vecina, si nos paramos por ejemplo en algún átomo (aunque vale para cualquier punto de la celda), este átomo tendrá exactamente el mismo entorno de átomos vecinos, en distancia y dirección, por lo tanto, será físicamente equivalente a ese mismo átomo en cualquier otra celda.

Figura 10.1



Nota. Arreglo periódico de átomos en dos dimensiones, donde se muestran las constantes de red \mathbf{a} y \mathbf{b} , junto con la celda unidad. Trasladando la celda unidad se llena todo el espacio sin superposiciones

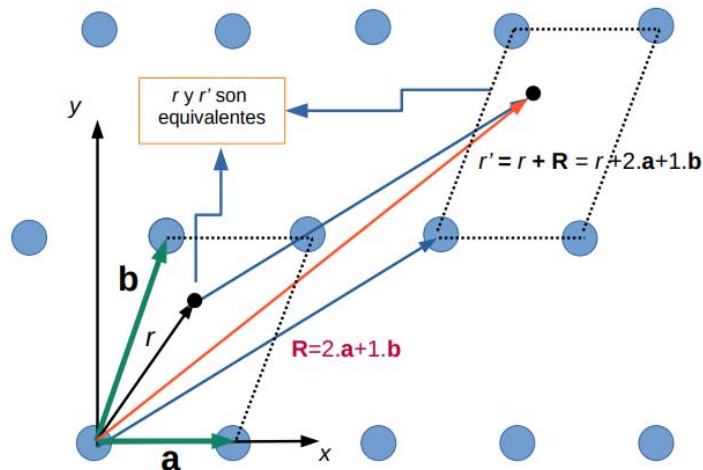
Esta situación se ejemplifica en la Fig. 10.2 para el caso de una red bidimensional. En el caso más general de una red en tres dimensiones, llamando \mathbf{r} a la posición de un punto cualquiera

dentro de una celda unidad, al desplazarse desde este punto en una dirección $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c}$ llegaremos a un *punto equivalente* dentro de otra celda unidad, desplazada n_1 veces en la dirección de \mathbf{a} , n_2 veces en la dirección de \mathbf{b} y n_3 veces en la dirección de \mathbf{c} , donde n_1 , n_2 y n_3 son números enteros. De esta forma entonces, cualquier magnitud física $U(\mathbf{r})$ debe cumplir:

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}) \quad (10.1)$$

En particular, el potencial eléctrico generado por los núcleos atómicos de carga positiva tendrá la periodicidad de la red conforme a la Ec. (10.1). Notemos que la escala de la periodicidad será del tamaño de la celda unidad (en cada dirección, las magnitudes de \mathbf{a} , \mathbf{b} y \mathbf{c}), y para la gran mayoría de los materiales, este tamaño es del orden de los pocos ángstroms (recordemos: $1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m}$). Así, a escalas tan pequeñas, resulta esencial el uso de la mecánica cuántica para analizar el efecto de la periodicidad del potencial eléctrico sobre los electrones y sus niveles de energía.

Figura 10.2



Nota. Equivalencia entre los puntos \mathbf{r} y \mathbf{r}' separados por un vector \mathbf{R} construido como una combinación lineal de los vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} con números enteros $n_1 = 2$ y $n_2 = 1$.

Hay que remarcar que la periodicidad perfecta es una idealización. Los materiales sólidos cristalinos nunca son absolutamente puros, y en los alrededores de los átomos distintos, las llamadas *impurezas*, el entorno no es igual y la periodicidad se rompe. Además, siempre hay una baja probabilidad (que depende de la temperatura) de encontrar sitios con átomos ausentes (*vacancias*), o átomos desplazados de su lugar (*intersticiales*, se los considera también una impureza). Finalmente, los átomos tampoco están quietos, ni siquiera a la temperatura de 0 K (por el principio de incertidumbre de Heisenberg, si supiéramos que un átomo lo está, no se sabría dónde es su cantidad de movimiento). A temperatura finita los núcleos pueden *oscilar alrededor de su posición de equilibrio* (la *agitación térmica* es radicalmente diferente en los sólidos, en comparación con líquidos y gases). La amplitud de estas oscilaciones es pequeña

pero creciente con la temperatura, de manera tal que en determinado momento este movimiento puede llegar a romper la estructura produciendo una transformación de fase. Todas estas características son de enorme trascendencia en los materiales y dan lugar a fenómenos muy importantes. Sin embargo, por la complejidad de su tratamiento matemático, es conveniente estudiarlas como *pequeñas perturbaciones sobre un material periódico perfecto*.

Modelo de Kronig-Penney

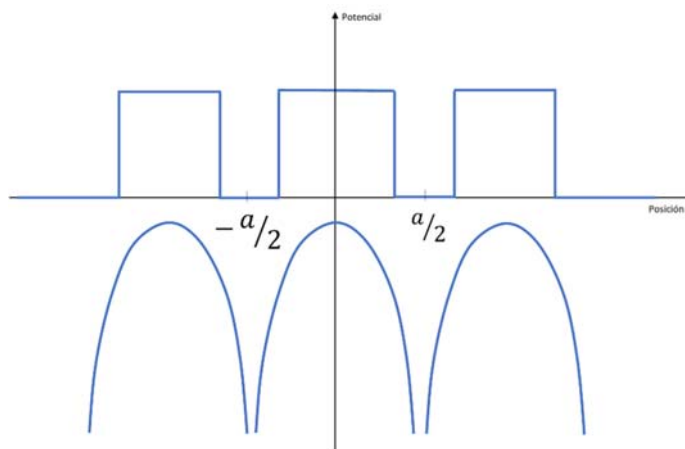
En capítulos anteriores se estudiaron dos situaciones en las que, la acción de confinar un electrón en un potencial eléctrico a una región delimitada del espacio conlleva a uno de los resultados más destacados de la Mecánica Cuántica: cuando se *confina* (o *localiza*), en este caso un electrón, se pierde la libertad de asignarle la energía inicial libremente, como sí podríamos hacerlo en un sistema clásico, donde podemos fijar la energía mecánica con entera libertad. En estos últimos, las condiciones iniciales son libremente elegidas entre números reales continuos, mientras que, en los sistemas regidos por la mecánica cuántica, sólo ciertos valores discretos son posibles. Así, se estudió el caso del pozo de potencial (infinito y finito), y también el átomo hidrogenoide, casos en los que se vio cómo aparece naturalmente esta discretización en los valores posibles de la energía. *¿Qué pasará con la energía cuando el potencial no es un único pozo, sino un arreglo periódico de pozos? ¿Está el electrón confinado cuando está en un potencial periódico, o no?* En la Fig. 10.3 podemos ver un caso simplificado de un potencial periódico en una sola dimensión. Imaginemos una cadena lineal infinita de átomos situados en $\frac{a}{2}$, $\frac{a}{2} + a$, $\frac{a}{2} + 2a$, etc. (red periódica unidimensional con constante de red a), y lo mismo en la dirección negativa. Los potenciales de Coulomb divergen asintóticamente en esas coordenadas donde están situados los núcleos. Si depositamos un electrón en uno de estos pozos, con energía negativa (ver Fig. 10.3), no podemos decir a priori que el electrón está completamente confinado como en un pozo de potencial de paredes infinitas o en un átomo único de hidrógeno. El electrón puede pasar por efecto túnel, dependiendo del espesor de la barrera (la distancia a) y la altura (la diferencia entre su energía y la del máximo del potencial). Así, dado que no está completamente confinado, podríamos en principio esperar que el resultado para los niveles de energía sea una combinación entre la discretización, y el continuo, dependiendo del grado de confinamiento: que el efecto de la discretización sea mayor en los electrones que tienen menos chance de atravesar la barrera (estarían mejor confinados los que tienen niveles de energía más profundos) que los que están sometidos a una barrera menor (los que tengan energías negativas más cercanas al máximo del potencial estarán menos confinados). Veremos que, efectivamente esto es lo que ocurre, con la aparición de *bandas de energía* y su *espesor relativo*.

Para dar un tratamiento matemático más simple que el que requeriría la situación real, de forma tal de obtener resultados cualitativos, en la parte de arriba de la Fig. 10.3 se muestra una primera aproximación al potencial real, simulándolo como un conjunto periódico de pozos de potencial rectangulares finitos. Si bien los resultados solo serán aproximados, el uso de este

potencial tiene dos ventajas: a) la ecuación de Schrödinger ya la hemos resuelto en un pozo de potencial y b) el efecto del confinamiento parcial al que hacíamos referencia está bien presente también con esta aproximación. No olvidemos que el problema real es mucho más complejo, no solo por la forma del perfil del potencial de Coulomb generado por los núcleos positivos, que aquí simplemente se han reemplazado por paredes verticales, sino que fundamentalmente el problema de los electrones en un sólido es lo que se llama en física: *“un problema de muchos cuerpos”*: un electrón no solamente se ve relativamente confinado por el potencial atractivo de los núcleos en posiciones fijas, *sino que también existen otros términos de potencial eléctrico repulsivos, dados por las interacciones electrón-electrón con todos los otros electrones que conforman el sólido*. No es posible fabricar un sistema con un potencial periódico con un solo electrón. Más bien se genera un potencial periódico acercando o mezclando estequiométricamente los compuestos químicos hasta conformar un sólido, y en cada uno de ellos ya están presentes los electrones correspondientes para que cada uno de los átomos sea neutro. Por ende, experimentalmente los demás electrones siempre están, y su influencia no es despreciable. Si bien la combinación de ambos términos, el atractivo y el repulsivo, también pueden tratarse con un *“potencial efectivo”* periódico $U'(r)$, la selección de cuál es el mejor potencial para describir esta situación es por demás compleja, y requeriría estudios mucho más profundos.

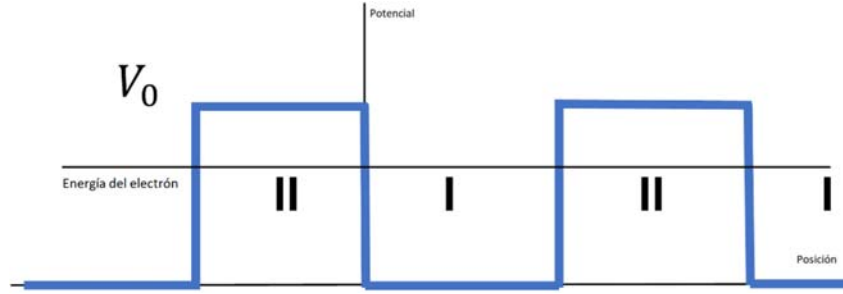
Para simplificar los cálculos entonces, analicemos un electrón en un potencial unidimensional periódico como el de la Fig. 10.4:

Figura 10.3



Nota. Potencial periódico unidimensional producido por una cadena infinita de átomos localizados a una distancia “ a ”. . Parte inferior: el potencial de Coulomb producido por los núcleos atómicos. Parte superior: Simplificación del anterior como un arreglo periódico de pozos de potencial tipo escalón.

Figura 10.4



Nota. Potencial periódico unidimensional tipo arreglo de barreras de altura V_0 que simula una cadena de átomos: las regiones marcadas como I corresponden a los sitios ocupados por los iones positivos de los núcleos, y las regiones marcadas como II el espacio intersticial.

En él se pueden observar dos regiones: La región I es el espacio donde están los iones y tiene longitud a , y la región II el lugar entre los iones de largo b . La constante de red l satisface: $l = a + b$. En este arreglo periódico de pozos con energía potencial de altura V_0 el electrón debe satisfacer la ecuación de Schrödinger:

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

En la región I, $V(x) = 0$, mientras que en la región II, $V(x) = V_0$, quedando:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E)\psi = 0 \quad \text{región I}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)\psi = 0 \quad \text{región II}$$

Estas ecuaciones ya las resolvimos en capítulos anteriores, quedando como soluciones:

$$\psi_I = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} \quad \text{con } \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2},$$

$$\psi_{II} = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} \quad \text{con } \beta = \left(\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

Los coeficientes A, B, C y D se determinan a partir de condiciones de continuidad en las fronteras de las regiones para la función y su derivada ($\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$, $\psi_I(a) = \psi_{II}(a)$, $\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0)$, $\psi'_I(a) = \psi'_{II}(a)$), junto con la condición de normalización nos queda:

$$A + B = C + D \quad (10.2)$$

$$i\alpha(A - B) = \beta(C - D) \quad (10.3)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi = 1$$

Sin embargo, estas son solo soluciones para las regiones I y II, mientras que lo que buscamos son las soluciones para toda la red periódica. Con el fin de encontrar la solución general, recurrimos al Teorema de Bloch, del cual solo enunciaremos el caso unidimensional:

La función de onda ψ solución de la ecuación de Schrödinger de una partícula en una red periódica e infinita cuyo potencial satisface $U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r})$ con $\vec{R} = n\vec{l}$ puede escribirse como el producto de dos funciones:

$$\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$$

donde $u_k(x)$ tiene la misma periodicidad que el potencial: $u_k(x + nl) = u_k(x)$

Utilizando este teorema, surge inmediatamente que:

$$\psi_k(x + l) = \psi_k(x)e^{ikl}$$

Es decir, la función de onda en la celda vecina $x + l$ es igual a aquella en x , pero multiplicada por un número complejo de módulo uno que solo produce un cambio de fase: e^{ikl} . Efectivamente, cuando dijimos que en un potencial periódico todas las magnitudes físicas deberían tener el mismo período que el potencial, *eso excluye a la función de onda $\psi(x)$ ya que ésta no es un observable*, por lo tanto, no es una magnitud física. En cambio, *su módulo cuadrado sí es observable*, y se cumple:

$$\psi^*_k(x + l)\psi_k(x + l) = \psi^*_k(x)e^{-ikl}\psi_k(x)e^{ikl} = \psi^*_k(x)\psi_k(x)$$

con la cual, el módulo cuadrado de la función de onda sí tiene la misma periodicidad que la red.

Vamos entonces a utilizar el Teorema de Bloch, notando que (ver Fig. 10.4) el punto $x = -b$ está a una distancia l del punto $x = a$:

$$\psi_{I,k}(-b) = \psi_{II,k}(-b)$$

por continuidad y:

$$\psi_{II,k}(-b) = \psi_{II,k}(a)e^{ikl}$$

por Teorema de Bloch, entonces:

$$Ae^{-i\alpha b} + Be^{i\alpha b} = (Ce^{\beta a} + De^{-\beta a})e^{ikl}$$

Igualmente, para la continuidad de las derivadas y usando el teorema de Bloch:

$$-i\alpha(Ae^{-i\alpha b} - Be^{i\alpha b}) = \beta(Ce^{\beta a} - De^{-\beta a})e^{ikl}$$

En resumen, se tiene el siguiente conjunto de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas. Para que el sistema tenga una solución no trivial, su determinante debe ser nulo. Realizando los cálculos del determinante de la matriz de 4x4 e igualando a cero, luego de reacomodar queda:

$$\cos(kl) = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \text{sen}(\alpha a) \text{senh}(\beta b) + \cos(\alpha a) \text{cosh}(\beta b) \quad (10.4)$$

con

$$\alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} \quad \text{y} \quad \beta = \left(\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right)^{1/2} \quad (10.5)$$

Al ser el miembro izquierdo de la Ec. (10.4) un coseno, las únicas soluciones posibles serán las hagan que el miembro derecho esté entre -1 y 1. Podríamos rescribir la Ec. (10.4) en términos

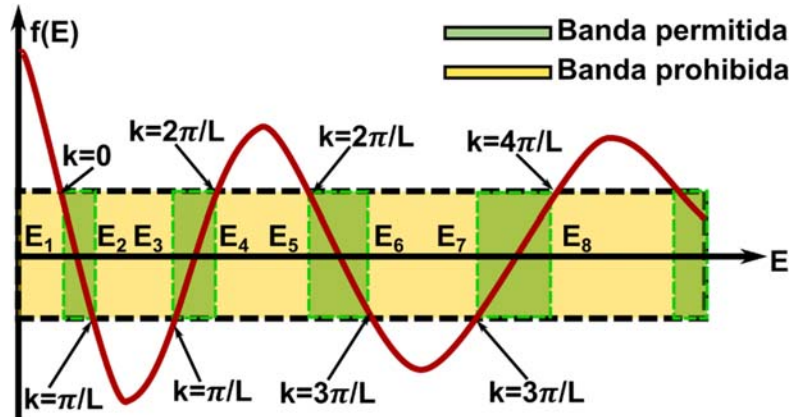
de la Ec. (10.5) para ver en forma explícita la dependencia con la energía. Sustituyendo y simplificando queda:

$$\cos(kl) = \frac{V_0}{(E(V_0-E))^{\frac{1}{2}}} \operatorname{sen}\left(a \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right) \operatorname{senh}\left(b \left(\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right) + \cosh\left(b \left(\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right) \cos\left(a \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right) = F(E)$$

Luego, esta función $F(E)$ podemos graficarla en función de E , y observar en qué regiones queda acotada $-1 \leq F(E) \leq 1$. Para ello debemos darle valores a V_0 , a y b , los cuales dependerán del problema en cada caso. Sin embargo, más allá de los valores elegidos, se obtendrán gráficos del tipo de la Fig. 10.5. Como puede observarse, la gráfica de $F(E)$ tiene regiones marcadas en color verde en donde satisface $-1 \leq F(E) \leq 1$, para un continuo de valores de energía E , pero dentro de un cierto rango. Por ejemplo, entre E_1 y E_2 , entre E_3 y E_4 , etc. Esas regiones de energía es lo que se llaman en forma abreviada “bandas”, en realidad, “*bandas permitidas*”, mientras que en las regiones donde $F(E) < -1$ o $F(E) > 1$, no hay valores de E que satisfagan la ecuación anterior, como por ejemplo la región entre E_2 y E_3 . Esas regiones se llaman “*bandas prohibidas*”, en color amarillo. Aparece entonces el efecto del que hablamos al principio de esta sección: el electrón en un arreglo de pozos de potencial periódico no está ni libre ni confinado. Está en una situación intermedia, y su grado de confinamiento dependerá de la altura de la barrera y de su espesor (en este tratamiento V_0 y b respectivamente). Así, su espectro de energías no es continuo ni discreto. Forma bandas de valores continuos permitidos, ¡separadas en forma discreta! En la Fig. 10.5 puede verse también, que los niveles de energías menores (electrón con un nivel de energía menor, menos probable que pueda escapar por efecto túnel, por ende, mayor grado de confinamiento) tienen bandas cuyo espesor es menor, es decir, se parecen más al caso discreto. Lo contrario ocurre para los electrones con energías más altas, más cercanas al valor de la barrera V_0 . Éstos tienen un grado de confinamiento menor, ya que tienen mayor probabilidad de hacer túnel en la barrera y pasar a la celda vecina. Sus bandas tienen un espesor mucho mayor, pareciéndose más al caso de niveles continuos de energía. Al espesor de las bandas, se lo llama “*dispersión*”.

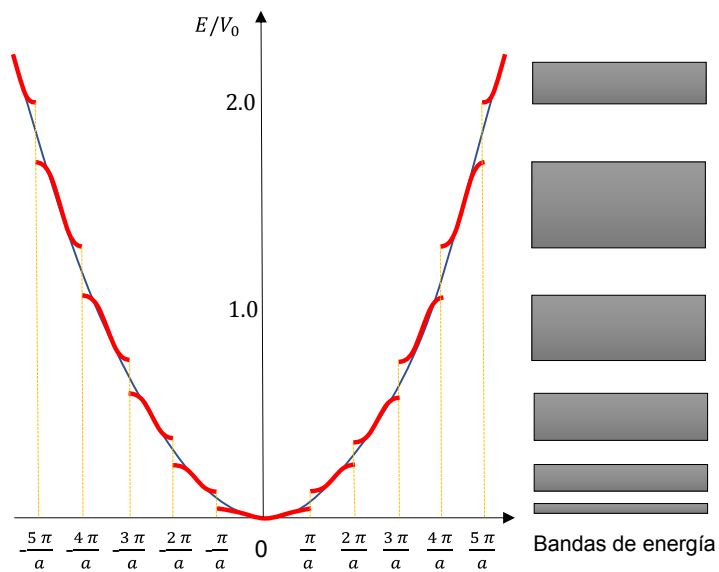
A partir de la Fig. 10.5 se puede generar una gráfica de la energía E del electrón en función del número de onda k . El gráfico está superpuesto con una parábola (línea a trazos) que corresponde al caso de un electrón libre, ya para él la energía es simplemente: $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Los niveles de energía para el electrón en el potencial periódico (línea llena) se aplanan cuando k se acerca por izquierda o por derecha a $n\frac{\pi}{a}$ con n entero. Y en esos puntos se presentan discontinuidades en la función. El intervalo comprendido en la discontinuidad son las “bandas prohibidas”. En la sección siguiente analizaremos *el efecto de estos aplanamientos en el comportamiento inercial del electrón*.

Figura 10.5



Nota. Gráfica de la función $F(E)$ donde se marca en verde las regiones “permitidas” donde se cumple $-1 \leq F(E) \leq 1$, y las regiones “prohibidas” en las que o bien $F(E) > 1$ o bien $F(E) < -1$.

Figura 10.6



Nota. Valores de E/V_0 en función de k . La línea de puntos muestra los niveles continuos (parábola) de un electrón libre, mientras que la línea continua presenta discontinuidades o saltos, correspondientes a las bandas prohibidas.

Masa efectiva

¿Cómo se mueve un electrón perteneciente a una red periódica cuando es sometido a una fuerza eléctrica, dada por un campo eléctrico externo E ? Conforme a la segunda ley de Newton,

la fuerza aplicada por el campo sobre el electrón debe igualar al cambio en el tiempo en su cantidad de movimiento:

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}$$

Veamos cómo aplicar esta ecuación dentro del campo de la mecánica cuántica. Consideremos primeramente un electrón libre. De acuerdo con el principio de Heisenberg, si conociéramos su velocidad con precisión, no podríamos tener idea de dónde está. Es por ello por lo que describimos al electrón como un “paquete de ondas”, lo que lo localiza en forma aproximada, al mismo tiempo de que perdemos un poco de información de su velocidad. Para formar un tal paquete, y que la extensión espacial no sea infinita, hace falta combinar ondas con un rango de velocidades, conforme a lo que hemos aprendido con las Transformaciones de Fourier. Esta cuestión fue abordada en el capítulo “Propiedades ondulatorias de la materia”. Así, cuando tratamos a un electrón, no hablamos de su velocidad (la cual no está bien determinada), sino de su velocidad de grupo: $v_g = \frac{d\omega}{dk}$. Recordando que, para un electrón libre, su energía toma el valor:

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega$$

Así, la velocidad de grupo es: $v_g = \frac{d\omega}{dk} = 2 \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{m}$. Nótese la similitud de esta ecuación con la definición clásica de cantidad de movimiento $p = mv$.

Ahora, consideremos un electrón de carga q en una red periódica unidimensional cuya energía es $\epsilon(k)$ y sometido a un campo eléctrico externo \mathbf{E} . El cambio en la cantidad de movimiento $p = \hbar k$ del electrón respecto al tiempo t es:

$$\frac{dp}{dt} = \hbar \frac{dk}{dt} = qE \quad (10.6)$$

Pero $\epsilon = \hbar\omega$, entonces: $d\epsilon = \hbar d\omega = \hbar v_g dk \Rightarrow v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon}{dk}$

Derivando ambos miembros:

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2\epsilon}{dt dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2\epsilon}{d^2k} \frac{dk}{dt}$$

Ahora usando la Ec. 10.6:

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2\epsilon}{d^2k} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\epsilon}{d^2k} qE$$

Y si pensamos en la 2° Ley de Newton, la ecuación anterior puede escribirse en función de la “masa efectiva” m^* del electrón como:

$$\frac{dv_g}{dt} = qE/m^* = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\epsilon}{d^2k} qE$$

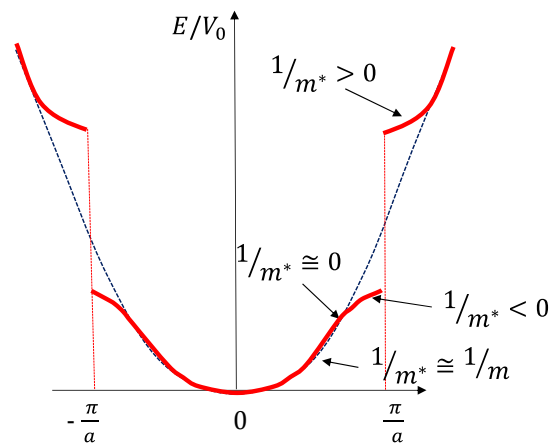
Por lo que definimos la masa efectiva:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2\epsilon}{d^2k}} \quad \text{ó:} \quad \frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\epsilon}{d^2k}$$

Nótese, que la masa efectiva es una constante dividida por la curvatura de ϵ . En la Fig. 10.7 se muestra en forma ampliada la primera discontinuidad de ϵ/V_0 . En el centro de la figura, para

$k \approx 0$, $\epsilon(k)$ es aproximadamente igual a la curva del electrón libre, es decir, tiene forma parabólica. De este modo $m^* \approx m$ y el electrón responde al campo externo E esencialmente como si estuviese libre y como una partícula clásica. Sin embargo, la curvatura de ϵ cambia de signo cuando nos alejamos de $k = 0$ y nos acercamos a los bordes de la discontinuidad con $k = \pm\pi/a$, lo que provoca cambios drásticos en m^* y por ende en su respuesta al campo externo E . En efecto, como $\frac{d^2\epsilon}{d^2k}$ se hace cero, y luego negativa a medida que vamos de $k=0$ a los extremos $k = \pm\pi/a$. Es decir, cuando $1/m^*$ se hace cero, la fuerza aplicada qE no producirá ninguna aceleración en el electrón. Y cuando $\frac{1}{m^*} < 0 \Rightarrow m^* < 0$, ¡la fuerza aplicada producirá una aceleración en dirección opuesta comparada con la que experimentaría si el electrón fuese libre!

Figura 10.7



Nota. Ampliación de la Figura 10.6 en su zona central y su primera discontinuidad. Las flechas indican las zonas donde $m^* \approx m$, donde la curvatura se anula haciendo $1/m^* = 0$ y la zona donde es cóncava hacia abajo: $1/m^* < 0$.

Enlaces químicos y comportamiento electrónico

Los materiales sólidos están formados por átomos que en general son multielectrónicos. De todos los electrones de cada átomo, sólo unos pocos participan de la interacción con los átomos circundantes, lo que se conoce como *la química* del compuesto. Solo lo hacen los que están ocupados con los números cuánticos más altos para el átomo, es decir, los de mayor energía. Esos electrones son los que forman bandas con un espesor apreciable, y resultan también los de mayor extensión espacial en su función de onda. Se los llama *electrones de valencia*. Los otros, los de menor energía están muy fuertemente ligados al núcleo, su extensión orbital es mucho más pequeña, y al estar tan lejos en energía del máximo de la barrera del potencial periódico, sus bandas son tan estrechas que se las puede considerar como niveles discretos atómicos. Se los llama *electrones de "core" (corazón)* o de *carozo*, y prácticamente no tienen

mayor injerencia en la química del compuesto que formen. También, especialmente en los elementos de la tabla periódica llamados “metales de transición”, existen electrones en una situación intermedia entre valencia y core, y se los llama *electrones de semi-core*, y en general se corresponden con el llenado parcial del número cuántico orbital *d* o “capa *d*”. También se encuentran en esta situación los elementos de la tabla periódica denominados “tierras raras”, además de los electrones que llenan parcialmente la capa *d*, los electrones provenientes del llenado parcial o incompleto del número cuántico orbital *f* o “capa *f*”.

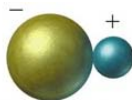
El comportamiento químico de los electrones de valencia no está signado exclusivamente por el tipo de átomo al que pertenece. Depende también de cuáles átomos están en su alrededor, de la distancia a ellos, y de qué enlaces químicos formen también los átomos vecinos con sus propios vecinos. Entre la variedad de comportamientos diferentes podríamos clasificar mayormente tres grupos, aunque esta clasificación no es absoluta ya que en general tendremos situaciones intermedias:

1- Enlaces “covalentes”: se llama así cuando la densidad de carga del electrón está distribuida en el espacio abarcando el propio átomo y un átomo vecino. Estos enlaces ocurren mayormente cuando el átomo y su vecino tienen niveles de ocupación similares en sus últimas capas, y por supuesto cuando el átomo vecino es de la misma especie. Ejemplos típicos son el Si_2 , CO_2 , H_2O . Se dice comúnmente que el electrón “se comparte”. La distribución de carga de un electrón compartido puede ser simétrica o asimétrica, dando lugar en este último caso a un momento dipolar eléctrico.



enlace covalente no polar enlace covalente polar

2- Enlaces “iónicos”: Se llama así cuando la densidad de carga de un electrón deja de estar centrada en el átomo de origen, y pasa a estarlo en un átomo vecino. Este tipo de enlaces suele darse al combinar elementos con muy diferente nivel de ocupación electrónica de las últimas capas, por ejemplo, uno que tenga uno o dos electrones en la última capa (alcalinos, alcalinotérreos) con uno que le falte uno o dos electrones para completarla (halógenos, anfígenos). Dado que los átomos son neutros, esta distribución de carga da lugar a un momento dipolar eléctrico que puede tener un rol fundamental en el comportamiento y en el ordenamiento del compuesto. Ejemplo de compuestos con este tipo de enlace son el NaCl , MgO , LiF .



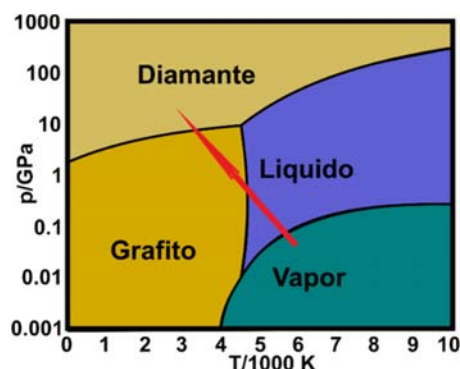
3- Enlace “metálico”: es una situación muy frecuente en la naturaleza, en la cual, uno o más electrones de un átomo se encuentran muy débilmente ligados, y pueden transitar a estados no ocupados de átomos vecinos sin barreras de potencial, de manera tal que la presencia de un mínimo campo eléctrico externo genera un inmediato desplazamiento continuo de

electrones que fluyen en la dirección opuesta al campo. Así, se los suele modelizar como un “gas de electrones”, que no interactúa con la red periódica de iones positivos, estado en que dejan a sus átomos originales. Ejemplo de ello son el sodio (Na), el cobre (Cu), el hierro (Fe), etc. Nótese que el Na en estado natural, donde tiene también vecinos Na, forma enlaces metálicos, mientras que, con vecinos Cl forma enlaces iónicos y es un aislante.

Posición y dispersión de las bandas y su relación con el comportamiento eléctrico

Para estudiar la relación entre el comportamiento eléctrico de un material con su estructura de bandas, imaginemos poder realizar *el siguiente experimento hipotético*: se tiene un contenedor con algún método de extracción de calor que en su interior contiene átomos de carbono (C) en estado gaseoso a baja densidad. Este contenedor tiene un émbolo que permitiría idealmente ir comprimiendo el gas y aumentar su densidad, de manera tal de forzarlo a hacer una transición de fase, hasta que se licue. Imaginemos más, que podemos seguir presionando de manera tal de seguir aumentando la densidad, es decir, seguir disminuyendo la distancia interatómica entre los átomos de C. Luego, al enfriar y seguir aumentando la densidad lo átomos se ordenan y pasan al estado sólido formando una red periódica. Aun así, seguimos presionando de manera tal de seguir disminuyendo la distancia C-C. En la realidad, si en vez de usar un émbolo que ejerce la fuerza en una sola dirección, usáramos presión hidrostática, que comprime en todas las direcciones, veríamos que el carbono en estado sólido también hace una transición entre dos fases sólidas diferentes: primero en fase *grafito*, y luego en fase *diamante*. Más allá de estos detalles experimentales, veamos como irían cambiando los niveles electrónicos de los carbonos cuando cambia la distancia C-C si seguimos la línea marcada en la Fig. 10.8.

Figura 10.8

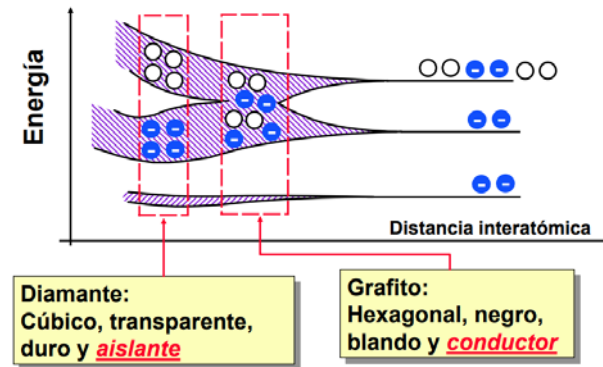


Nota. Diagrama de fases del C en función de la temperatura y la presión.

Recordemos primero la configuración electrónica del C: $1s^2 2s^2 2p^2$. En la fase gaseosa a baja densidad, la separación entre los átomos es grande, mucho mayor que el tamaño del átomo, con

lo que los niveles electrónicos se corresponden con los del átomo libre. Esto es lo que se ha observado en los espectros de emisión y absorción comentado en capítulos anteriores, y fue lo que llevó a N. Bohr a cuantificar la cantidad de movimiento angular. Ya cuando la densidad es alta, y en particular en el estado líquido, la distancia C-C es del orden de la distancia en fase sólida. Pero, los átomos aún pueden moverse. No forman enlace, y su movilidad impide contar con un potencial periódico. Como durante el proceso se va enfriando, al quitarle energía cinética los átomos pierden movilidad y comienzan a ordenarse. Se empieza a formar un potencial periódico, y la distancia C-C va disminuyendo. En esta situación, el potencial periódico no aumenta la altura de la barrera, sino que va disminuyendo el ancho de la barrera, dado principalmente por la distancia entre los núcleos atómicos. Consecuentemente, los niveles electrónicos discretos se empiezan a transformar en bandas de energía permitidas, cuya dispersión va aumentando a medida que la probabilidad de atravesar la barrera aumenta porque la barrera es más angosta. Estas bandas en realidad no son completamente continuas, ya que en la práctica no contamos con una red periódica infinita, sino que nuestro compuesto está formado por un número enorme de átomos, digamos, del orden de 1 mol, que es del orden de 10^{23} átomos. Esto hace que las bandas no sean estrictamente continuas, sino que los niveles atómicos discretos se convierten en 10^{23} subniveles que conforman la banda, los cuales para todo fin práctico puede considerarse como continuo. Ahora bien, como se ve en la Fig. 10.9, no todas las bandas son iguales. Esto es así, porque las bandas originadas en los electrones 1s y 2s están llenas: tienen todos los electrones que ocupaban los niveles discretos en el gas. Mientras que la banda originada en el nivel 2p no está llena, ya que tampoco estaba completo el nivel 2p en cada uno de los átomos en la fase gaseosa. Es decir, hay más subniveles que electrones. ¿Cómo se llenarán esos niveles? Se llenan de abajo hacia arriba. La naturaleza siempre opta por el estado de menor energía posible. Ese estado es el que llamamos *estado estacionario*, y es el que ocurre a temperatura de 0 K. Los electrones, al ser fermiones, y tener la posibilidad de ubicarse en distintos niveles, *lo harán de manera tal de ocupar los de menor energía posible*, respetando su carácter fermiónico, es decir, sólo un electrón en cada nivel de energía-espín. Así, se irán ocupando los sub-niveles de la banda 2p de abajo hacia arriba en la escala de energía, dejando a partir de un valor en más, todos los niveles vacíos. Al valor de la energía del último estado ocupado, cuando el sistema está a una temperatura de 0 K, se lo llama "*Nivel de Fermi*", en honor al gran físico romano que recibió el Premio Nobel de Física en 1938. A temperaturas finitas, el nivel de Fermi se redefinirá en otra posición. En lo que sigue nos referiremos siempre a $T = 0$ K.

Figura 10.9



Nota. Ensanchamiento y desplazamiento de las bandas del C atómico en función de la distancia interatómica C-C.

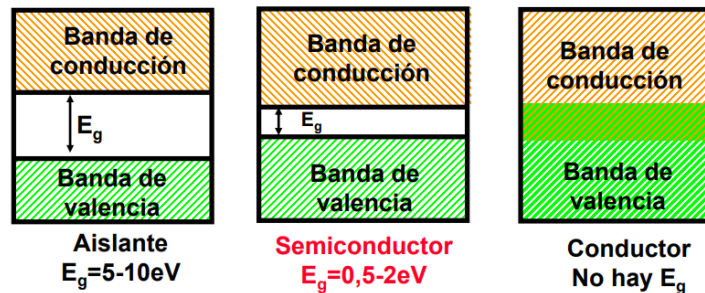
Recordemos que los electrones están ligados al núcleo, por lo tanto, su energía total es negativa (la energía potencial electrostática atractiva es negativa, y en módulo es mayor que su energía cinética). Así que, menor energía significa un número más grande con signo negativo. En lo que se ha venido trabajando hasta ahora el cero de energía generalmente se lo ubicaba en el cero de energía potencial. Así, un electrón con energía positiva es seguro que no está ligado y puede desplazarse. Sin embargo, en física del estado sólido es conveniente utilizar el valor de energía cero en otro lugar, ya que siempre hablamos de “*diferencias de energía*”, lo que nos permite situar el cero arbitrariamente. Normalmente, se pone el cero en el valor correspondiente al nivel de Fermi.

En la Fig. 10.9 se pueden ver dos situaciones diferentes: para el grafito, las bandas al ensancharse se cruzan y superponen. Como la banda superior está incompleta, el nivel de Fermi queda en algún lugar dentro de esta banda. Así, un electrón ocupando un estado dentro de la banda puede encontrar un nivel desocupado en el sitio vecino, con un nivel de energía similar, por lo que no necesita energía extra para ocuparlo. Por ende, puede desplazarse sin vencer ninguna barrera. Esto hace que los materiales cuyo nivel de Fermi cae dentro de una banda permitida, sean *eléctricamente conductores*. Así, el grafito es un buen conductor eléctrico. En cambio, en el diamante, las bandas se separaron, y la inferior está completamente llena. El nivel de Fermi está en el borde superior de esa banda. Un electrón con una dada energía dentro de esa banda no tiene sitios desocupados con la misma energía. La de arriba está completamente desocupada, entonces, para pasar a ocupar un nivel correspondiente a una localización diferente, debe superar la barrera de energía dada por la diferencia entre la energía que tiene, y la del primer nivel desocupado de la siguiente banda superior. Esto produce que estos electrones no tengan movilidad, a menos que algún agente externo le entregue la energía necesaria para pasar a un nivel desocupado de energía mayor. Por eso, los materiales como el diamante, en los que una banda está completamente llena, y la siguiente vacía, son malos conductores eléctricos. A la banda llena se la llama “*banda de valencia*”, y a las siguientes vacías “*bandas de conducción*”. A la distancia entre el nivel de Fermi (a 0 K) y el mínimo de la banda de conducción

(MBC) se lo llama “banda prohibida” (comúnmente también se emplea el vocablo anglosajón *gap*).

Las características eléctricas de un material y su aplicabilidad dependen fuertemente de qué tan grande es el espesor de la banda prohibida (o que tan grande es el gap). En base a ello se clasifican los materiales no-conductores. Si bien no existen límites muy estrechamente establecidos, se dice que cuando un material tiene un gap mayor a 5 eV, se lo considera un aislante, mientras que, para valores menores, se lo clasifica como semiconductor. En la Fig. 10.10 las bandas están representadas por rectángulos, cuya altura representa el espesor (dispersión) de la banda, y E_g simboliza la banda prohibida. Para generar una corriente eléctrica, el campo eléctrico aplicado debe aportar la energía necesaria para que un electrón de la banda de valencia pueda “excitarse” ganando energía y pasando a la banda de conducción, que es la que tiene sitios vacíos. Para bandas prohibidas mayores que 5 eV, el campo eléctrico aplicado debería ser enorme, con diferencias de potenciales de decenas de miles de voltios, con todos los inconvenientes que ellos implica, para ser capaz de producir corrientes eléctricas no despreciables. A tensiones ordinarias, estos materiales prácticamente no producen ninguna corriente, y de ahí su nombre. Sus resistividades son mayores que 100 MΩ/cm. Para los semiconductores en cambio, dependiendo del gap, pueden llegar a generarse corrientes mensurables no sólo por la aplicación de campos grandes, sino también por excitación térmica.

Figura 10.10



Nota. Clasificación de los materiales según su comportamiento eléctrico, el cual depende del espesor o inexistencia del gap.

Resumen final

En este capítulo hemos abordado algunas cuestiones muy importantes en las teorías y propiedades eléctricas de los materiales sólidos. Éstos se presentan en la naturaleza como cristales periódicos, o en algunos casos, como materiales policristalinos, que es un conjunto de cristales pequeños con diferentes orientaciones. En ambos casos, para un punto del material lejos de la superficie del cristal, las propiedades se corresponden en una muy buena aproximación a las de un arreglo periódico de átomos, por lo tanto, también los electrones están

sumergidos en un potencial eléctrico periódico. Estos electrones de los átomos constituyentes del sólido son los que signarán las propiedades químicas y eléctricas del material. El comportamiento de un electrón en un potencial de esas características, en particular, sus niveles de energía presentan características muy diferentes de las estudiadas hasta ahora en sistemas cuánticos. Los electrones presentan niveles de energías cuasi-continuos por intervalos, formando así las “bandas permitidas”, que son continuas, pero están “discretamente separadas”. Las características de estas bandas y su grado de llenado se relacionan en forma directa con el comportamiento eléctrico del material, a saber, metálico, aislante o semiconductor.

Problemas resueltos

Problema 1: En el modelo de Kronig-Penney demostrar que la probabilidad de encontrar al electrón en algún punto x dentro del primer pozo ($0 < x < a$) es igual a la probabilidad de encontrarlo en el n -ésimo pozo, en el punto $x_n = x + nL$

Solución: hallaremos la densidad de probabilidad $\psi(x)\psi^*(x)$ utilizando el Teorema de Bloch, que establece que la función de onda de cada electrón es el producto entre la función de onda de partícula libre y una función periódica $u(x)$ con igual período que el potencial: $\psi(x) = u(x)e^{ikx}$ con $u(x+L) = u(x)$

Entonces:

$$\psi(x)\psi^*(x) = u(x)e^{ikx}[u(x)e^{ikx}]^* = u(x)e^{ikx}u^*(x)e^{-ikx} = u(x)u^*(x)$$

Por otro lado:

$$\begin{aligned} \psi(x+L)\psi^*(x+L) &= u(x+L)e^{ik(x+L)}[u(x+L)e^{ik(x+L)}]^* = \\ &= u(x+L)e^{ik(x+L)}u^*(x+L)e^{-ik(x+L)} = u(x+L)u^*(x+L) = u(x)u^*(x) \end{aligned}$$

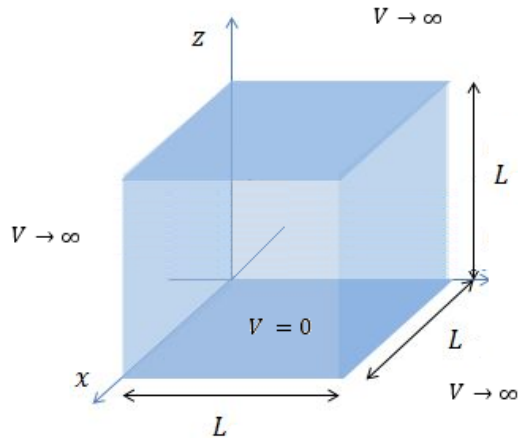
Por lo tanto:

$$\psi(x+L)\psi^*(x+L) = \psi(x)\psi^*(x)$$

Problema 2: El modelo de electrones libres para los metales supone que esos electrones están totalmente libres dentro del material, que no interactúan en absoluto con los iones ni entre sí, pero que en las superficies hay barreras infinitas de potencial. Las funciones de onda y los niveles de energía son versiones tridimensionales de las de una partícula en una caja, Suponga que la caja es un cubo de longitud L y que el potencial es nulo dentro de la caja y tiende a infinito fuera de ella. Esto es:

$$V(x, y, z) = 0 \text{ para } 0 \leq x \leq L; 0 \leq y \leq L; 0 \leq z \leq L$$

$$V(x, y, z) \rightarrow \infty \text{ para } 0 \geq x \geq L; 0 \geq y \geq L; 0 \geq z \geq L$$



Indique cuál de las siguientes funciones pueden ser una función de onda válida justificando la respuesta (verifique que cumplen con la ecuación de Schrödinger y con las condiciones de borde):

a) $\psi_1(x, y, z) = A \operatorname{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right)$

b) $\psi_2(x, y, z) = A \operatorname{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right)$

donde (n_x, n_y, n_z) es un conjunto de tres números enteros cuánticos positivos que identifican el estado.

Solución: Tenemos un electrón libre, confinado en un cubo de longitud L , con el potencial nulo dentro de la caja e infinito fuera de ella:

$$V(x, y, z) = 0 \text{ para } 0 \leq x \leq L; 0 \leq y \leq L; 0 \leq z \leq L$$

$$V(x, y, z) \rightarrow \infty \text{ para } 0 \geq x \geq L; 0 \geq y \geq L; 0 \geq z \geq L$$

La ecuación de Schrödinger dentro de la caja, donde $V(x) = 0$ es:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2\psi(x, y, z)}{dx^2} + \frac{d^2\psi(x, y, z)}{dy^2} + \frac{d^2\psi(x, y, z)}{dz^2} \right] = E \psi(x, y, z)$$

Para analizar si $\psi(x, y, z)$ es una función de onda válida, tendremos que verificar que es solución de la ecuación de Schrödinger y que cumple con las condiciones de borde. Para verificar si cumple con la ecuación de Schrödinger, derivamos la función propuesta y la reemplazamos en la ecuación de Schrödinger, en tres dimensiones.

Para analizar si cumple con las condiciones de borde, como sabemos que la función de onda debe anularse en todos los bordes, habrá que verificar que se cumple:

En las 6 caras:

$$\psi(0, y, z) = 0 \quad 0 < z < L \quad 0 < y < L$$

$$\psi(x, 0, z) = 0 \quad 0 < x < L \quad 0 < z < L$$

$$\psi(x, y, 0) = 0 \quad 0 < x < L \quad 0 < y < L$$

$$\psi(L, y, z) = 0 \quad 0 < z < L \quad 0 < y < L$$

$$\psi(x, L, z) = 0 \quad 0 < x < L \quad 0 < z < L$$

$$\psi(x, y, L) = 0 \quad 0 < x < L \quad 0 < y < L$$

En las 12 aristas:

$$\begin{aligned}\psi(0,0,z) &= 0 & 0 < z < L \\ \psi(x,0,0) &= 0 & 0 < x < L \\ \psi(0,y,0) &= 0 & 0 < y < L \\ \psi(L,L,z) &= 0 & 0 < z < L \\ \psi(x,L,L) &= 0 & 0 < x < L \\ \psi(L,y,L) &= 0 & 0 < y < L \\ \psi(0,L,z) &= 0 & 0 < z < L \\ \psi(x,L,0) &= 0 & 0 < x < L \\ \psi(0,y,L) &= 0 & 0 < y < L \\ \psi(0,L,z) &= 0 & 0 < z < L \\ \psi(x,0,L) &= 0 & 0 < x < L \\ \psi(0,y,L) &= 0 & 0 < y < L\end{aligned}$$

Y en los 8 vértices:

$$\begin{aligned}\psi(0,0,0) &= 0 \\ \psi(0,0,L) &= 0 \\ \psi(0,L,0) &= 0 \\ \psi(L,0,0) &= 0 \\ \psi(L,0,L) &= 0 \\ \psi(L,L,0) &= 0 \\ \psi(0,L,L) &= 0 \\ \psi(L,L,L) &= 0\end{aligned}$$

$$a) \psi_1(x,y,z) = A \operatorname{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right)$$

$$\text{con } k_x = \frac{n_x \pi}{L}; k_y = \frac{n_y \pi}{L} \text{ y } k_z = \frac{n_z \pi}{L}.$$

Las respectivas derivadas serán:

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial x} = A k_x \cos(k_x x) \operatorname{sen}(k_y y) \operatorname{sen}(k_z z)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} = -A k_x^2 \operatorname{sen}(k_x x) \operatorname{sen}(k_y y) \operatorname{sen}(k_z z)$$

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial y} = A \operatorname{sen}(k_x x) k_y \cos(k_y y) \operatorname{sen}(k_z z)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial y^2} = -A \operatorname{sen}(k_x x) k_y^2 \operatorname{sen}(k_y y) \operatorname{sen}(k_z z)$$

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial z} = A \operatorname{sen}(k_x x) \operatorname{sen}(k_y y) k_z \cos(k_z z)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial z^2} = -A \operatorname{sen}(k_x x) \operatorname{sen}(k_y y) k_z^2 \operatorname{sen}(k_z z)$$

Si reemplazamos en la ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2 \psi_1(x,y,z)}{dx^2} + \frac{d^2 \psi_1(x,y,z)}{dy^2} + \frac{d^2 \psi_1(x,y,z)}{dz^2} \right] = E \psi_1(x,y,z)$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} [-A k_x^2 \text{sen}(k_x x) \text{sen}(k_y y) \text{sen}(k_z z) - A \text{sen}(k_x x) k_y^2 \text{sen}(k_y y) \text{sen}(k_z z) \dots] \\
& [\dots \dots \dots - A \text{sen}(k_x x) \text{sen}(k_y y) k_z^2 \text{sen}(k_z z)] = E \text{sen}(k_x x) \text{sen}(k_y y) \text{sen}(k_z z) \\
& \frac{\hbar^2}{2m} [(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \psi_1(x, y, z)] = E \psi_1(x, y, z) \\
& E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (10-l)
\end{aligned}$$

Si la energía cumple con el requisito anterior, podemos afirmar que la solución propuesta $\psi_1(x, y, z)$ es solución de la ecuación de Schrödinger.

Luego analizaremos si la función dada cumple con las condiciones de borde:

En las 6 caras:

$$\psi_1(0, y, z) = A \text{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right) = 0 \quad 0 < z < L \quad 0 < y < L$$

$$\psi_1(x, 0, z) = A \text{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right) = 0 \quad 0 < x < L \quad 0 < z < L$$

$$\psi_1(x, y, 0) = A \text{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) = 0 \quad 0 < x < L \quad 0 < y < L$$

$$\psi_1(L, y, z) = A \text{sen}\left(\frac{n_x \pi L}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right) = 0 \quad 0 < z < L \quad 0 < y < L$$

$$\text{ya que como } n_x \in \mathbb{N} \Rightarrow \text{sen}\left(\frac{n_x \pi L}{L}\right) = \text{sen}(n_x \pi) = 0$$

$$\psi_1(x, L, z) = A \text{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n_y \pi L}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right) = 0 \quad 0 < x < L \quad 0 < z < L$$

$$\text{ya que como } n_y \in \mathbb{N} \Rightarrow \text{sen}\left(\frac{n_y \pi L}{L}\right) = \text{sen}(n_y \pi) = 0$$

$$\psi_1(x, y, L) = A \text{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n_z \pi L}{L}\right) = 0 \quad 0 < x < L \quad 0 < y < L$$

$$\text{ya que como } n_z \in \mathbb{N} \Rightarrow \text{sen}\left(\frac{n_z \pi L}{L}\right) = \text{sen}(n_z \pi) = 0$$

Con lo cual, verificamos que $\psi_1(x, y, z)$ cumple las condiciones de borde en las caras. También podríamos verificar que cumple con las 12 condiciones de borde de las aristas y de los vértices.

Además $\psi_1(x, y, z)$ es finita, monovaluada y continua, y su derivada también es continua. Con lo cual, hemos verificado que es una función de onda válida.

$$b) \psi_2(x, y, z) = A \text{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right)$$

$$\text{con } k_x = \frac{n_x \pi}{L}; k_y = \frac{n_y \pi}{L} \text{ y } k_z = \frac{n_z \pi}{L}.$$

Las respectivas derivadas serán:

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial x} = A k_x \cos(k_x x) \text{sen}(k_y y) \cos(k_z z)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} = -A k_x^2 \text{sen}(k_x x) \text{sen}(k_y y) \cos(k_z z)$$

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial y} = A \text{sen}(k_x x) k_y \cos(k_y y) \cos(k_z z)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial y^2} = -A \text{sen}(k_x x) k_y^2 \text{sen}(k_y y) \cos(k_z z)$$

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial z} = -A \operatorname{sen}(k_x x) \operatorname{sen}(k_y y) k_z \operatorname{sen}(k_z z)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial z^2} = -A \operatorname{sen}(k_x x) \operatorname{sen}(k_y y) k_z^2 \cos(k_z z)$$

Si reemplazamos en la ecuación de Schrödinger:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2 \psi_2(x, y, z)}{dx^2} + \frac{d^2 \psi_2(x, y, z)}{dy^2} + \frac{d^2 \psi_2(x, y, z)}{dz^2} \right] &= E \psi_2(x, y, z) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-A k_x^2 \operatorname{sen}(k_x x) \operatorname{sen}(k_y y) \cos(k_z z) - A \operatorname{sen}(k_x x) k_y^2 \operatorname{sen}(k_y y) \cos(k_z z) \dots \right] \\ \left[\dots \dots \dots - A \operatorname{sen}(k_x x) \operatorname{sen}(k_y y) k_z^2 \cos(k_z z) \right] &= E \operatorname{sen}(k_x x) \operatorname{sen}(k_y y) \cos(k_z z) \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left[(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \psi_2(x, y, z) \right] &= E \psi_2(x, y, z) \\ E &= \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \end{aligned}$$

Si la energía cumple con el requisito anterior, podemos afirmar que la solución propuesta $\psi_2(x, y, z)$ es solución de la ecuación de Schrödinger.

Luego analizaremos si la función dada cumple con las condiciones de borde:

En las 6 caras:

$$\psi_2(0, y, z) = A \operatorname{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right) \cos\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) = 0 \quad 0 < z < L \quad 0 < y < L$$

$$\psi_2(x, 0, z) = A \operatorname{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right) = 0 \quad 0 < x < L \quad 0 < z < L$$

$$\psi_2(x, y, 0) = A \operatorname{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right) \neq 0 \quad 0 < x < L \quad 0 < y < L$$

En este último caso, no se cumple la condición de borde requerida, con lo cual $\psi_2(x, y, z)$ no es una función de onda aceptable.

Problema 3: En el problema anterior, demuestre que las energías de los estados son:

$$E = \frac{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Solución: Para hallar la expresión de la energía, podemos partir de la expresión obtenida

(10-I) y reemplazar por $k_x = \frac{n_x \pi}{L}$; $k_y = \frac{n_y \pi}{L}$ y $k_z = \frac{n_z \pi}{L}$:

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left(\frac{n_x \pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_z \pi}{L}\right)^2 \right) \\ E &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \end{aligned}$$

Problema 4: Densidad de estados. Sea dn el número de estados cuánticos que tienen energías en determinado intervalo dE , la cantidad de estados por intervalo unitario de energía dn/dE se llama densidad de los estados y se representa como la función $g(E) = \frac{dn}{dE}$.

Imaginemos un espacio tridimensional con coordenadas (n_x, n_y, n_z) . El radio n_{rs} de una esfera centrada en el origen, en ese espacio, se define por $n_{rs}^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$. Cada punto con coordenadas enteras, en ese espacio, representa un estado cuántico permitido. Así cada punto corresponde a una unidad de volumen en el espacio de estados cuánticos, y la cantidad total de puntos con coordenadas enteras dentro de una esfera es igual al volumen de la esfera: $\frac{4}{3}\pi n_{rs}^3$. Ya que todas las n son positivas podemos considerar un octante de la esfera, con $1/8$ del volumen total: $\left(\frac{1}{8}\right)\left(\frac{4}{3}\pi n_{rs}^3\right)$. Las partículas son electrones, así que cada punto corresponde a dos estados con componentes opuestos de espín ($m_s = \pm 1/2$), y el número total n de estados electrónicos correspondientes a puntos dentro del octante es el doble de $\left(\frac{1}{8}\right)\left(\frac{4}{3}\pi n_{rs}^3\right)$, es decir:

$$n = \frac{1}{3}\pi n_{rs}^3 \quad (10-II)$$

La energía E de los estados en la superficie de la esfera se puede expresar en función de n_{rs} :

$$E = \frac{n_{rs}^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (10-III)$$

Combinando las ecuaciones (10-II) y (10-III) y teniendo en cuenta que $V = L^3$ es el volumen de la caja, demuestre que la expresión de la densidad de estados $g(E)$ está dada por:

$$g(E) = \frac{(2m)^{3/2} V}{2 \pi^2 \hbar^3} E^{1/2}$$

Solución: Debemos hallar la densidad de estados $g(E) = dn/dE$

Despejamos n_{rs} de la ecuación (10-II) y reemplazamos en (10-III):

$$n = \frac{1}{3}\pi n_{rs}^3 \Rightarrow n_{rs} = \left(\frac{3n}{\pi}\right)^{1/3}$$

$$E = \frac{n_{rs}^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \left(\frac{3n}{\pi}\right)^{2/3} \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (10-IV)$$

De la expresión (10-IV) despejamos el número total n de estados para luego poder diferenciar la ecuación y obtener dn :

$$(n)^{2/3} = E \left(\frac{\pi}{3}\right)^{2/3} \frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \Rightarrow n = (E)^{3/2} \frac{\pi}{3} (2m)^{3/2} \left(\frac{L}{\pi \hbar}\right)^3$$

Y si reemplazamos el volumen del cubo por $V = L^3$:

$$n = (2m)^{3/2} \frac{V}{3\pi^2 \hbar^3} (E)^{3/2}$$

Para obtener el número de estados dn en un intervalo de energía dE , consideramos que n y E son variables continuas y diferenciamos a ambos lados de la ecuación anterior:

$$dn = (2m)^{3/2} \frac{V}{3\pi^2 \hbar^3} \frac{3}{2} (E)^{1/2} dE$$

Así, la densidad de estados $g(E)$ estará dada por:

$$g(E) = \frac{dn}{dE} = (2m)^{3/2} \frac{V}{2 \pi^2 \hbar^3} (E)^{1/2}$$

Problema 5: La longitud de onda máxima de la luz que puede detectar cierta fotocelda de silicio es $1,11\mu\text{m}$. a) ¿Cuál es el gap de energía entre las bandas de conducción y de valencia para esta fotocelda? b) Explique por qué el silicio puro es opaco para la visión humana.

Solución: Si la longitud máxima que puede detectar una fotocelda es $\lambda_{max} = 1,11\mu\text{m}$ el gap o energía de la banda prohibida estará dada por:

$$E_g = \frac{hc}{\lambda_{max}} = 1,79 \times 10^{-19} \text{J} = 1,12 \text{eV}$$

El gap o energía prohibida del silicio es $E_g = 1,12 \text{eV}$.

b) Para analizar por qué el silicio puro es opaco debemos verificar si efectivamente absorbe la radiación visible.

El rango de energía de los fotones en el visible va desde $E_{rojo} = 1,77 \text{eV}$ hasta $E_{violeta} = 3,1 \text{eV}$. Es decir que las energías de los fotones en el rango visible son superiores al gap del silicio, con lo cual dicho material absorberá esas longitudes de onda, resultando así, que el silicio es opaco en ese rango del espectro electromagnético.

$$E_{rojo} = \frac{hc}{700 \text{nm}} = 2,84 \times 10^{-19} \text{J} = 1,77 \text{eV}$$

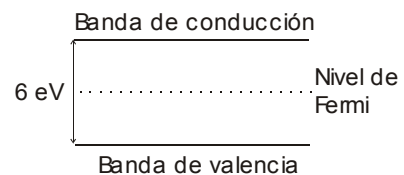
$$E_{violeta} = \frac{hc}{400 \text{nm}} = 4,97 \times 10^{-19} \text{J} = 3,1 \text{eV}$$

Problemas propuestos

Problema 1: Si un electrón se encuentra en el tope de la banda de valencia de un semiconductor cuyo gap de energía es ΔE (brecha de energía prohibida entre las bandas de valencia y conducción) ¿Cuál debe ser la máxima longitud de onda de un fotón para “subir” el electrón a la banda de conducción? (Sugerencia: compare este fenómeno con el efecto fotoeléctrico).

Problema 2: La densidad del oro es $19,3 \text{g/cm}^3$. Cada átomo contribuye con un electrón de conducción. Calcule la energía de Fermi del oro.

Problema 3: El esquema de bandas de un aislante es el que se muestra en la figura. Determinar la probabilidad de que el estado de menor energía de la banda de conducción este ocupado a 500 K. El nivel de Fermi se encuentra en el medio de la banda prohibida



Problema 4: La brecha de energía para el silicio a 300 K es $1,14 \text{eV}$. Encuentre el fotón de más baja frecuencia que asciende un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción. ¿Cuál es la longitud de onda de ese fotón?

Problema 5: La mayor parte de la radiación solar está constituida por radiación de longitudes de onda del orden de $1\ \mu\text{m}$ o menor. ¿Qué brecha de energía debe tener el material en una celda solar para absorber esa radiación? ¿El silicio es apropiado?

Problema 6: El cristal de KCl tiene una banda prohibida entre bandas de $7,6\ \text{eV}$ arriba de la banda ocupada más alta, la cual está llena. ¿Este cristal es opaco o transparente a la radiación de $140\ \text{nm}$ de longitud de onda?

CAPÍTULO 11

Biografías de científicos

En esta sección se presentan biografías resumidas de algunos de los investigadores que estudiaron los temas desarrollados en este libro, incluyendo aspectos de sus vidas fuera de los ámbitos académicos y científicos.

Max Planck (Alemania, 1858-1947).

Figura 11.1

Max Planck



Nota. Reproducido de *Max Planck*, Autor desconocido, 1901, Creative commons bajo licencia CC-BY-SA 3.0.(https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Bundesarchiv_Bild_183-R0116-504,_Max_Planck.jpg)

Su extraordinario trabajo sobre la radiación del Cuerpo Negro implicó un rompimiento científico con la Física Clásica y el nacimiento de la nueva Física Cuántica, de la cual es considerado su fundador y que le valió el Premio Nobel de Física 1918. También sus ideas tuvieron profundas implicancias filosóficas y marcaron la evolución de la Ciencia durante el Siglo XX.

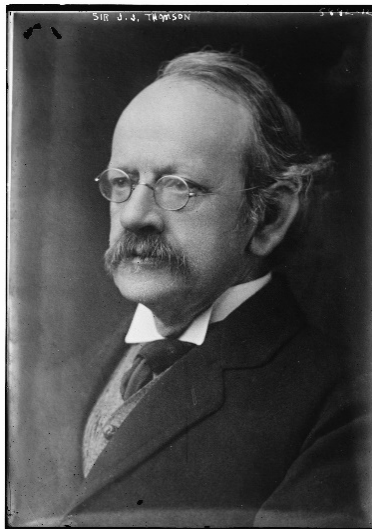
Siendo joven mostraba talento para la música y también para la filosofía, pero finalmente se orientó a estudiar Física en Munich y luego en Berlín donde fue alumno de Helmholtz y Kirchhoff. Realizó una extensa carrera docente y de investigación en la Universidad de Berlín, donde llegó a ser Rector. Tuvo una destacada participación social y política como Presidente de la Sociedad Alemana de Física y de la Sociedad "Kaiser Wilhelm para el Avance de la Ciencia", que luego se convirtió en la Sociedad Max Planck y dió nombre a los institutos de investigación alemanes reconocidos mundialmente.

Desarrolló sus trabajos en su país frecuentemente alterado por conflictos bélicos y tuvo una larga vida marcada por el dolor. Perdió a su primera mujer y cuatro de sus hijos fallecieron trágicamente, En la Primera Guerra Mundial murió su hijo mayor en la Batalla de Verdún. Sufrió una desilusión de la que le costó reponerse, al fracasar su intento de convencer a Hitler para mantener a los científicos judíos en los institutos y universidades. Sus dos hijas murieron al dar a luz, su casa quedó arrasada y perdió su valiosa biblioteca y manuscritos durante un bombardeo en 1944 y otro hijo fue ejecutado por la Gestapo al participar en la Operación Valkiria para asesinar a Hitler.

Joseph J. Thomson (Reino Unido, 1856-1940)

Figura 11.2

Joseph J. Thomson



Nota. Reproducido de *Sir J.J. Thomson*, de Bain News Service, 1920-1925, Library of Congress, Prints & Photographs Division (<https://www.loc.gov/pictures/item/2014715407/>).

Realizó múltiples contribuciones a la Física, estudió la conductividad eléctrica en gases, descubrió los isótopos e inventó el espectrómetro de masas, pero su aporte más conocido es el

descubrimiento del electrón que le valió el Premio Nobel de Física 1906, además de muchos otros premios y distinciones.

Estudió Ingeniería en Manchester y luego se trasladó a Cambridge donde fue Profesor en la prestigiosa Cátedra Cavendish y posteriormente presidente de la Royal Society. A lo largo de su vida alcanzó un altísimo reconocimiento en su país a punto que está sepultado en la Abadía de Westminster de Londres, muy cerca de Newton.

Tuvo numerosos discípulos entre los que se destacan Rutherford, Oppenheimer, Bragg, Born, etc. Su hijo George también obtuvo el Premio Nobel de Física 1937.

Robert Millikan (Estados Unidos, 1868-1953)

Figura 11.3

Robert Millikan



Nota. Reproducido de *Portrait of physicist Robert Millikan* Autor: Clark Millikan (1891) Creative commons (<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Robert-millikan2.jpg>)

Hizo aportes significativos sobre efecto fotoeléctrico que permitieron realizar medidas precisas de la constante de Planck y en el estudio de rayos cósmicos. A pesar de algunas controversias sobre sus medidas iniciales, es reconocido por obtener experimentalmente el valor de la carga del electrón, que le valió el Premio Nobel de Física 1922.

Fue Profesor de la Universidad de Chicago y luego del Instituto Tecnológico de California (Caltech)

Una curiosidad: En su juventud Millikan era muy buen estudiante de Lenguas Clásicas. Al no haber docentes para un curso de Física, su Profesor de Griego lo estimuló a que dicte algunas clases elementales. Cuando le respondió que era imposible porque no tenía ninguna formación,

el Profesor le dijo: “cualquiera que sepa bien el griego puede dar un curso de cualquier cosa”. Así llego Millikan a la Física.

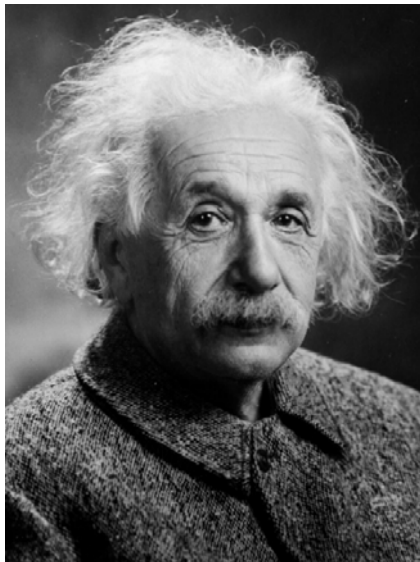
Albert Einstein (Alemania, 1879-1955)

Uno de los más brillantes científicos de todos los tiempos. Su carisma, sus posiciones políticas, sus frases ingeniosas, su legado, lo convirtieron en un personaje muy popular y una celebridad conocida en todo el mundo, caso inusual en un físico que trascendió los círculos tradicionales y cerrados de la Ciencia.

Realizó incontables aportes originales en diversos campos, siempre extendiendo las fronteras del conocimiento. Con apenas 26 años tuvo su “año milagroso” (annus mirabilis) en 1905 en el que presentó la Teoría de la Relatividad restringida, su trabajo sobre el movimiento Browniano y la explicación del efecto fotoeléctrico que le valió el Premio Nobel de Física 1921. Luego publicó varias otras obras trascendentales como la Teoría de la Relatividad General en 1916 y la emisión estimulada de radiación en 1917 que es la teoría seminal del láser, el cual fue construido varios años después. Es el autor de la ecuación más famosa de la historia: $E = mc^2$

Figura 11.4

Albert Einstein



Nota. Reproducido de *Albert Einstein en 1947*, Autor: Orren Jack Turner, Princeton, N.J. Modificada con Photoshop por PM_Poon y Dantadd, 1947, disponible en la División de Impresiones y Fotografías de la Biblioteca del Congreso de los Estados Unidos bajo el código digital cph.3b46036. (<http://loc.gov/pictures/resource/cph.3b46036/>)

Sin embargo, su vida personal fue muy azarosa. Se divorció de su primera esposa Mileva Maric, compañera de estudios con la que compartió sus primeros trabajos y tuvo una relación conflictiva con sus hijos. Mantuvo serias controversias ideológicas con importantes científicos

alemanes de su época (Lenard, Stark). Por su origen judío debió exilarse en Estados Unidos en 1932, poco antes del ascenso de Hitler al poder.

Ya en Estados Unidos, ante la inminencia de la Segunda Guerra Mundial y temiendo el potencial bélico de Alemania, envió una famosa carta al Presidente Roosevelt para que apoye la investigación en física nuclear. Esto llevó al desarrollo de la Bomba Atómica que provocó cientos de miles de muertos en Hiroshima y Nagasaki. Einstein, que era un pacifista por naturaleza, consideró esa carta como uno de los grandes errores de su vida.

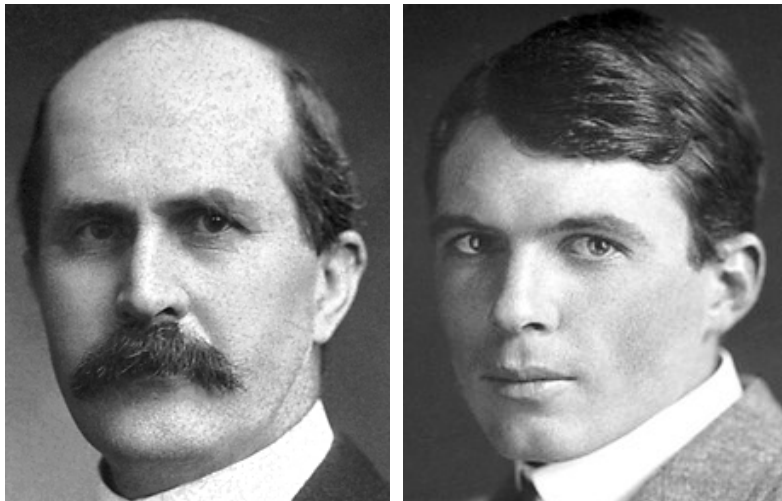
Sus descubrimientos científicos siguen sorprendiendo. Recientemente han sido halladas ondas gravitacionales provenientes de la colisión de agujeros negros que fueron previstas por Einstein hace más de un siglo.

William Henry Bragg (Inglaterra, 1862-1942) William Lawrence Bragg (Australia/Inglaterra 1890-1971)

Padre e hijo, fueron pioneros en el estudio de Rayos X. Ambos descubrieron en 1913 la ley de difracción de un haz de Rayos X por un cuerpo cristalino. Con ella pudieron determinar la posición y distribución de átomos en varias clases de cristales. Esta técnica constituye una poderosa herramienta para el estudio de la materia que continúa utilizándose hasta nuestros días.

Figura 11.5

William Henry Bragg y William Lawrence Bragg



Nota. Reproducido de *William Bragg*, Autor: Fundación Nobel, 1915, publicado en 1916, (http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1915/wh-bragg-bio.html)

Reproducido de *Lawrence Bragg*, Autor: Fundación Nobel, 1915, publicado en 1916, http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1915/wl-bragg-bio.html

William Henry fue profesor de Física en varias universidades de Inglaterra y Australia y Presidente de la Royal Society.

William Lawrence fue un “niño prodigio” que se graduó en Matemática con solo 18 años y luego en Física a los 21 años. Fue Profesor en Universidades del Reino Unido y director del Laboratorio Nacional de Física.

Ambos fueron galardonados con el Premio Nobel de 1915, siendo el primer caso en la Historia que padre e hijo compartan un Nobel. Además, William Lawrence obtuvo el Premio con tan solo 25 años, siendo uno de los más jóvenes en lograrlo.

Arthur Compton (Estados Unidos, 1892-1962)

Estudiando dispersión de Rayos X por distintos materiales, descubrió el cambio de longitud de onda de la radiación electromagnética entre el haz incidente y el dispersado. Lo atribuyó a la interacción elástica entre los fotones incidentes y los electrones del material. Su trabajo fue fundamental para confirmar la interacción fotón/electrón enunciada en el efecto fotoeléctrico. Por este trabajo obtuvo el Premio Nobel 1927 (compartido con Charles Wilson).

Figura 11.6

Arthur Compton



Nota. Reproducido de *Arthur Compton*, Autor desconocido, 1927, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Arthur_Compton_1927.jpg)

Fue Profesor de Física en la Universidad de Chicago y luego Profesor y Rector de la Universidad de Washington. En Chicago dirigió el laboratorio donde se consiguió la primera reacción nuclear en cadena que luego le dio un papel destacado en el Proyecto Manhattan donde

se desarrolló la Bomba Atómica. Su hermano también fue un destacado científico, Presidente del Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT).

Louis de Broglie (Francia, 1892-1987)

Figura 11.7

Louis de Broglie



Nota. Reproducido de *Louis de Broglie*, Autor desconocido, 1929, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Broglie_Big.jpg)

En su Tesis Doctoral presentó una idea revolucionaria que desafiaba todas las teorías conocidas e incluso la intuición más imaginativa: la hipótesis de la dualidad onda-partícula. Planteó que si la luz se podía comportar como una onda (electromagnética) o una partícula (fotón), también podía suceder al revés, una partícula (por ej. el electrón) también podía asociarse a una onda. A pesar de la incredulidad de los más destacados científicos, a los pocos años su propuesta fue comprobada experimentalmente mediante la difracción de electrones que confirmaban su carácter dual. Su Tesis Doctoral le valió el Premio Nobel de Física 1929. A lo largo de su vida recibió otros reconocimientos científicos y la Legión de Honor de Francia.

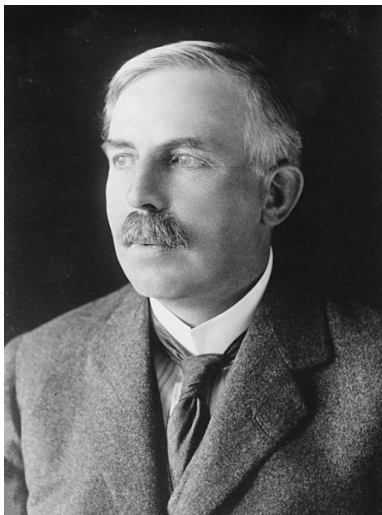
Fue Profesor de la Universidad de París y Secretario de la Academia de Ciencias de Francia. Además de sus trabajos en Física Teórica, sus ideas fueron precursoras del microscopio electrónico. Fue un gran divulgador de las Ciencias y publicó varios libros para el público no experto con explicaciones sencillas de problemas muy complejos. Sirvió al Ejército durante la Primera Guerra Mundial como operador de telégrafos en la Torre Eiffel.

De Broglie pertenecía a una familia aristocrática francesa de alto nivel económico. Inicialmente completó la Licenciatura en Historia, pero su hermano Maurice, físico, le comentó las nuevas teorías relativistas y cuánticas. Entonces decidió dedicarse a las Ciencias.

Ernest Rutherford (Nueva Zelanda/Reino Unido 1871-1937)

Figura 11.8

Ernest Rutherford



Nota. Reproducido de *New Zealand chemist and Nobel Prize laureate Ernest Rutherford (1871-1937)*, Autor George Grantham Bain Collection (Library of Congress), Creative commons (https://es.wikipedia.org/wiki/Archivo:Ernest_Rutherford_LOC.jpg)

Realizo trabajos seminales en radiactividad logrando identificar las partículas α , β , γ y la desintegración de algunos elementos así como la transmutación artificial de un elemento en otro. Esos aportes le valieron el Premio Nobel de Química 1908.

Fue un brillante estudiante en su Nueva Zelanda natal lo que le valió una beca para estudiar con J.J. Thomson en Cambridge donde alcanzó su doctorado en 1898. Luego emigró a Canadá para ser Profesor en el Universidad Mc. Gill de Montreal. Retornó a Inglaterra en 1907 como Profesor de la Universidad de Manchester, en 1919 aceptó el cargo de Director del laboratorio Cavendish en Cambridge sucediendo a su mentor J. J. Thomson, y permaneció allí hasta su retiro. Al igual que Thomson fue Presidente de la Royal Society y está sepultado con honores en la Abadía de Westminster.

Su carácter afable, su personalidad avasallante y su autoridad intelectual le permitió rodearse de numerosos y formidables discípulos entre los que se destacan varios ganadores de Premios Nobel como Bohr, Hahn, Kapitsa, Soddy, Chadwick, Walton, Cockcroft.

Como buen neozelandés, Rutherford fue un destacado jugador de rugby, deporte que practicó muchísimos años, incluso cuando ya era un científico destacado y animaba a sus colegas y alumnos a que lo acompañen.

Niels Bohr (Dinamarca, 1885-1962) / Werner Heisenberg (Alemania, 1901-1976)

Figura 11.9

Werner Heisenberg (izq) y Niels Bohr (der) en 1934



Nota. Reproducido de *Werner Heisenberg and Niels Bohr* Autor Fermilab, U.S. Department of Energy, 1934, Creative commons (<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Heisenbergbohr.jpg>)

-N. Bohr. Uno de los padres de la Física Cuántica, Descolló por sus numerosos trabajos, entre los que se destaca su propuesta exitosa del modelo del átomo de Hidrógeno, por lo que fue galardonado con el Premio Nobel de Física 1922.

Luego de obtener su doctorado en Copenhague, en 1911 viajó a Inglaterra donde trabajó poco tiempo en Cambridge con Thomson y luego en Mánchester con Rutherford, con quien luego siguió colaborando muchos años. Allí elaboró su teoría del átomo de Hidrógeno.

En 1916, regresó a la Universidad de Copenhague, donde creó el Instituto de Física Teórica, que dirigió hasta su fallecimiento. Encabezó la Escuela Copenhague que reunió a los principales físicos europeos de su época. Son famosas sus discusiones científicas con su amigo Albert Einstein.

Su hijo, Aage Niels Bohr, fue también director del Instituto de Física Teórica de Copenhague y obtuvo el premio Nobel de Física 1975.

Aficionado al fútbol, fue arquero del Akademisk Boldklub donde como delantero jugaba su hermano menor Harald Bohr (eminente matemático), quien integró el equipo de Dinamarca, ganador de la medalla de plata en las Olimpiadas de Londres 1908.

-W. Heisenberg. Realizó contribuciones fundamentales al desarrollo de la Mecánica Cuántica, especialmente en su formulación matricial y estableció el principio de incertidumbre. Por sus aportes le fue otorgado el Premio Nobel 1932.

Comenzó estudiando Matemática, pero luego se orientó a la Física. Realizó su doctorado con Sommerfeld, compartiendo estudios con Pauli. Luego fue Profesor en las Universidades de Leipzig, Göttingen y Munich. Su inclinación a la matemática lo llevó a elaborar la Teoría Cuántica basada en el Algebra de Matrices. Esta obra maestra rondaba su cabeza, pero la

plasmó en pocos días en una isla del Mar Báltico donde se había recluso para reponerse de una infección facial, tenía solo 25 años.

Bohr tuvo la enorme habilidad de crear un clima de trabajo excepcional en la Universidad de Copenhague, donde confluían las mejores mentes dedicadas al terremoto intelectual que provocó la irrupción de la Física Cuántica. Formó incontables discípulos, entre los que cuales uno de los más destacados fue Heisenberg. Como tantos otros, Heisenberg lo visitó varias veces alojándose en su casa donde la esposa de Bohr le tomó especial cariño.

Este ambiente casi idílico fue interrumpido violentamente por la Segunda Guerra Mundial y esa amistad entrañable entre maestro y discípulo se rompió para siempre. Bohr emigró a Suecia cuando las tropas alemanas invadieron Dinamarca y luego a Estados Unidos, donde colaboró con el Proyecto Manhattan en el desarrollo de la bomba atómica que destruyó Hiroshima y Nagasaki. Heisenberg permaneció en su país y fue Director del programa nuclear alemán cuyo objetivo, aunque no admitido, también era construir la bomba. No lo lograron.

Ambos científicos se reencontraron durante y al finalizar la Guerra. No hay testimonios ni documentos directos de esos diálogos, salvo la libre interpretación de la obra teatral "Copenhague" del dramaturgo británico Michael Frayn. En su momento culminante, Heisenberg se dirige a Bohr con estas palabras.... "los alemanes cometimos atrocidades en la guerra e intentamos usar la energía nuclear con fines bélicos...pero la Bomba la construyeron y la arrojaron ustedes"...

Erwin Schrödinger (Austria, 1887-1961)

Figura 11.10

Erwin Schrödinger



Nota. Reproducido de *Erwin Schrödinger* Autor Nobel foundation, 1933, Creative commons ([https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Erwin_Schr%C3%B6dinger_\(1933\).jpg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Erwin_Schr%C3%B6dinger_(1933).jpg))

Autor del enfoque ondulatorio de la Mecánica Cuántica que le dieron una base matemática y una interpretación física formal. Luego demostró que su formalismo y el matricial de Heisenberg son equivalentes. Es conocido además por la propuesta del experimento mental “El gato de Schrödinger” que muestra las paradojas de la Teoría Cuántica. Por esos aportes, entre otros, obtuvo el Premio Nobel de Física 1933 (compartido con Dirac).

Fue Profesor en varias universidades austríacas, suizas y alemanas, aunque él mismo reconocía que no era un buen docente, prefiriendo las tareas de investigación. Frecuentó a Bohr en Copenhague. Con motivo del ascenso de Hitler al poder, dejó Alemania, pasó un tiempo en Inglaterra y Estados Unidos, luego se radicó en Irlanda. Volvió a Viena después de su jubilación. En Irlanda intentó una teoría unificada de las fuerzas fundamentales en Física y abordó otros temas científicos publicando muchos trabajos sobre biología, interrogándose “¿qué es la vida?” y sobre Historia de la Ciencia.

Una característica peculiar de su personalidad era su carácter libertario y fuera de los convencionalismos de la época. Tuvo muchas relaciones de pareja, incluso conviviendo juntas y tuvo varios hijos con algunas de ellas que causaron escándalos en los círculos académicos a los que pertenecía.

Wolfgang Pauli (Austria, 1900-1958)

Figura 11.11

Wolfgang Ernst Pauli



Nota. Reproducido de *Pauli, Wolfgang (1900-1958)* Autor Katzenstein, Bettina, 1945, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:ETH-BIB-Pauli,_Wolfgang.tif)

Entre sus contribuciones más importantes a la Física Cuántica, merecen mencionarse el descubrimiento del Principio de Exclusión, sus aportes sobre el spin del electrón y el spin nuclear

y la hipótesis del neutrino que fue confirmada muchos años después. Obtuvo el Premio Nobel de Física 1938 y muchos otros reconocimientos científicos.

Estudió en Munich bajo la dirección de Sommerfeld donde se graduó muy joven. Con apenas 21 años escribió un tratado sobre Relatividad que fue elogiado por Einstein y aún hoy es un texto fundamental para su estudio. Trabajó en Göttingen con Born, y en Copenhague con Bohr para luego ser nombrado Profesor en la Universidad de Hamburgo y posteriormente en el Instituto Politécnico de Zúrich. Durante la Segunda Guerra Mundial se instaló en Princeton, Estados Unidos.

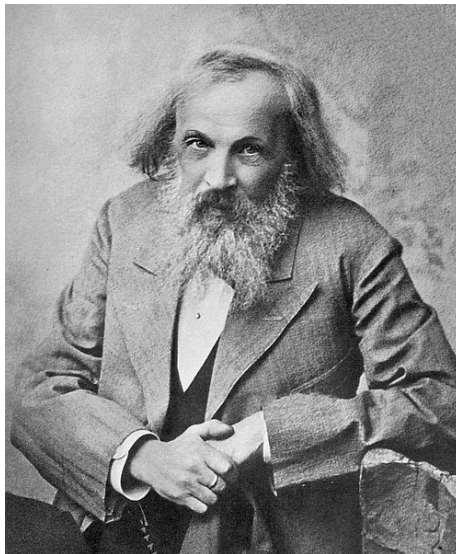
Era muy riguroso consigo mismo, como crítico de los errores de sus colegas o discípulos, lo cual obligaba a todos a esforzarse para lograr la mejor calidad de sus trabajos.

Eminente físico teórico, como negado para la física experimental, en la comunidad científica se lo conoció, humorísticamente, por el "Efecto Pauli", según el cual los equipos y dispositivos dejaban de funcionar o mostraban datos equivocados cuando Pauli estaba cerca o entraba a un laboratorio. Él estaba muy orgulloso de esa "virtud".

Dmitri Mendeléyev (Rusia, 1834-1907)

Figura 11.12

Dmitri Mendeléyev



Nota: Reproducido de *Dmitri Mendeleev* Autor E.Л. Мрозовская, 1899, publicado en la colección de retratos de científicos por Photographische Gesellschaft, Berlin, c. 1910, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Mendeleev_Phographische_Gesellschaft_3.jpg)

Célebre por hallar el patrón de distribución de los elementos de acuerdo a su estructura, mundialmente conocido como Tabla Periódica de los Elementos, lo que le permitió además,

postular la existencia de nuevos elementos que fueron encontrados posteriormente. Logro notable que anticipó en muchos años la posterior fundamentación basada en teorías cuánticas.

Fue asesor del gobierno ruso y escribió artículos sobre el desarrollo económico y social de su país. Sus principales aportes fueron sobre planes de educación masiva. Además, trabajó en otros campos de la ciencia, agricultura e industria.

Nacido en Siberia, hijo menor de 17 hermanos, su madre decidió mudarse a Moscú cuando su padre murió y luego de incendiarse la fábrica de cristal que era el sustento familiar. A pesar de sus excelentes calificaciones, no logró ingresar a las Universidades de Moscú y San Petersburgo al ser discriminado por sus orígenes siberianos, según los prejuicios de la época. Se graduó en el Instituto Pedagógico de San Petersburgo y al poco tiempo consiguió una plaza de profesor en la Universidad que lo había rechazado anteriormente.

Si bien no están debidamente documentados en todos los casos, su vida familiar y académica tuvo aspectos pintorescos. Se divorció de su primera esposa y se casó nuevamente con ella misma!, sin esperar los tiempos que exigía la ley. Por eso fue acusado de bigamia! Luego volvió a divorciarse y se casó con una mujer mucho menor, esta vez sí respetando los plazos. A pesar de ser asesor del gobierno, su fuerte carácter y sus ideas libertarias lo llevaron a enfrentarse con la burocracia zarista por defender a estudiantes y campesinos. Estas actitudes le causaron varios problemas, como no ser admitido a la Academia Rusa de Ciencias.

Recibió numerosos premios y distinciones de prestigiosos institutos y universidades europeas. Sin embargo, el Premio Nobel que merecía le fue negado por la Academia Sueca, presuntamente por la influencia del químico sueco S. A. Arrhenius, (P. Nobel 1903) con quien mantenía notorias diferencias desde hacía años.

James Clerk Maxwell (Escocia, 1831-1879)

El más brillante físico del Siglo XIX. Autor de la Teoría Electromagnética que unificó en un mismo formalismo los fenómenos eléctricos y magnéticos en solo cuatro ecuaciones fundamentales, anticipó la existencia de ondas electromagnéticas y demostró que la luz era un ejemplo de ellas dando una explicación de su naturaleza. Fue el primero que consideró un análisis estadístico para analizar el comportamiento de los gases, teoría que fue completada posteriormente por Boltzmann. Dio una explicación convincente sobre la naturaleza de los anillos de Saturno, que se confirmó posteriormente con las exploraciones espaciales. También trabajó experimentalmente obteniendo por primera vez una fotografía en colores y en polarización de la luz en los primeros análisis de tensiones mecánicas por fotoelasticidad.

Su obra fue la culminación de la Física Clásica, pero a su vez la base para los nuevos desarrollos en Relatividad y Física Cuántica. Asimismo sus contribuciones científicas tuvieron una influencia decisiva en el desarrollo tecnológico del Siglo XX.

Estudió en la Universidad de Edimburgo y luego fue Profesor en Aberdeen, Cambridge y Londres. Huérfano de madre a los 8 años. A los 25 años, la muerte de su padre le obligó a

regresar a Escocia para hacerse cargo de la granja familiar. Por ello debió renunciar al cargo de Profesor en el Trinity College de Cambridge. Murió joven a la misma edad y por el mismo motivo (cáncer de estómago) que su madre.

Figura 11.13

James Clerk Maxwell



Nota. Reproducido de *Engraving of James Clerk Maxwell by G. J. Stodart from a photograph by Fergus of Greenock* Autor George J. Stodart, Fecha desconocida, Frontpiece in James Maxwell, *The Scientific Papers of James Clerk Maxwell*. Ed: W. D. Niven. New York: Dover, 1890., Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:James_Clerk_Maxwell.png)

Paul Dirac (Reino Unido, 1902-1984)

Realizó aportes fundamentales a la mecánica y la electrodinámica cuántica. Formuló una famosa ecuación para la descripción del comportamiento del electrón desde el punto de vista cuántico-relativista que le permitió explicar el spin. Luego extendió su teoría a los fermiones completando la estadística de Fermi. A partir de sus ecuaciones, predijo la existencia de antimateria que fue confirmada pocos años después con el descubrimiento del positrón. Obtuvo el Premio Nobel de Física 1933 (compartido con Schrödinger).

Su formación inicial fue en Ingeniería Eléctrica y luego se graduó en Matemática, volcando luego esos excepcionales conocimientos a la Física. Fue Profesor de la Universidad de Cambridge ocupando la Cátedra Lucasiana (la misma de Newton). Luego se transfirió a Estados Unidos para ser Profesor en la Universidad Estatal de Florida.

Dirac tenía un carácter muy cerrado y taciturno, de muy pocas palabras, evitaba reuniones sociales y apenas se relacionaba con sus colegas y alumnos. Algunos biógrafos atribuyen este comportamiento a una infancia infeliz. Sufrió con un padre autoritario, de origen suizo-francés, que obligaba a hablar francés en su casa, idioma que él nunca pudo dominar. Su hermano mayor se suicidó siendo muy joven, episodio que lo afectó sensiblemente y le costó años superar.

Figura 11.14

Paul Dirac



Nota. Reproducido de *Paul Dirac* Autor Cambridge University, Cavendish Laboratory, 1930., Creative commons
(https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Paul_Dirac,_1933,_head_and_shoulders_portrait,_bw.jpg)

Ludwig Boltzmann (Austria, 1844-1906)

Pionero en Mecánica Estadística, defensor de la física atómica, estableció la Teoría Cinética de Gases completando el trabajo de Maxwell y fue un precursor de las ideas que luego llevaron al desarrollo de la Física Cuántica. Hizo aportes decisivos en Termodinámica, particularmente en la definición e interpretación de la entropía.

Fue Profesor en varias Universidades austríacas y alemanas donde se mostró como excelente docente, con un trato muy cercano a sus alumnos que le permitió formar varios discípulos que se destacaron posteriormente como Ehrenfest, Frank y Lise Meitner.

Sosteniendo la hipótesis atómica, mantuvo fogosas polémicas con colegas defensores de la teoría energista de la Física (Mach, Ostwald). Éstas le provocaban períodos de depresión que junto con una salud delicada, la pérdida de un hijo y una ceguera avanzada lo llevó al suicidio. Algunos años después de su muerte, con las evidencias experimentales y el avance de la Física

Cuántica, sus teorías fueron aceptadas, unánimemente reconocidas y abrieron nuevas investigaciones en termodinámica del no equilibrio.

Figura 11.15

Ludwig Boltzmann



Nota. Reproducido de *Ludwig Eduard Boltzmann* Autor Desconocido, 1902, Creative commons (<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Boltzmann-Ludwig.jpg>)

Enrico Fermi (Italia, 1901-1954)

Realizó importantes aportes en teoría cuántica, física nuclear y de partículas. Entre ellos se destacan: la teoría estadística para partículas subatómicas que cumplen el Principio de Exclusión de Pauli (electrones, protones, neutrones, etc.), conocidas como “fermiones” en su honor; el estudio de la desintegración beta (β) donde utilizó la hipótesis del neutrino; el uso de neutrones lentos para radiactividad y fisión nuclear y el diseño y la construcción del primer reactor nuclear de fisión controlada. Premio Nobel 1938 por sus trabajos en radioactividad inducida.

Era habilísimo físico experimental, extraordinario físico teórico, excelente profesor y divulgador, cualidades sorprendentes para que todas ellas estén concentradas en un solo científico contemporáneo.

Lideró un grupo de brillantes jóvenes físicos conocidos como “I ragazzi di via Panisperna” (Los muchachos de la calle Panisperna) por la calle del Departamento de Física de la Universidad La Sapienza en Roma. Sus colegas le llamaban “il Papa” reconociéndole sus habilidades innatas.

Lamentablemente, el clima político en Italia se fue enrareciendo durante la década de 1930, luego comenzó la Guerra y el grupo se dispersó. Sus integrantes partieron a otros horizontes.

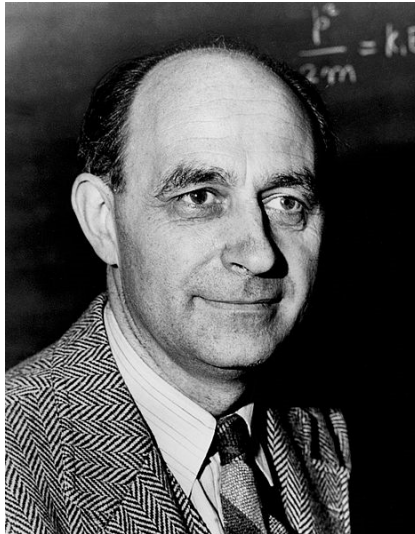
La situación se tornó muy difícil por los orígenes religiosos de Laura, la esposa de Fermi y el oscuro antisemitismo que reinaba en esa época. Fermi tenía prohibido salir del país, pero un hecho fortuito permitió que la familia viaje al exterior. Logró un permiso especial para ir a Estocolmo a recibir su merecido Premio Nobel 1938. Y ya no volvió ...

Emigró a Estados Unidos. En la Universidad de Chicago construyó un reactor donde se obtuvo la primera reacción controlada de fisión nuclear. Luego participó activamente en el Proyecto Manhattan que desarrolló la Bomba Atómica.

Falleció prematuramente y en su memoria se instituyó el Premio Enrico Fermi, uno de los más prestigiosos en el área de la física atómica y nuclear. El elemento sintético fermio (Fm, nro. atómico 100) fue nominado en su honor.

Figura 11.16

Enrico Fermi



Nota. Reproducido de Enrico Fermi Autor: Department of Energy. Office of Public Affairs, entre 1943 y 1949, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Enrico_Fermi_1943-49.jpg).

Satyendra Nathan Bose (India, 1894-1977)

Sus trabajos se orientaron al estudio estadístico de la Física Cuántica. Su aporte más relevante es sobre las leyes que cumplen las partículas elementales que tienen spin entero y no cumplen el Principio de Exclusión de Pauli (fotones, gluones, bosón de Higgs, etc). A estas leyes se las denominan Estadística de Bose-Einstein y a las partículas que las cumplen “bosones” en su honor (nombre sugerido por Dirac). Anticipó teóricamente un estado especial de la materia, conocido como “Condensado de Bose-Einstein” que se da en ciertas agregaciones de bosones a una temperatura cercana al cero absoluto. Fue obtenido experimentalmente a fines del Siglo XX. Injustamente discriminado, no recibió el Premio Nobel que merecía.

De origen bengalí, fue Profesor en las Universidades de Calcuta y Dacca. Tuvo participación en la independencia de la India, principalmente en la organización del área de Educación y Cultura del nuevo estado.

Interesado en la nueva física cuántica y relativista, con mucho esfuerzo logró viajar a Europa para relacionarse con los principales científicos de la época. Sin embargo, no le prestaron mucha atención y volvió a la India. Cansado que las principales revistas científicas le rechazaran sus trabajos, tomó una decisión disruptiva: le envió su manuscrito de estadística a Einstein con una carta personal solicitándole humildemente que lo leyera y le hiciera comentarios. Lejos de una opinión desfavorable, Einstein elogió sus ideas, completó el trabajo y lo publicaron juntos. Recién allí, con semejante “padrino”, se conoció la Estadística de Bose-Einstein que fue inmediatamente aceptada por los mismos científicos que antes la desconocieron. Por este y otros trabajos, Bose fue incorporado a la Royal Society inglesa, e invitado a trabajar en importantes universidades. Pero, según sus propias palabras, nunca se sintió cómodo con sus colegas europeos y prefirió desarrollar toda su actividad científica y docente en la India y la actual Bangladesh, donde se lo reconoció con las máximas distinciones en su país.

Figura 11.17

Satyendra Nath Bose



Nota. Reproducido de Satyendra Nath Bose in London 1925 Autor Desconocido, 1925, Creative commons (<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:SatyenBose1925.jpg>)

Maria Salomea Skłodowska-Curie (Polonia/Francia, 1867-1934)

Química y Física. Pionera en el campo de la radiactividad a la que le dio el nombre. Estudió las propiedades del uranio y descubrió otros elementos radioactivos: radio y polonio. Fue la primera mujer en ganar un Premio Nobel (Física, 1903) y la primera persona en ganar un segundo Premio Nobel (Química, 1911).

Nacida en la Polonia ocupada por el Imperio Ruso, no pudo acceder a la educación superior formal por ser mujer e ingresó a la Universidad “Flotante”, institución clandestina que la admitió. Luego siguió a su hermana a Francia. En la Sorbona logró matricularse y obtuvo la Licenciatura

en Física (primera en su promoción) y en Matemática (segunda en su promoción). En París conoció a un joven químico experto en magnetismo, Pierre Curie quien será su marido. Ella lo convenció de cambiar de tema de investigación y dedicarse a la radioactividad, recientemente descubierta por Becquerel. Con él completó su Tesis Doctoral que le valieron el Premio Nobel de Física 1903 compartido con ellos dos. El Comité no había considerado a ella para el Premio, pero Pierre amenazó con rechazarlo si no se lo concedía a la verdadera impulsora de las investigaciones, su esposa.

Después de ganar el Nobel, Pierre Curie obtuvo el cargo de Profesor en la Universidad de París, pero falleció poco después atropellado por un tranvía a caballo. Marie obtuvo la plaza de su marido, convirtiéndose en la primera mujer catedrática de la Sorbona y la primera en dirigir un laboratorio de investigación. Prosiguió sus estudios en soledad y demostró sin dudas su valía como científica, por lo que fue galardonada con el Premio Nobel de Química en 1911.

En 1914 fundó el Instituto del Radio (actualmente Instituto Curie) para promover las investigaciones sobre la radioactividad, especialmente sus aplicaciones médicas. Una institución similar fundó en Varsovia. Cuando comenzó la Primera Guerra Mundial creó una unidad de radiografías móvil y recorrió con sus hijas los campos de batalla.

Con la salud deteriorada por la contaminación radiactiva, falleció en 1934. Lamentablemente no alcanzó a felicitar a su hija Irene y su yerno Frédéric Joliot, quienes obtuvieron el Premio Nobel de Química 1935.

Francia finalmente rindió un merecido homenaje a esta mujer extraordinaria. Descansa junto a su marido y los mayores héroes de la Nación en el Panteón de París.

Figura 11.18

María Salomea Skłodowska-Curie



Nota. Reproducido de Retrato de *Marie Skłodowska-Curie (1867 – 1934)* "Collection Guy et Marie José Pallardy". Autor Desconocido, 1900, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Marie_Curie,_portrait,_1900.jpg)

Lise Meitner (Austria, 1878-1968)

Figura 11.19

Lise Meitner



Nota. Reproducido de *Meitner, Lise 1878-1968* Autor Smithsonian Institution, 1946, Creative commons ([https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Lise_Meitner_\(1878-1968\),_lecturing_at_Catholic_University,_Washington,_D.C.,_1946.jpg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Lise_Meitner_(1878-1968),_lecturing_at_Catholic_University,_Washington,_D.C.,_1946.jpg))

Trabajó en radiactividad y física nuclear. Junto al químico alemán Otto Hahn, realizó importantes contribuciones hallando nuevos elementos e isótopos. Ocupa un lugar en la Historia de la Física al interpretar correctamente la fisión nuclear.

Logró estudiar en la Universidad de Viena cuando se levantó la prohibición del ingreso de mujeres. Allí fue la segunda en doctorarse, en 1906 bajo la dirección de Boltzmann. Ganó una beca en la Universidad de Berlín, cuando Planck valoró sus cualidades para la investigación. Allí comenzó a trabajar con Otto Hahn, fructífera colaboración que duró más de 30 años. Él era un gran químico experimental y ella una gran física teórica. Fue la primera mujer en ser Profesora de Física en una Universidad alemana y la primera investigadora en integrar la Academia Austríaca de Ciencias.

Sin embargo, al igual que María Curie sufrió discriminaciones por las ideologías reinantes que solo permitía el acceso a la educación superior a los hombres. Pero para Lise fue más grave aún debido al oscuro antisemitismo.

La situación se volvió cada vez más intolerante desde el ascenso de Hitler al poder. Resistió en su trabajo con la protección de Planck y Hahn pero en 1938 tuvo que huir precipitadamente. Su viaje de Berlín a Amsterdam y desde allí a Estocolmo con pasaporte falso, fue una odisea de la que se salvó milagrosamente.

Ya más tranquila en Suecia, siguió colaborando con Hahn. En Navidad recibió una carta donde éste le narraba los últimos trabajos, que consideraba un fracaso porque los resultados eran absurdos. Bombardeando núcleos de Uranio con neutrones esperaba obtener elementos transuránidos y sin embargo observaba núcleos más livianos. Lise junto a su sobrino Otto Frisch, revisó las notas, hizo algunos cálculos e interpretó correctamente los resultados. La conclusión le heló la sangre... Se había obtenido la fisión nuclear..., en 1938, ¡a las puertas de la Segunda Guerra! Las consecuencias para el mundo las conocemos todos.

Otto Hahn ganó el Premio Nobel en 1944, pero le fue negado a Meitner que no fue reconocida por su aporte fundamental, siendo una de las grandes injusticias en el otorgamiento del Premio.

Al pasar el tiempo, Lise fue distinguida por numerosas instituciones y es la única mujer que tiene un elemento en la Tabla Periódica en su honor: el meitnerio (Mt, nro. atómico 109).

Congresos Solvay

Figura 11.20

Congreso Solvay



Nota. Reproducido de *Fourth Solvay Conference, Brussels, 1924* Autor Institut International de Physique Solvay, Brussels, Belgium, 1924, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Solvay_conference,_1924.jpg)

Por iniciativa del químico e industrial belga Ernest Solvay (1838-1922), se desarrollaron en Bruselas durante la primera mitad del Siglo XX, una serie de Congresos que reunieron a los mejores científicos de la época. Cada uno de ellos estaba dedicado a una problemática

específica. El más famoso de todos fue el quinto, en el año 1927, cuyo tema era “electrones y fotones”. Los asistentes se muestran en la foto, tal vez la más importante de la historia sobre personalidades de la Ciencia, ya que reúne un formidable equipo de mentes brillantes. En ella se pueden identificar a Debye, Langmuir, Planck, Bragg, Marie Curie, Lorentz, Dirac, Einstein, Schrödinger, Compton, de Broglie, Pauli, Heisenberg, Born, Wilson, Bohr, Richardson. (se nombran solo los que obtuvieron el Premio Nobel).

Se dice que fue en este Congreso que sucedió uno de los diálogos entre científicos más trascendentes y “picantes”, cuando se discutían las implicancias de la Física Cuántica y su carácter probabilístico. Einstein, que no estaba convencido, lo desafió a Bohr que era su principal defensor: “Niels, usted cree que Dios juega a los dados?”. La respuesta fue inmediata... y genial: “Albert, deje de decirle a Dios lo que debe hacer con los dados”.

Inflaciones eran las de antes...

(1918-1923) Alemania sufrió una devastadora inflación luego de la Primera Guerra Mundial. La moneda alemana cotizaba a 9 marcos x 1 dólar en 1918, 40 marcos en 1919, 400 marcos en 1922 y a 7000 marcos en enero, 160000 en julio y 4200000000 en noviembre de 1923. En ese “marco” económico de terrible sufrimiento para el pueblo, trabajaron Einstein, Planck, Stark, Lenard, Von Laue, Heisenberg, Pauli, Schrödinger, Meitner, Hahn, Sommerfeld, Haber, Stern, Gerlach, Nerst, Born y tantos otros científicos. En una ocasión, Planck avergonzado le confesó a Einstein que pasó una noche de invierno en la estación de trenes de una ciudad alemana porque el dinero asignado a la visita oficial no le alcanzaba para pagar el Hotel. Planck era Premio Nobel, Rector de la Universidad de Berlín, Presidente de la Sociedad Alemana de Física y secretario permanente de la Academia Prusiana de Ciencias.

Premio Nobel

El Premio Nobel es el galardón de máximo prestigio que se otorga anualmente, desde 1901, a las personas que han hecho contribuciones sobresalientes en Ciencias y Humanidades. Las disciplinas que se premian son: Medicina y Fisiología, Química, Física, Economía, Literatura y Paz. Los cinco primeros son otorgados por las Academias de Suecia y entregados en Estocolmo por el Rey, mientras que el de la Paz está a cargo del Parlamento de Noruega y se entrega en Oslo.

Los mismos constan de una medalla de oro, diploma y una suma de dinero que es administrada por la Fundación Nobel, instituida por el industrial y químico sueco Alfred Nobel (1833-1896). Entre muchos inventos y desarrollos tecnológicos atribuidos a Nobel, el más destacado es la dinamita. Por ese motivo, en su testamento estableció que la mayor parte de su

fortuna fuese destinada a los benefactores de la humanidad, considerando que su aporte había sido en sentido contrario.

Cinco personalidades argentinas recibieron el Premio Nobel: Carlos Saavedra Lamas, (Paz, 1936), Bernardo Houssay (Medicina y Fisiología, 1947), Luis Federico Leloir, (Química, 1970), Adolfo Pérez Esquivel (Paz, 1980) y César Milstein (Medicina y Fisiología, 1984).

Referencias

Max Planck, Autor desconocido, 1901, Creative commons bajo licencia CC-BY-SA 3.0.(https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Bundesarchiv_Bild_183-R0116-504,_Max_Planck.jpg)

Sir J.J. Thomson, de Bain News Service, 1920-1925, Library of Congress, Prints & Photographs Division (<https://www.loc.gov/pictures/item/2014715407/>).

Portrait of physicist Robert Millikan Autor: Clark Millikan (1891) Creative commons (<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Robert-millikan2.jpg>)

Albert Einstein en 1947, Autor: Orren Jack Turner, Princeton, N.J. Modificada con Photoshop por PM_Poon y Dantadd, 1947, disponible en la División de Impresiones y Fotografías de la Biblioteca del Congreso de los Estados Unidos bajo el código digital cph.3b46036. (<http://loc.gov/pictures/resource/cph.3b46036/>)

William Bragg, Autor: Fundación Nobel, 1915, publicado en 1916, (http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1915/wh-bragg-bio.html)

Reproducido de *Lawrence Bragg*, Autor: Fundación Nobel, 1915, publicado en 1916, http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1915/wl-bragg-bio.html

Arthur Compton, Autor desconocido, 1927, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Arthur_Compton_1927.jpg)

Louis de Broglie, Autor desconocido, 1929, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Broglie_Big.jpg)

New Zealand chemist and Nobel Prize laureate Ernest Rutherford (1871-1937), Autor George Grantham Bain Collection (Library of Congress), Creative commons (https://es.wikipedia.org/wiki/Archivo:Ernest_Rutherford_LOC.jpg)

Werner Heisenberg and Niels Bohr Autor Fermilab, U.S. Department of Energy, 1934, Creative commons (<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Heisenbergbohr.jpg>)

Erwin Schrödinger Autor Nobel foundation, 1933, Creative commons ([https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Erwin_Schr%C3%B6dinger_\(1933\).jpg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Erwin_Schr%C3%B6dinger_(1933).jpg))

Pauli, Wolfgang (1900-1958) Autor Katzenstein, Bettina, 1945, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:ETH-BIB-Pauli,_Wolfgang.tif)

Dmitri Mendeleev Autor E.Л. Мрозовская, 1899, publicado en la colección de retratos de científicos por Photographische Gesellschaft, Berlin, c. 1910, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Mendeleev_Phographische_Gesellschaft_3.jpg)

Engraving of James Clerk Maxwell by G. J. Stodart from a photograph by Fergus of Greenock
Autor George J. Stodart, Fecha desconocida, Frontpiece in James Maxwell, *The Scientific Papers of James Clerk Maxwell*. Ed: W. D. Niven. New York: Dover, 1890., Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:James_Clerk_Maxwell.png)

Paul Dirac Autor Cambridge University, Cavendish Laboratory, 1930., Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Paul_Dirac,_1933,_head_and_shoulders_portrait,_bw.jpg)

Ludwig Eduard Boltzmann Autor Desconocido, 1902., Creative commons (<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Boltzmann-Ludwig.jpg>)

Enrico Fermi Autor: Department of Energy. Office of Public Affairs, entre 1943 y 1949, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Enrico_Fermi_1943-49.jpg)

Satyendra Nath Bose in London 1925 Autor Desconocido, 1925, Creative commons (<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:SatyenBose1925.jpg>)

Retrato de *Marie Skłodowska-Curie (1867 – 1934) "Collection Guy et Marie José Pallardy"*.
Autor Desconocido, 1900, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Marie_Curie,_portrait,_1900.jpg)

Meitner, Lise 1878-1968 Autor Smithsonian Institution, 1946, Creative commons ([https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Lise_Meitner_\(1878-1968\),_lecturing_at_Catholic_University,_Washington,_D.C.,_1946.jpg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Lise_Meitner_(1878-1968),_lecturing_at_Catholic_University,_Washington,_D.C.,_1946.jpg))

Fourth Solvay Conference, Brussels, 1924 Autor Institut International de Physique Solvay, Brussels, Belgium, 1924, Creative commons (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Solvay_conference,_1924.jpg)

Bibliografía recomendada

- Eisberg R. y Resnick R. (2008). Física Cuántica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas. México. Ed.: Limusa.
- García Castañeda M. y Evert De-Geus J. (2003). Introducción a la Física Moderna. Colombia. Ed.: Universidad Nacional de Colombia, Unibiblos.
- Halliday D., Resnick R. y Krane K.S. (1999). Física Vol. 2. Versión Ampliada. México. Compañía Editorial Continental, S.A. de C.V.
- Hetch, E. (2000). Óptica. Madrid. Ed.: Addison Wesley Iberoamericana S.A.
- Neamen, D.A. (2011). Semiconductor Physics and Devices: basic principles. Estados Unidos. Ed.: McGraw-Hill.
- Serway, R.A. y Jewett, J.W. (2009). Física para ciencias e ingeniería con Física Moderna (Volumen 2). México. Ed.: Cengage Learning.
- Serway R. R., Moses C., Moyer C.(2006) Física Moderna, Ed.: Cengage Learning.
- Young, H.D. y Freedman, R.A. (2009). Física Universitaria con Física Moderna (Volumen 2). México. Ed.: Pearson Educación.

Los autores

Coordinador

Tebaldi, Myrian Cristina

Recibió el título de Lic. en Física en 1994 y el de Dr. de la Facultad de Ciencias Exactas, Área Física en 1998, ambos en la Facultad de Ciencias Exactas (UNLP). Desde 1994 se ha desempeñado como docente en diversas asignaturas de Física en la UNLP, siendo actualmente Profesor Titular Ordinario en la Facultad de Ingeniería (cátedra de Física III) y coordinadora del Área Física General: Electromagnetismo, Física Cuántica y Relativista. Ha desarrollado actividades de investigación desde 1994 en el Centro de Investigaciones Ópticas dependiente del CONICET-UNLP-CIC, siendo actualmente Investigador Independiente de CONICET y coordinador del grupo de Procesamiento óptico de imágenes y speckle dinámico. Actualmente es Directora interina del Centro de Investigaciones Ópticas. Ha publicado más de 90 artículos en revistas científicas internacionales, más de 60 artículos en Actas de Congresos y 4 capítulos de libro. Dirige tesis doctorales, becarios doctorales, postdoctorales e investigadores y proyecto de investigación financiados por la Universidad de La Plata, el CONICET y el ANCyPT.

Autores

Creus, Mariano

Es Licenciado en Física, graduado en la Facultad de Ciencias Exactas (UNLP) y Doctor de la Facultad de Ciencias Exactas (UNLP). Se desempeña como Profesor Adjunto de la asignatura Física III en la Facultad de Ingeniería y como Profesor Titular del Taller de Matemática N°2 de la Facultad de Arquitectura y Urbanismo (FAU) de la UNLP. Es profesor en cursos de posgrado en la FAU-UNLP sobre iluminación sustentable y enseñanza de la Matemática y la Física. Es profesor asistente de un curso de posgrado de la Facultad de Ciencias Exactas (UNLP) sobre aberraciones y diseño ópticos. Dicta seminarios en la Especialización en Higiene y Seguridad Laboral en la Industria de la Construcción de la FAU. Es director del Laboratorio de Sistemas Edilicios (SisEdLAB) de la FAU-UNLP. Es director de un proyecto de Investigación y desarrollo y codirector de un proyecto de extensión, ambos en la FAU-UNLP. Ha participado en dos proyectos de acceso al espacio de la Comisión Nacional de Actividades Espaciales (CONAE); siendo miembro del Centro de Investigaciones Ópticas (CIOP), en el Proyecto Aquarius SAC-D y, como integrante de la empresa Veng S.A., en el Proyecto Tronador II. Se ha desempeñado como responsable de calidad durante cinco años en la industria nacional de autopartes.

Muñoz, Emiliano

Es Licenciado en Física, graduado en la Facultad de Ciencias Exactas (UNLP) y es Doctor en Física de la Facultad de Ciencias Exactas (UNLP). Comenzó su actividad docente como Ayudante Alumno en 2004 siendo actualmente Profesor Adjunto Ordinario de la Facultad de Ingeniería (UNLP) en la cátedra de Física III. Desarrolla su actividad profesional como Perito a cargo del Laboratorio de Microscopía de Barrido Electrónico de la Procuración General de la Suprema Corte de Justicia de la provincia de Buenos Aires (PG-SCJBA). Es coautor de más de 20 publicaciones científicas con referato en el área de cálculo de Densidad Electrónica de óxidos semiconductores dopados con impurezas y de publicaciones docentes con referato en el área de la Física Moderna. Además, participa desde su graduación en proyectos de Investigación en el área de Propiedades Estructurales, Electrónicas, Magnéticas e Hiperfinas en Óxidos Semiconductores. En el área de la Extensión Universitaria ha sido participante en proyectos de Extensión Universitaria de la UNLP y ha sido guía del Museo de Física de la FCE-UNLP.

Alonso, Roberto Emilio

Es Licenciado en Física y Doctor de la Facultad de Ciencias Exactas especialidad Física, ambos de la Universidad Nacional de La Plata. Se desempeña como Profesor Titular en Física II en la Facultad de Ingeniería UNLP y como Profesor Asociado Coordinador en Física 1 de la Universidad Nacional Arturo Jauretche. Es Investigador Independiente del CONICET, y coautor de más de 60 trabajos en revistas internacionales con referato. Ha dirigido varios proyectos de investigación en el área de Física de Materia Condensada y tres tesis doctorales (dos en curso).

Perrone, Cintia

Es Ingeniera Electrónica, egresada de la Facultad de Ingeniería de la UNLP. Ha participado en diferentes desarrollos tecnológicos en el Instituto Argentino de Radioastronomía (IAR) y en el Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp). Se ha desempeñado como docente en diversos cursos de Matemática y Física en Ingeniería (UNLP) siendo actualmente Jefe de Trabajos Prácticos del área Física General, cátedras Física II y Física III y Ayudante Diplomado del área Matemáticas Especiales, cátedra Matemática D, en la Facultad de Ingeniería de la UNLP.

Trivi, Marcelo

Doctor en Física de la Facultad de Ciencias Exactas (UNLP). Realizó estudios postdoctorales en Istituto Nazionale di Ottica (Florencia, Italia). Fue Profesor Titular (cátedra de Física II) en la Facultad de Ingeniería UNLP hasta su jubilación. Actualmente es Profesor Consulto. Perteneció a la Carrera del Investigador de la Comisión de Investigaciones Científicas, Provincia de Buenos Aires (CIC), alcanzando la categoría de Investigador Superior. Fue Senior Associate Member del International Centre for Theoretical Physics (Trieste, Italia). Su actividad de Investigación ha sido desarrollada en el Centro de Investigaciones Ópticas, siendo Director a cargo en 2010-2012. Ha trabajado en temas de procesamiento óptico-digital, metrología óptica y con su grupo ha sido pionero en el desarrollo de la técnica conocida como "Speckle dinámico". Ha publicado más de

110 trabajos científicos en revistas internacionales con referato, artículos en actas de Congresos y capítulos de libro. Ha sido Director de Tesis de Doctorado y Maestría, y proyectos de investigación en UNLP, CONICET, CIC, ANPCyT y Comunidad Europea.

Vélez Zea, Alejandro

Recibió el título de Físico de la Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia, y el de Doctor de la Facultad de Ciencias Exactas, área Física de la Universidad Nacional de La Plata. Se desempeñó hasta 2021 como Jefe de Trabajos Prácticos de la cátedra de Física III de la Facultad de Ingeniería (UNLP). Actualmente se desempeña como Profesor Asistente del Instituto de Física de la Universidad de Antioquia (Medellín, Colombia). También realiza actividades de investigación el Grupo de Óptica y Fotónica de la Universidad de Antioquia, centradas en el área del procesamiento óptico de información. Ha sido coautor de 39 trabajos en revistas científicas internacionales.

Física cuántica y relativista / Myrian Cristina Tebaldi ... [et al.] ; coordinación general de Myrian Cristina Tebaldi ; Mariano Creus ; Emiliano Muñoz. - 1a ed. - La Plata : Universidad Nacional de La Plata ; EDULP, 2023.
Libro digital, PDF - (Libros de cátedra)

Archivo Digital: descarga
ISBN 978-950-34-2339-4

1. Física. 2. Estadísticas. I. Tebaldi, Myrian Cristina, coord. II. Creus, Mariano, coord. III. Muñoz, Emiliano, coord.
CDD 530.133

Diseño de tapa: Dirección de Comunicación Visual de la UNLP

Universidad Nacional de La Plata – Editorial de la Universidad de La Plata
48 N.º 551-599 / La Plata B1900AMX / Buenos Aires, Argentina
+54 221 644 7150
edulp.editorial@gmail.com
www.editorial.unlp.edu.ar

EduLP integra la Red de Editoriales Universitarias Nacionales (REUN)

Primera edición, 2023
ISBN 978-950-34-2339-4
© 2023 - EduLP

FACULTAD DE
INGENIERÍA

e
exactas


EDITORIAL DE LA UNLP



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA