Robert M. Eisberg

fundamentos de FÍSICA moderna

LIMUSA
NORIEGA EDITORES

www.FreeLibros.me

Temas que trata la obra:

- La teoría de la relatividad
- La radiación térmica y el origen de la mecánica cuántica
- Electrones y cuantos
- El descubrimiento del núcleo atómico
- La teoría de Bohr de la estructura atómica
- Partículas y ondas
- Teoría de Schödinger de la mecánica cuántica
- Las soluciones a la ecuación de Schödinger
- Teoría de la perturbación
- Átomos con un electrón
- Momentos magnéticos, spin y efectos relativistas
- Partículas idénticas
- Átomos con varios electrones
- Los rayos X
- Teoría de las colisiones
- El núcleo

www.FreeLibros.me

FUNDAMENTOS DE FISICA MODERNA

www.FreeLibros.me

fundamentos de FÍSICA moderna

ROBERT MARTIN EISBERG
Profesor adjunto de Física
Universidad de California,
Santa Bárbara.

LIMUSA
NORIEGA EDITORES
MÉXICO • España • Venezuela • Colombia

www.FreeLibros.me

VERSIÓN AUTORIZADA EN ESPAÑOL DE LA OBRA PUBLICADA EN INGLÉS CON EL TÍTULO:
FUNDAMENTALS OF MODERN PHYSICS
© JOHN WILEY & SONS, INC.

COLABORADOR EN LA TRADUCCIÓN:
DR. FRANCISCO MEDINA NICOLAU
PROFESOR DE FÍSICA EN LA FACULTAD DE CIENCIAS E INVESTIGADOR TITULAR DEL INSTITUTO DE FÍSICA DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO. INVESTIGADOR DEL INSTITUTO NACIONAL DE ENERGÍA NUCLEAR.

REVISIÓN:
URBANO OSEGUERA VALLADARES
DOCTOR EN FÍSICA DE LA UNIVERSIDAD DE BOSTON, ESTADOS UNIDOS DE NORTEAMÉRICA. PROFESOR DE TIEMPO COMPLETO EN LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO.

LA PRESENTACIÓN Y DISPOSICIÓN EN CONJUNTO DE

FUNDAMENTOS DE FÍSICA MODERNA

SON PROPIEDAD DEL EDITOR. NINGUNA PARTE DE ESTA OBRA PUEDE SER REPRODUCIDA O TRANSMITIDA, MEDIANTE NINGÚN SISTEMA O MÉTODO, ELECTRÓNICO O MECÁNICO (INCLUYENDO EL FOTOCOPIADO, LA GRABACIÓN O CUALQUIER SISTEMA DE RECUPERACIÓN Y ALMACENAMIENTO DE INFORMACIÓN), SIN CONSENTIMIENTO POR ESCRITO DEL EDITOR.

DERECHOS RESERVADOS:

© 2000, EDITORIAL LIMUSA, S.A. DE C.V.
GRUPO NORIEGA EDITORES
BALDERAS 95, MÉXICO, D.F.
C.P. 06040
(5)521-21-05
01(800) 7-06-91-00
(5)512-29-03
limusa@noriega.com.mx
www.noriega.com.mx

CANIEM NÚM. 121

OCTAVA REIMPRESIÓN

HECHO EN MÉXICO
ISBN 968-18-0418-X

www.FreeLibros.me

A

Jacob Louis Eisberg

www.FreeLibros.me

Prólogo

Este libro tuvo su origen en unas notas mimeografiadas que estuve empleando como texto en la Universidad de Minnesota, para el curso avanzado de un año de Física Moderna a nivel de licenciatura. La selección del material refleja algunas de las ideas que tengo respecto a tal curso.

Es mi firme convicción que un curso moderno de Física Moderna debe tener un doble propósito: enseñar muchos de los temas usuales de dicha asignatura y, además, aprovechar al máximo esa oportunidad única de proporcionarle al estudiante, en las primeras etapas de su educación, una introducción a la mecánica cuántica, integrando en ella la teoría con su desarrollo histórico y aplicaciones. La introducción debe ser elemental —aunque no sumaria, ya que esto sólo aumentaría los problemas que suelen tener los alumnos, al iniciar el estudio de la mecánica cuántica. Este no es un curso breve, pero tiene la gran ventaja de sentar los cimientos para un estudio realmente serio del átomo y del núcleo. No cabe duda que, en un año, el estudiante puede aprender mucho más cerca de estos temas, si la mitad del curso se dedica al desarrollo de las bases teóricas, en vez de exponer la materia al nivel esencialmente empírico.

Ya que la mecánica cuántica incluida en este libro se presenta en forma más amplia que la usual, tuve que sacrificar ciertos temas. Entonces, considerando que la mayoría de los planes de estudio a nivel de licenciatura incluyen un curso de física del estado sólido, el material que omití es el que se cubre en dicho curso.

El haber incluido en este libro los temas que comúnmente se imparten en cursos más avanzados no significa que el lector debe poseer los conocimientos a nivel postgraduado. He tratado de explicar los antecedentes históricos de cada tema y abordar el mismo, empleando argumentos que pueden comprender quienes ya adquirieron buena preparación en física elemental y cálculo intermedio. Casi todo el material del libro, lo he presentado en dos o tres ocasiones a grupos muy heterogéneos de estudiantes de física, química, matemáticas e ingeniería, en cursos de licenciatura a postgraduado. De su aprovechamiento pude deducir que los estudiantes

www.FreeLibros.me

de todos los niveles, y de todas las especialidades, comprenden bien este curso.

Sin embargo, el material que contiene el libro en su forma definitiva es alrededor de un veinte por ciento mayor que el que puede enseñarse en un curso de 90 horas. Además, como el nivel de la exposición se va elevando, conforme se desarrolla el texto, el libro puede adaptarse a diferentes necesidades. En un curso para los estudiantes de licenciatura que apenas principian la física moderna, se debe cubrir en clase todo el material presentado hasta el capítulo 8 y asignar, como lectura complementaria, los temas de los capítulos restantes. Un curso más avanzado para quienes ya estudiaron física moderna a nivel elemental, puede iniciarse con un repaso muy rápido del material presentado hasta el capítulo 5, dejando los detalles para lectura fuera de la clase, y continuar con un estudio a fondo de los capítulos posteriores. El libro también contiene material suficiente para un curso semestral de introducción a la mecánica cuántica.

Quiero agradecer a mis colegas de la Universidad de Minnesota, en particular a los doctores W. B. Cheston, C. E. Porter y D. R. Yennie, por la lectura de algunas partes de las notas mimeografiadas y sus acertados comentarios. También agradezco a mi esposa Lila por la ayuda y estímulo constantes que me permitieron terminar este libro.

R. M. Eisberg.

www.FreeLibros.me

Contenido

Introducción 13

1. ¿Qué es la física moderna? 13. 2. Reseña histórica, 13.

1. **La teoría de la relatividad** 17

1. La transformación galileana y la mecánica clásica, 17. 2. La transformación galileana y la teoría electromagnética, 20. 3. El experimento de Michelson y Morley, 22. 4. Los postulados de Einstein, 28. 5. Simultaneidad, 29. 6. Efectos cinemáticos de la relatividad, 31. 7. La transformación de Lorentz, 36. 8. Transformación de la velocidad, 39. 9. La mecánica relativista, 41. 10. Transformación del impulso y de la energía, 47. 11. Verificación experimental de la teoría, 48. Bibliografía, 49. Ejercicios, 50.

2. **La radiación térmica y el origen de la mecánica cuántica** 51

1. Introducción, 51. 2. La emisión de la radiación electromagnética por cargas aceleradas, 51. 3. Emisión y absorción de la radiación por superficies, 56. 4. La radiación del cuerpo negro, 56. 5. La ley de Wien, 59. 6. La teoría de Rayleigh y Jeans, 60. 7. La distribución de probabilidad de Boltzmann, 65. 8. Comparación con el experimento, 70. 9. La teoría de Planck, 70. 10. Algunos comentarios sobre el postulado de Planck, 74. Bibliografía, 76. Ejercicios, 76.

3. **Electrones y cuantos** 79

1. Los rayos catódicos, 79. 2. La relación e/m para los electrones, 80. 3. La carga y la masa del electrón, 82. 4. El experimento de Bucherer, 83. 5. El efecto fotoeléctrico, 84. 6. La

www.FreeLibros.me

teoría clásica del efecto fotoeléctrico, 86. 7. La teoría cuántica del efecto fotoeléctrico, 87. El efecto Compton, 89. 9. La naturaleza dual de la radiación electromagnética, 92. Bibliografía, 93. Ejercicios, 93.

4. El descubrimiento del núcleo atómico 95

1. El modelo atómico de Thomson, 95. 2. Partículas alfa, 96. 3. La dispersión de partículas alfa, 98. 4. Predicciones basadas en el modelo de Thomson, 99. 5. Comparación con el experimento, 105. 6. El modelo atómico de Rutherford, 106. 7. Predicciones basadas en el modelo de Rutherford, 107. 8. Comprobación experimental y determinación de Z, 112. 9. El tamaño del núcleo, 113. 10. Un problema, 114. Bibliografía, 115. Ejercicios, 115.

5. La teoría de Bohr de la estructura atómica 117

1. El espectro atómico, 117. 2. Los postulados de Bohr, 120. 3. La teoría de Bohr del átomo con un electrón, 121. 4. Corrección por masa nuclear finita, 127. 5. Estados de energía atómica, 130. 6. Las reglas de cuantización de Wilson y Sommerfeld, 134. 7. La teoría relativista de Sommerfeld, 137. 8. El principio de correspondencia, 140. 9. Una crítica a la antigua teoría cuántica, 141. Bibliografía, 142. Ejercicios, 142.

6. Partículas y ondas 145

1. El postulado de De Broglie, 145. 2. Algunos propiedades de las ondas piloto, 147 3. Confirmación experimental del postulado de De Broglie, 151. 4. Interpretación de la regla de cuantización de Bohr, 156. 5. El principio de incertidumbre, 158. 6. Algunas consecuencias del principio de incertidumbre, 164. Bibliografía, 167. Ejercicios, 167.

7. Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica 169

1. Introducción, 169. 2. La ecuación de Schrödinger, 169. 3. Interpretación de la función de onda, 175. 4. La ecuación de Schrödinger, independiente del tiempo, 180. 5. Cuantización de la energía en la teoría de Schrödinger, 182. 6. Propiedades matemáticas de las funciones de onda y de las funciones propias, 188. 7. La teoría clásica de las ondas transversales en una cuerda tensa, 195. 8. Valores esperados y operadores diferenciales, 204. 9. El límite clásico de la mecánica cuántica, 210. Bibliografía, 213. Ejercicios, 213.

www.FreeLibros.me

8. **Las soluciones a la ecuación de Schrödinger** 215

1. La partícula libre, 215. 2. El potencial de escalón, 223. 3. Potenciales de barrera, 233. 4. Potenciales de pozo cuadrado, 240. 5. El potencial cuadrado infinito, 252. 6. El oscilador armónico simple, 256. Bibliografía, 266. Ejercicios, 266.

9. **Teoría de la perturbación** 269

1. Introducción, 269. 2. Las perturbaciones independientes del tiempo, 269. 3. Un ejemplo, 274. 4. El tratamiento de las degeneraciones, 278. 5. Teoría de la perturbación dependiente del tiempo, 284. Bibliografía, 291. Ejercicios, 291.

10. **Atomos con un electrón** 293

1. La mecánica cuántica, en varias dimensiones y para muchas partículas, 293. 2. El átomo con un electrón, 295. 3. Separación y solución de la ecuación del movimiento relativo, 298. 4. Números cuánticos, valores propios y degeneración, 302. 5. Funciones propias y densidades de probabilidad, 304. 6. Los operadores de impulso angular, 312. 7. Ecuaciones de valores propios, 316. 8. Impulso angular de las funciones propias del átomo con un electrón, 321. Bibliografía, 322. Ejercicios, 323.

11. **Momentos magnéticos, spin y efectos relativistas** 325

1. Momentos magnéticos orbitales, 325. 2. Efectos de un campo magnético externo, 327. 3. El experimento de Stern y Gerlach y el spin del electrón, 331. 4. La interacción spin-órbita, 335. 5. El impulso angular total, 343. 6. Correcciones relativistas para átomos con un electrón, 349. Bibliografía, 354. Ejercicios, 354.

12. **Partículas idénticas** 355

1. Descripción cuántica de las partículas idénticas, 355. 2. Funciones propias simétricas y antisimétricas, 358. 3. El principio de exclusión, 360. 4. Otras propiedades de las funciones propias antisimétricas, 363. 5. El átomo de helio, 368. 6. El gas de Fermi, 375. Bibliografía, 383. Ejercicios, 383.

13. **Atomos con varios electrones** 385

1. Introducción, 385. 2. La teoría de Thomas-Fermi, 386. 3.

www.FreeLibros.me

La teoría de Hartree, 389. 4. La tabla periódica, 400. 5. Estados excitados de los átomos, 407. 6. Los átomos alcalinos, 409. 7. Atomos con varios electrones ópticamente activos, 416. 8. El acoplamiento LS, 418. 9. El acoplamiento JJ, 430. 10. El efecto Zeeman, 432. 11. La estructura hiperfina, 437. 12. Rapidez de transición y reglas de selección, 441. 13. Vida media y anchura de la línea, 455. Bibliografía, 460. Ejercicios, 460.

14. Los rayos X **463**

1. El descubrimiento de los raxos X, 463. 2. Medida del espectro de rayos X, 464. 3. Espectros de línea de rayox X, 471. 4. Rayos X del espectro continuo, 476. 5. La dispersión de rayos X, 480. 6. El efecto fotoeléctrico y la producción de pares, 492. 7. Las secciones totales y el coeficiente de atenuación, 496. 8. Los positrones y otras antipartículas, 499. Bibliografía, 503. Ejercicios, 503.

15. Teoría de las colisiones **505**

1. Introducción, 505. 2. Transformaciones de laboratorio y centro de masa, 506. 3. La aproximación de Born, 511. 4. Algunas aplicaciones de la aproximación de Born, 518. 5. Análisis en ondas parciales, 522. 6. Algunas aplicaciones del análisis de ondas parciales, 533. 7. Absorción. 342, Bibliografía, 545. Ejercicios, 545.

16. Los núcleos **549**

1. Introducción, 547. 2. Composición de los núcleos, 549. 3. Los tamaños nucleares y el modelo óptico, 552. 4. Masas nucleares y abundancias, 566. 5. El modelo de la gota de líquido y la fórmula semiempírica de la masa, 576. 6. Números mágicos, 578. 7. El modelo de gas de Fermi, 580. 8. El modelo de capas, 585. 9. El modelo colectivo, 590. 10. Desintegración alfa y fisión, 594. 11. Desintegración beta, 605. 12. Conversión interna y desintegración gamma, 625. 13. Propiedades de los estados excitados, 638. 14. Reacciones nucleares, 647. 15. Fuerzas nucleares, 658. 16. Mesones, 677. Bibliografía, 686. Ejercicios, 686.

Indice **689**

www.FreeLibros.me

Introducción

1. ¿Qué es la física moderna?

Según el diccionario de Webster el vocablo "moderno" en su primera acepción se define como "perteneciente a la época actual o un pretérito no muy lejano". Sin embargo, cuando un físico habla de *física moderna* este adjetivo tiene un sentido algo distinto, pues la expresión se usa para designar ciertos campos específicos de la física. Todos estos campos tienen en común dos características: la primera, que se han desarrollado a partir del año 1900, aproximadamente, y la segunda, que las teorías empleadas para explicar los fenómenos propios de dichos campos son completamente diferentes de las teorías que existían antes de 1900.

El término opuesto al de física moderna es el de *física clásica.* Esta comprende el estudio de la mecánica de Newton y los diversos fenómenos que pueden explicarse en términos de la misma, la teoría de Maxwell de los fenómenos electromagnéticos y sus aplicaciones, la termodinámica y la teoría cinética de los gases. Los temas que estudia la física moderna son: la teoría de la relatividad y los fenómenos relacionados con ella, las teorías y los fenómenos cuánticos y, en particular, la aplicación de las teorías de la relatividad y la cuántica al átomo y al núcleo.

En la actualidad, son muchos los físicos que trabajan en los campos de la física clásica y, por otra parte, la teoría de la relatividad, que se remonta a 1905, ciertamente no es moderna en el sentido de la definición de Webster. Observamos que los calificativos *moderna* y *clásica,* tal como se emplean en física, carecen del significado temporal con el que se usan normalmente. Este libro tratará de la física moderna. Sin embargo, como punto de partida daremos una descripción sumamente breve de la situación que imperaba en la física clásica al terminar el siglo XIX.

2. Reseña histórica

Las observaciones astronómicas de Tycho Brahe y la interpretación que les dio Kepler, sumadas a los experimentos de Galileo (todos ellos efectuados en las primeras décadas del siglo XVII), por obra de Newton (1687), crista-

www.FreeLibros.me

lizaron en una teoría elegante y simple de la mecánica. Al fin del siglo XIX, esta teoría había adquirido gran desarrollo. Proporcionaba una explicación adecuada de todos los fenómenos mecánicos conocidos en aquel entonces y servía de base a la teoría cinética de los gases que, a su vez, aclaraba muchas incógnitas de la termodinámica.

Durante el siglo XIX, se descubrieron numerosos y variados fenómenos relativos a los campos eléctricos y magnéticos y a su interacción mutua. En 1864, Maxwell conjugó este cúmulo de datos formulando su brillante teoría. Así, proporcionó una explicación de la propagación ondulatoria de la luz que estaba acorde con lo que entonces se conocía tanto de la óptica geométrica como de la óptica física.

En efecto, casi todos los datos experimentales conocidos en esa época podían explicarse ya sea por la mecánica de Newton o por la teoría electromagnética de Maxwell. Los físicos empezaban a vanagloriarse de su ciencia y se cuenta que la mayoría de ellos eran de la opinión que sus sucesores se dedicarían meramente a "efectuar mediciones para determinar la siguiente cifra decimal".

Al principiar el siglo XX, todo ese mundo sereno se derrumbó por el impacto de una serie de desarrollos experimentales y teóricos verdaderamente revolucionarios, tales como la teoría de la relatividad, que exige que rechacemos unas ideas profundamente enraizadas sobre el espacio y el tiempo y las teorías cuánticas, que requieren otro tanto con respecto a la noción intuitiva de la continuidad en la naturaleza.

Nuestro estudio de la física moderna empieza con la teoría de la relatividad; esto no se debe a consideraciones cronológicas, ya que la relatividad y las primeras teorías cuánticas se desarrollaron en forma simultánea, sino que este orden permite presentar ambos temas con mayor claridad. Después de una exposición bastante breve de la relatividad se tratarán en forma semejante las primeras teorías cuánticas. Esto nos conducirá a la mecánica cuántica; la estudiaremos con detalle y, posteriormente, la aplicaremos al análisis cabal del átomo y del núcleo.

www.FreeLibros.me

FUNDAMENTOS DE FISICA MODERNA

www.FreeLibros.me

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 1

La teoría de la relatividad

1. La transformación galileana y la mecánica clásica

De acuerdo con la física clásica, el estado de cualquier sistema mecánico al tiempo t_0 puede determinarse construyendo un conjunto de ejes coordenados y especificando las coordenadas y los impulsos de las diferentes partes del sistema a ese tiempo. Si conocemos las fuerzas que actúan sobre sus partes, es posible, mediante las leyes de Newton, calcular el estado del sistema a cualquier tiempo futuro t en términos de su estado al tiempo t_0. Frecuentemente es deseable, durante o después del cálculo, especificar el estado del sistema en términos de un nuevo conjunto de ejes coordenados que se mueve respecto al primero. Entonces, surge una pregunta doble: ¿cómo transformamos nuestra descripción del sistema de las coordenadas antiguas a las nuevas y, al hacer esta transformación, qué les pasa a las ecuaciones que rigen el comportamiento del sistema? A menudo, se presenta la misma pregunta, cuando se aplican las ecuaciones de Maxwell a los sistemas electromagnéticos. Este es el problema que le concierne a la *teoría de la relatividad*.

Veamos qué respuesta daría la mecánica clásica a esta pregunta. Consideremos el sistema mecánico más simple posible: una partícula de masa m bajo la acción de una fuerza $\mathbf{F}$.* Describamos el sistema mediante coordenadas rectangulares, como se indica en la figura 1–1.

Los cuatro números (x, y, z, t) nos dicen que al tiempo t la partícula se encuentra en el punto de coordenadas x, y, z. Suponiendo que conocemos $\mathbf{F}$, las leyes de Newton

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = F_x$$

$$m\frac{d^2y}{dt^2} = F_y \qquad (1\text{–}1)$$

$$m\frac{d^2z}{dt^2} = F_z$$

* Se empleará el tipo negrilla para los símbolos que representan una cantidad vectorial. El mismo símbolo, pero en tipo normal, indicará el módulo de la cantidad vectorial.

www.FreeLibros.me

donde F_x, F_y, F_z, son las componentes x, y, z, del vector **F**, respectivamente, nos dan un conjunto de ecuaciones diferenciales que gobiernan al movimiento

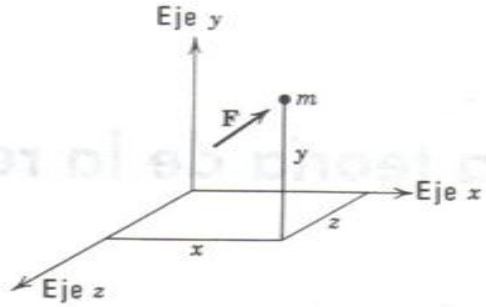

Figura 1-1. Un conjunto de coordenadas rectangulares.

del sistema. Estas ecuaciones sólo son válidas si el marco de referencia definido por las coordenadas x, y, z es un *marco inercial*, esto es, un marco de referencia en el cual un cuerpo libre de fuerzas, e inicialmente en reposo, permanecerá en reposo. Si conocemos las tres coordenadas y las tres componentes del impulso de la partícula al tiempo inicial t_0, podemos calcular las dos constantes arbitrarias que aparecen en la solución general de cada una de las ecuaciones diferenciales (1–1) y hacer predicciones específicas sobre la ubicación (e impulso) de la partícula a cualquier tiempo t.

Consideremos ahora el problema de describir el sistema desde el punto de vista de un nuevo marco de referencia x', y', z', que se mueve hacia la derecha con velocidad constante **u** con respecto al antiguo marco de referencia, como se indica en la figura 1–2, de modo que su orientación relativa no varíe en el transcurso del tiempo. Se dice que estos marcos de referencia se encuentran en estado de mutua *translación uniforme*. Tenemos ahora dos conjuntos de cuatro números, (x, y, z, t) y (x', y', z', t'), que pueden emplearse indistintamente para especificar la ubicación de la partícula en cualquier instante de tiempo t y t', que son los tiempos medidos en los dos marcos de referencia, de modo que $t = t' = 0$ cuando ambos marcos coinciden. ¿Qué relación existe entre los dos conjuntos de números, (x, y, z, t) y (x', y', z', t')? Newton, casi todos los físicos anteriores a 1900 y, muy probablemente, también el lector, no dudarían en afirmar que

$$\begin{aligned} x' &= x - ut \\ y' &= y \\ z' &= z \\ t' &= t \end{aligned} \tag{1–2}$$

A estas ecuaciones se las conoce con el nombre de *transformación galileana*. Son la respuesta que da la física clásica a la primera parte de la pregunta, que hemos formulado para el caso del movimiento de translación uniforme entre dos marcos de referencia.

www.FreeLibros.me

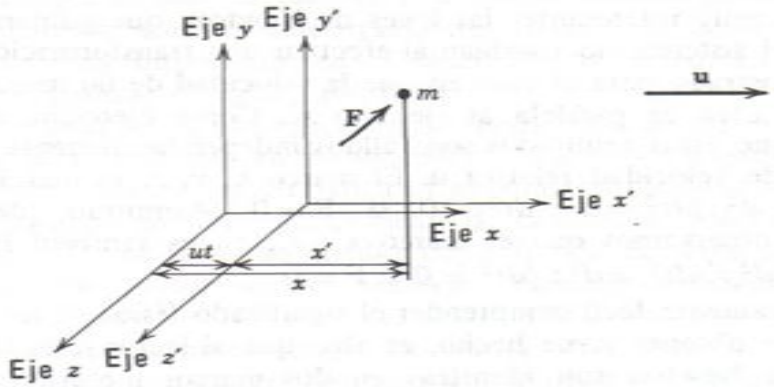

Figura 1-2. Dos marcos de referencia en translación uniforme. Se supone que los ejes x y x' son colineales.

Para responder a la segunda parte de la pregunta, calculemos la cantidad d^2x'/dt'^2. Derivando la primera ecuación (1–2) con respecto a t tenemos

$$dx'/dt = dx/dt - u$$

y

$$d^2x'/dt^2 = d^2x/dt^2$$

Puesto que $t' = t$

$$d^2x'/dt'^2 = d^2x/dt^2$$

Se tiene

$$d^2y'/dt'^2 = d^2y/dt^2 \quad \text{y} \quad d^2z'/dt'^2 = d^2z/dt^2$$

También es cierto que $F_{x'} = F_x$, $F_{y'} = F_y$, $F_{z'} = F_z$, debido a que la componente de **F** en la dirección del eje x o x' es la misma, vista desde cualquier marco de referencia, lo cual es también cierto para las otras componentes. Combinando estas relaciones con las expresiones (1–1), las ecuaciones de movimiento en el sistema primo son:

$$m\frac{d^2x'}{dt'^2} = F_{x'}$$

$$m\frac{d^2y'}{dt'^2} = F_{y'} \qquad (1\text{–}3)$$

$$m\frac{d^2z'}{dt'^2} = F_{z'}$$

Observe que las ecuaciones (1–3) tienen la misma forma matemática que las ecuaciones (1–1). De este modo, la respuesta a la segunda parte de la

www.FreeLibros.me

pregunta es muy interesante: las leyes de Newton, que gobiernan el comportamiento del sistema, no cambian al efectuar una transformación galileana. Lo hemos demostrado para el caso en que la velocidad de un marco de referencia respecto al otro es paralela al eje x o x'. Como ejercicio, el lector podrá demostrar que estos resultados son válidos independientemente de la dirección del vector de velocidad relativa **u**. El marco x, y, z, es inercial, puesto que, $d^2x/dt^2 = d^2y/dt^2 = d^2z/dt^2 = 0$ si $\mathbf{F} = 0$. Asimismo, de las ecuaciones (1–3), observamos que el marco x', y', z', es también inercial, ya que $d^2x'/dt'^2 = d^2y'/dt^2 = d^2z'/dt^2 = 0$ si $\mathbf{F} = 0$.

Es relativamente fácil comprender el significado físico de los resultados que acabamos de obtener y, de hecho, es algo que al lector le es familiar. Ya que las leyes de Newton son idénticas en dos marcos inerciales cualesquiera y puesto que el comportamiento de un sistema mecánico está determinado por ellas, se infiere que el comportamiento de los sistemas mecánicos será idéntico en todos los marcos inerciales, aunque se encuentren en mutua translación uniforme. Considere un laboratorio en un vagón de ferrocarril. Cuando el vagón se encuentra en reposo con respecto a la superficie de la tierra (suponiendo que esta última es un marco inercial), ejecutamos una serie de experimentos mecánicos como, por ejemplo, la medida del período de oscilación de un péndulo o la investigación de la mecánica de las colisiones mediante un juego de billar seriamente realizado. Si efectuamos los mismos experimentos cuando el vagón se mueve con rapidez constante sobre una vía lisa y recta, y ya que las ecuaciones (1–1) y (1–3) son de forma idéntica, debe tenerse que los resultados experimentales obtenidos sean iguales a los que se obtuvieron cuando el vagón se encontraba en reposo. Esto concuerda, ciertamente, con nuestra experiencia diaria.

Vemos, entonces, que la mecánica de Newton predice que todos los marcos inerciales que se encuentran en movimiento mutuo con velocidad constante son equivalentes en lo que se refiere a fenómenos de carácter mecánico. Como corolario tenemos: no puede emplearse ningún fenómeno mecánico para distinguir entre marcos inerciales. O sea, que es imposible mediante experimentos mecánicos demostrar que uno de los marcos se encuentra en estado de reposo absoluto mientras que los demás se mueven respecto a éste: si se cubrieran las ventanas del vagón que se mueve suavemente sobre la vía, seríamos incapaces de detectar su movimiento.

2. La transformación galileana y la teoría electromagnética

A continuación nos preguntamos sobre el comportamiento de los fenómenos electromagnéticos al realizar una transformación galileana. Los fenómenos electromagnéticos se discuten, en la física clásica, en términos de un conjunto de ecuaciones diferenciales (llamadas ecuaciones de Maxwell), de la misma manera que la mecánica discute los fenómenos mecánicos en términos de un conjunto de ecuaciones diferenciales que los gobiernan (llamadas leyes de Newton). No efectuaremos explícitamente la transformación de las ecuaciones de Maxwell, ya que el cálculo es bastante complicado debido a la naturaleza misma de estas ecuaciones. Sin embargo, se encuentra que *cambia*

www.FreeLibros.me

su forma matemática cuando se efectúa una transformación galileana, lo que contrasta notablemente con el comportamiento de las ecuaciones de Newton. Este es un punto muy importante en el desarrollo de la teoría de la relatividad, y debemos analizar su significado físico.

Como se mencionó en la introducción, las ecuaciones de Maxwell predicen la existencia de perturbaciones electromagnéticas que se propagan a través del espacio en la forma que es característica al movimiento ondulatorio, con una rapidez de propagación que es independiente de la frecuencia del movimiento ondulatorio (por lo menos en un medio cuyo índice de refracción es constante). Aunque estas perturbaciones reciben diferentes nombres (ondas de radio para la frecuencia $\sim 10^8$/seg, radiación infrarroja para la frecuencia $\sim 10^{13}$/seg, ondas luminosas para la frecuencia $\sim 10^{15}$/seg, rayos X para la frecuencia $\sim 10^{19}$/seg), pertenecen básicamente al mismo fenómeno. Los físicos del siglo XIX, cuya visión era sumamente mecanicista, se sintieron relativamente seguros de que la propagación de las ondas predichas por las ecuaciones de Maxwell, requería que hubiese un medio donde propagarse. Argumentaban que así como las ondas de agua se propagan en el agua, las ondas electromagnéticas deberían propagarse a través de un medio. A éste se le dio el nombre de *éter*. Para no discrepar con algunos hechos conocidos, el éter debería tener ciertas propiedades extrañas: debería carecer de masa, ya que se observaba que las ondas electromagnéticas como la luz, podían propagarse en el vacío. Por otra parte, debería poseer propiedades elásticas para soportar las vibraciones que son inherentes a la idea de movimiento ondulatorio. A pesar de estas dificultades, el concepto de éter era considerablemente más atractivo que suponer, alternativamente, que las perturbaciones electromagnéticas se propagasen sin necesitar medio alguno. Una vez supuesta la existencia del éter, era de esperarse que las perturbaciones se propagaran en él con rapidez constante, del mismo modo que las ondas sonoras se propagan con una rapidez constante respecto al aire.

Se supuso que las ecuaciones electromagnéticas, en la forma presentada por Maxwell, eran válidas en el marco de referencia que se encuentra en reposo respecto al éter, el *marco del éter*. Una solución a estas ecuaciones conduce a calcular la rapidez de propagación de las ondas electromagnéticas. El resultado fue de 3.00×10^{10} cm/seg $\equiv c$, en concordancia, dentro de la precisión experimental, con el valor de la velocidad de la luz medido por Fizeau (1849). Sin embargo, en un marco de referencia que se translada uniformemente con respecto al éter, las ecuaciones de Maxwell tendrían una forma matemática distinta a la que tienen en el marco del éter, puesto que, como se mencionó anteriormente, una transformación galileana cambia la forma de las ecuaciones. Al calcular la rapidez de propagación de las ondas electromagnéticas *en el nuevo marco de referencia*, empleando las ecuaciones de Maxwell en la forma que toman en este marco, se encontraba un valor distinto para c. La razón es que la rapidez de propagación predicha por las ecuaciones, como es de esperarse, depende de la forma de las ecuaciones.

Entonces, al aplicar una transformación galileana a las ecuaciones de Maxwell y resolverlas, se encuentra que la velocidad de la luz medida en el nuevo marco de referencia es diferente de la velocidad medida en el marco del éter. No es necesario describir con detalle la relación entre la velocidad de la luz en

www.FreeLibros.me

el marco del éter, la velocidad de la luz en el nuevo marco y la velocidad de éste con respecto al marco* del éter, ya que es lo que se obtendría mediante una suma vectorial simple (que se explica al principio de cualquier texto elemental de física), o sea,

$$\mathbf{V}_{\text{luz cra nuevo marco}} = \mathbf{V}_{\text{luz cra éter}} - \mathbf{V}_{\text{nuevo marco cra éter}} \qquad (1\text{–}4)$$

donde $V_{\text{luz cra eter}} = c$, cra = con respecto al. El cálculo, un tanto complicado, de la velocidad de la luz medida en el nuevo marco de referencia, que consiste en transformar las ecuaciones de Maxwell al nuevo marco y después resolverlas, concuerda con la idea física muy simple de que la luz se propaga de tal modo que su velocidad respecto al marco del éter es siempre c, y que su velocidad respecto a cualquier otro marco puede encontrarse por la simple suma vectorial de las velocidades. Observe que los argumentos intuitivos aducidos para justificar la validez de la suma vectorial de las velocidades son básicamente los mismos que los argumentos dados para establecer la transformación galileana.

En resumen, al terminar el siglo XIX, la física estaba apoyada en tres hipótesis fundamentales: *a*) la validez de las leyes de Newton, *b*) la validez de las ecuaciones de Maxwell y *c*) la validez de la transformación galileana. Casi todo lo que pudiera ser derivado de ellas concordaba bien con el experimento, cuando el experimento adecuado había sido efectuado. Respecto a las preguntas que hemos discutido, las hipótesis predecían que todos los marcos inerciales de referencia en mutua translación uniforme, eran equivalentes en lo que respecta a fenómenos mecánicos, aunque no lo eran en relación a fenómenos electromagnéticos; para ellos sólo existe un marco de referencia, el marco del éter, en el cual la velocidad de la luz es igual a c.

3. El experimento de Michelson y Morley

Michelson y Morley (1887) realizaron un experimento de gran importancia. Fue diseñado para demostrar la existencia de un marco especial de referencia, el marco del éter, y determinar en éste el movimiento de la Tierra.

La Tierra viaja alrededor del Sol, en una órbita aproximadamente circular, con un período (por definición), de un año, y con una velocidad orbital del orden de 3×10^6 cm/seg. Parece inadecuado suponer *a priori* que el marco del éter acompaña a la Tierra en su movimiento. Como veremos posteriormente, en aquel tiempo ya se conocían argumentos de peso en contra de esta hipótesis. Una hipótesis más razonable sería suponer que el marco del éter se encuentra en reposo respecto al centro de masa de nuestro sistema solar, o suponerlo en reposo respecto al centro de masa del universo. En el primer caso la velocidad de la Tierra respecto al marco del éter tendría una magnitud del orden de 10^6 cm/seg, y, además, la orientación de la velocidad cambiaría durante el transcurso del año. (La velocidad de un punto de la Tierra debido a la rotación diaria es despreciable en comparación a la velocidad orbital.) En el segundo caso, la velocidad de la Tierra con respecto al marco del éter sería aún mayor.

* El término *con respecto al*, lo abreviaremos "cra".

www.FreeLibros.me

La idea básica del experimento de Michelson y Morley consistía en medir la velocidad de la luz, con respecto a un marco fijo en la Tierra, en dos direcciones perpendiculares. Una consideración breve basada en la teoría clásica, resumida en la ecuación (1–4), mostraría que la velocidad aparente de la luz respecto a la Tierra dependería de la dirección de propagación de la luz. A primera vista podría esperarse que el orden de magnitud del efecto observado en tal medida sería de

$$\frac{|\text{velocidad de la Tierra } cra \text{ éter}|}{|\text{velocidad de la luz } cra \text{ éter}|} \sim \frac{3 \times 10^6}{3 \times 10^{10}} \sim 10^{-4}$$

donde hemos supuesto que el marco del éter está fijo respecto al sistema solar. Pero un teorema de Fresnel y Lorentz establece que es imposible diseñar un experimento óptico donde la velocidad del aparato respecto al éter pueda

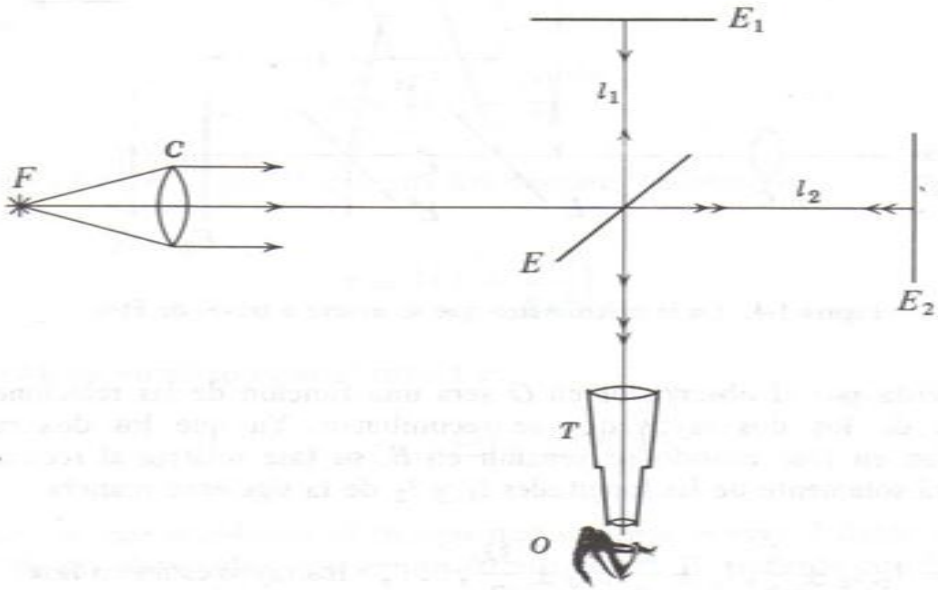

Figura 1-3. Un interferómetro.

producir un efecto de primer orden; el efecto máximo es de segundo orden. Esto significa que un aparato diseñado para observar la diferencia de velocidad en dos direcciones perpendiculares debe ser capaz de registrar diferencias del orden de $(10^{-4})^2 = 10^{-8}$. Demostraremos este teorema en un caso particular en el transcurso de nuestra discusión del aparato de Michelson y Morley.

La estimación numérica que acabamos de hacer indica que sería necesario un aparato extremadamente sensible para observar los efectos debidos al movimiento de la Tierra con respecto al éter y sería necesario un aparato aún más sensible si se pidieran medidas cuantitativas. Para efectuar el experimento, Michelson y Morley diseñaron un interesante dispositivo, un interferómetro, que se muestra esquemáticamente en la figura 1–3.

www.FreeLibros.me

Consideremos sucintamente la forma de operación de este dispositivo. (Para mayores detalles el lector deberá consultar algún texto de óptica física.) En primer lugar, suponga que el aparato se encuentra en reposo respecto al éter. La luz emitida por la fuente F es colimada por la lente C. Considere el rayo central mostrado en la figura. Este rayo incide a 45° sobre el espejo semiplateado E. Este espejo tiene la propiedad de reflejar la mitad de la luz incidente y de transmitir la otra mitad. De este modo, el rayo incidente se separa en los rayos 1 y 2, que se dirigen a los espejos E_1 y E_2, donde son reflejados sobre sí mismos. La mitad de cada uno de estos rayos que regresan a E se dirigen a un telescopio T. La intensidad de la luz, debida al rayo

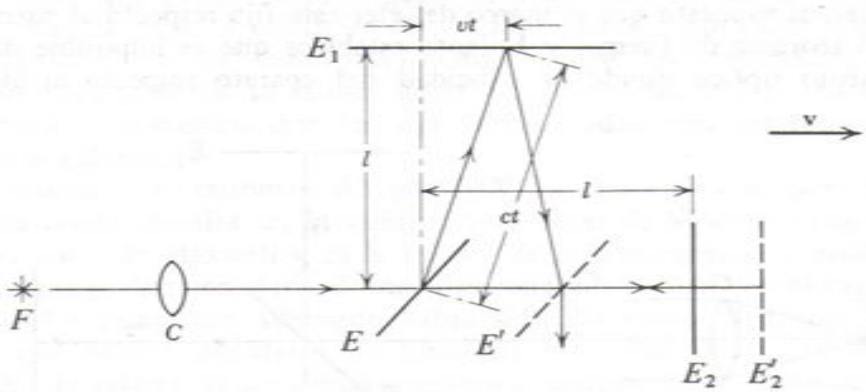

Figura 1-4. Un interferómetro que se mueve a través de éter.

central, vista por el observador en O será una función de las relaciones entre las fases de los dos rayos que se recombinan. Ya que los dos rayos se encuentran en fase cuando se separan en E, su fase relativa al recombinarse dependerá solamente de las longitudes l_1 y l_2 de la siguiente manera

$$\text{si } l_1 = l_2, l_2 \pm \frac{\lambda}{2}, l_2 \pm \frac{2\lambda}{2}, l_2 \pm \frac{3\lambda}{2}, \ldots, \quad \text{los rayos están en fase}$$

$$\text{si } l_1 = l_2 \pm \frac{\lambda}{4}, l_2 \pm \frac{3\lambda}{4}, l_2 \pm \frac{5\lambda}{4}, \ldots, \quad \text{los rayos están fuera de fase}$$

donde λ es la longitud de onda de la luz. Este dispositivo puede emplearse en diversas formas. Por ejemplo: actualmente se define el metro patrón en términos de la longitud de onda de cierta línea espectral empleando un interferómetro.

Consideremos a continuación un interferómetro que se mueve con velocidad **v** respecto al éter, paralelamente a la dirección del rayo 2, como se indica en la figura 1–4. Supongamos que $l_1 = l_2 = l$. En este caso, el haz luminoso incidente se separa al reflejarse en un espejo que se mueve respecto al éter. Suponiendo que la luz viaja con velocidad constante en el marco del éter, puede mostrarse fácilmente por la construcción de Huygens, que el rayo

www.FreeLibros.me

reflejado será enviado hacia adelante precisamente a un ángulo de modo que, después de reflejarse en E_1, estará sobre el eje definido por F y C a tiempo para encontrar a E. Este no es un punto crucial, ya que es posible suponer que E sea un espejo rugoso que refleje difusamente la luz. La figura 1–4 muestra la situación que se le presenta a un observador en el marco del éter; E' indica la posición de E cuando el rayo reflejado por E_1 llega a él y E'_2 la posición que ocupa E_2 al instante en que refleja al rayo 2.

Para evaluar la relación entre las fases de los rayos que se recombinan, calculemos el tiempo que emplean en recorrer sus respectivas trayectorias. Desde el punto de vista del marco del éter, el rayo 1 recorre una trayectoria oblicua de longitud ct en el tiempo t. Durante este tiempo el aparato se mueve la distancia vt hacia la derecha. De la figura inferimos que

$$c^2t^2 = v^2t^2 + l^2$$

de donde

$$t = \frac{l}{c}\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}$$

Puesto que $v^2/c^2 \ll 1$, por el teorema del binomio obtenemos

$$t = \frac{l}{c}\left(1 + \frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2}\right)$$

El tiempo total empleado por el rayo 1 es

$$t_1 = 2t = \frac{2l}{c}\left(1 + \frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2}\right)$$

Fácilmente se puede calcular el tiempo que requiere el rayo 2 desde el punto de vista de un observador que acompaña al aparato. De acuerdo con la última de las ecuaciones (1–2), no aparecerán dificultades para evaluar los intervalos de tiempo en los diferentes marcos de referencia. La ecuación (1–4) predice que, para este observador, la velocidad del rayo 2 es $c - v$ cuando se mueve hacia la derecha, mientras que es $c + v$ cuando lo hace hacia la izquierda. En cada parte del trayecto el rayo se desplaza la distancia l. Por esto, el tiempo necesario para efectuar el viaje redondo es

$$t_2 = \frac{l}{c - v} + \frac{l}{c + v} = \frac{2l}{c}\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1}$$

y por el teorema del binomio,

$$t_2 = \frac{2l}{c}\left(1 + \frac{v^2}{c^2}\right)$$

www.FreeLibros.me

Los dos rayos que se recombinan están fuera de fase por la cantidad $\delta t/\tau$, donde $\tau = \lambda/c$ = período de la vibración de las ondas luminosas de longitud de onda λ. Esta diferencia de fase es

$$\frac{\delta t}{\tau} = \frac{(t_2 - t_1)c}{\lambda} = \frac{2l}{c}\frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2}\frac{c}{\lambda} = \frac{l}{\lambda}\frac{v^2}{c^2} \tag{1–5}$$

En el experimento real, con el aparato en la posición indicada en la figura, se hizo una medida; posteriormente, se efectuó una segunda con el aparato girado 90°. Una breve consideración mostrará que la diferencia de fase cuando el aparato se encuentra en la segunda posición es

$$\frac{\delta t'}{\tau} = -\frac{l}{\lambda}\frac{v^2}{c^2}$$

Se espera que, como consecuencia de haber girado el aparato, haya un cambio en la diferencia de fase por la cantidad

$$\Delta \equiv \frac{\delta t}{\tau} - \frac{\delta t'}{\tau} = \frac{2l}{\lambda}\frac{v^2}{c^2} \tag{1–6}$$

[El experimento se realizó de esta manera para evitar el requisito de que l_1 fuera igual a l_2, lo que fue supuesto en nuestro cálculo. Puede mostrarse fácilmente que la ecuación (1–6) es válida si l_1 es sólo aproximadamente igual a l_2, aunque (1–5) sería incorrecta en este caso.]

En su experimento, Michelson y Morley emplearon luz con una longitud de onda de $\lambda = 6 \times 10^{-5}$ cm y una longitud $l = 10^3$ cm. Si empleamos nuestra estimación de $v^2/c^2 \simeq 10^{-8}$, la ecuación (1–6) arroja para Δ el valor de 0.5, aproximadamente. Esto significa que si en el primer experimento estuvieran en fase los rayos que se combinan, estarían fuera de fase en el segundo experimento. Observando por el telescopio mientras se gira el aparato, se vería que las franjas brillantes ocuparían el lugar de las obscuras o viceversa. Para sorpresa de Michelson y Morley, no se observó tal efecto. Con el objeto de asegurarse que el efecto nulo no se debía a una combinación fortuita de vectores de velocidad, debido a que el laboratorio estuviese en reposo respecto al marco del éter, Michelson y Morley efectuaron varios experimentos durante el día y en diferentes épocas del año. Nunca se observó efecto alguno. A pesar de las predicciones de la teoría clásica, el experimento de Michelson y Morley mostró que *la velocidad de la luz es la misma* cuando se mide a lo largo de dos ejes perpendiculares en un marco de referencia que, indudablemente, se mueve durante el año respecto al marco del éter con velocidad variable.

Estos sorprendentes resultados captaron la atención de toda la comunidad de físicos. El experimento se repitió en diferentes laboratorios con una precisión mayor y se confirmó que el efecto observado era cero dentro de una precisión experimental de alrededor del 0.3 por ciento del valor predicho teóricamente. Muchos intentaron una explicación a este resultado negativo.

Tres ideas distintas se destacaron para explicar los resultados del experimento de Michelson y Morley. Fueron: la hipótesis del "arrastre del éter", la hipótesis de la "contracción de Lorentz" y las llamadas "teorías de emisión".

www.FreeLibros.me

La hipótesis del arrastre del éter suponía que el marco del éter acompañaba en su movimiento a todos los cuerpos de masa finita. Era una hipótesis atractiva, ya que conducía a un resultado nulo en el experimento de Michelson y Morley, y no implicaba una modificación de las teorías de la mecánica o el electromagnetismo. Sin embargo, había dos razones por las que era inaceptable. En 1853 Fizeau había medido la velocidad de la luz en una columna de agua en movimiento rápido. Si el agua arrastrara consigo al éter, la velocidad observada sería igual a la suma de la velocidad de la luz en el agua estacionaria y de la velocidad del flujo de agua. Fizeau observó, efectivamente, un cambio en la velocidad de la luz, aunque era sólo una fracción de la velocidad del agua. Esta variación era explicada completamente por la teoría electromagnética de Maxwell, sin introducir la hipótesis del arrastre del éter, en términos del movimiento de las cargas en las moléculas del agua polarizadas por el campo electromagnético. El segundo argumento en contra de esta hipótesis proviene de un fenómeno que en astronomía se conoce con el nombre de aberración estelar. Se observa que aparentemente las estrellas se mueven en órbitas circulares de diámetro angular muy pequeño. Este es un efecto netamente cinemático, debido al movimiento de la Tierra alrededor del Sol; de hecho, se produce el mismo efecto que hace que una lluvia vertical parezca oblicua a un observador en movimiento. A partir de esta analogía es patente que no se presentaría este efecto astronómico si el rayo de luz viajara con velocidad constante con respecto al marco del éter, considerando que el marco del éter estuviese fijo a la Tierra.

En la contracción de Lorentz se supone que, debido a su movimiento respecto al éter, todos los cuerpos materiales se contraen por el factor $(1 - v^2/c^2)^{1/2}$ en la dirección del movimiento. Por supuesto, ésta es una modificación seria al concepto de cuerpo rígido que es básica en la mecánica clásica. El lector encontrará interesante demostrar que si un interferómetro se deformara de este modo al moverse a través del éter, se obtendría un resultado nulo para el experimento de Michelson y Morley. Sin embargo, en un interferómetro con $l_1 \neq l_2$, un cálculo semejante al anterior que *incluyera* la contracción de Lorentz, prediría un cambio en la diferencia de fase en la cantidad.

$$\Delta = \frac{l_1 - l_2}{\lambda}\left(\frac{v^2}{c^2} - \frac{v'^2}{c^2}\right) \tag{1–6'}$$

donde la velocidad del interferómetro respecto al éter cambia de v a v'. Este cambio en la velocidad podría ser causado por el movimiento de la Tierra en su órbita. El experimento adecuado lo efectuó Kennedy sin observar efecto alguno. De este modo se eliminaba la hipótesis de la contracción de Lorentz.

En la teoría de emisión se modificaban las ecuaciones de Maxwell, de modo que la velocidad de la onda luminosa permanecía asociada con la velocidad de su fuente. Puede verse fácilmente que esto conduciría también a un resultado nulo en el experimento de Michelson y Morley, pero debe ser rechazada por entrar en conflicto con ciertas pruebas astronómicas respecto a estrellas binarias. Estas son pares de estrellas que giran alrededor de su centro de masa. Considere uno de tales pares cuando una estrella se mueve hacia la Tierra y la

www.FreeLibros.me

otra se aleja. Si fuera válida la teoría de la emisión, la velocidad de la luz, con respecto a la Tierra, proveniente de una estrella, sería mayor que la velocidad de la luz proveniente de la otra. Esto haría que sus órbitas aparentes tendrían una forma inusitada alrededor de su centro de masa. Sin embargo, el movimiento observado de las estrellas binarias se explica completamente por la mecánica de Newton.

Ninguno de estos intentos de "parchar" las teorías clásicas, podía mantenerse. Era necesario un cambio más radical.

4. Los postulados de Einstein

Todas las pruebas que hemos presentado parecen ser consistentes con la conclusión de la no existencia de un marco de referencia especial, el marco del éter, con la única propiedad de que la velocidad de la luz en este marco es c. Precisamente como en el caso de marcos inerciales y fenómenos mecánicos, *todos* los marcos en mutua translación uniforme relativa son equivalentes, en el sentido de que la velocidad de propagación de la luz, medida en cualquier dirección, tiene el mismo valor, c. Einstein (1905) estaba dispuesto, no sólo a aceptar este hecho, sino también a generalizarlo, para esto formuló el siguiente *postulado:*

Las leyes de los fenómenos electromagnéticos (incluyendo el hecho de que la velocidad de la luz tiene el valor constante c), así como las leyes de la mecánica, son las mismas en todos los marcos de referencia inerciales, no obstante que éstos se encuentren en mutua translación uniforme. En consecuencia, todos los marcos inerciales son equivalentes.

En este postulado, Einstein exige que se cambien las ecuaciones de Maxwell, o bien la transformación galileana, puesto que juntas contradicen el postulado. Guiado por el fracaso de las teorías de emisión, se inclinó por conservar las ecuaciones de Maxwell. Lo estableció en su segundo *postulado:*

La velocidad de la luz es independiente del movimiento de su fuente.

De este modo, Einstein estaba obligado a modificar las transformaciones galileanas, paso muy audaz, por cierto. La creencia en la validez de la transformación galileana era tan firme, que sus contemporáneos no la habían puesto seriamente en duda. Como veremos ahora, las transformaciones que propone Einstein, en lugar de las galileanas, se basan en consideraciones físicas fundadas en la realidad, no así las transformaciones galileanas. Puede apreciarse también la audacia de este paso por lo dicho en la sección 1: cualquier cambio en la transformación galileana demandará alguna modificación a las ecuaciones de Newton para que la mecánica satisfaga el primer postulado. Esto conduce a resultados interesantes, como posteriormente se verá; por el momento estableceremos las nuevas ecuaciones de transformación.

www.FreeLibros.me

5. Simultaneidad

Considere la cuarta de las ecuaciones de transformación galileana (1–2):

$$t' = t$$

Esta ecuación afirma que dos marcos inerciales de referencia cualesquiera en mutua translación uniforme poseen la misma escala temporal, lo que implica la existencia de una escala universal de tiempo para todos los marcos inerciales. ¿Será cierto? Para comprobarlo debemos investigar operacionalmente el problema de la medida del tiempo.

Discutamos, por el momento, el problema de la definición de una escala de tiempo en un marco de referencia específico. El proceso básico que encierra cualquier medida de tiempo es la simultaneidad. Por ejemplo, la afirmación usual del tipo "el tren llegó a las siete en punto" es, de hecho, una notación abreviada de lo que realmente ocurrió: "el tren llegó cuando simultáneamente el horario de un reloj *vecino* apuntó las 7". No es necesario discutir más el problema de la simultaneidad de acontecimientos que se presentan en el mismo lugar. En cambio, no es tan obvio el problema de determinar la simultaneidad de eventos que ocurren en diferentes lugares, no obstante, es el problema clave para establecer una escala temporal en un marco de referencia. Para que una escala temporal sea válida en todo el marco de referencia, debemos tener relojes distribuidos a lo largo de todo el marco, de modo que siempre exista un reloj cercano que pueda emplearse para medir el tiempo en la vecindad de un punto. Estos relojes deben estar sincronizados, esto es, que podamos decir de dos relojes cualesquiera: "el horario del reloj A y el horario del reloj B apuntaban simultáneamente a las 7".

Se sugieren diversos métodos para determinar la simultaneidad. Todos recurren a la transmisión de señales entre dos lugares físicamente separados. No habría problema si dispusiéramos de medios para transmitir información con velocidad infinita. En este punto yerra la transformación galileana, al

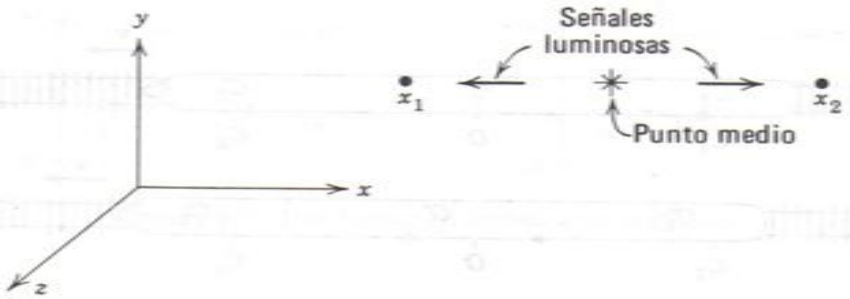

Figura 1-5. Ilustración de la definición de Einstein de simultaneidad.

suponer implícitamente que esto es posible. Nos hemos propuesto proceder conforme a la realidad en el establecimiento de nuestra escala de tiempo: por tanto, debemos emplear un proceso real para transmitir la información. Parece

www.FreeLibros.me

que las ondas electromagnéticas, tales como las señales luminosas, son las más apropiadas, por dos razones: primera, su velocidad de propagación c se conoce con una gran precisión —hecho sumamente deseable—; segunda —y más fundamental—, ya que hemos postulado que la velocidad de propagación de la luz es c en cualquier marco de referencia, conviene usarla para establecer nuestra escala de tiempo. De este modo llegamos a la definición de simultaneidad propuesta por Einstein:

Dos instantes de tiempo t_1 y t_2, observados en los puntos x_1 y x_2, respectivamente, son simultáneos en un marco determinado, si una señal luminosa emitida en el punto medio entre x_1 y x_2, encontrado geométricamente, llega a x_1 al tiempo t_1 y a x_2 al tiempo t_2.

Esto se ilustra en la figura 1–5.

También puede definirse la simultaneidad de la forma siguiente: t_1 y t_2 son simultáneos si dos señales luminosas, una de ellas emitida desde x_1 al tiempo t_1 y la otra emitida desde x_2 al tiempo t_2 llegan simultáneamente al punto medio. Estas definiciones mezclan íntimamente a los tiempos t_1 y t_2 con las coordenadas espaciales x_1 y x_2. En la teoría de Einstein, la simultaneidad no tiene un sentido absoluto, independiente de las coordenadas espaciales, como lo tiene en teoría clásica.

Una consecuencia de estas definiciones es que dos acontecimientos que son simultáneos en un marco de referencia, no lo son, en general, en otro marco de referencia que se mueve con respecto al primero. Esto puede entenderse mediante un ejemplo simple. La figura 1–6 ilustra la sucesión de acontecimientos observados por una persona que se encuentra en reposo respecto al piso. Este observador ha colocado dos cargas de dinamita en C_1 y C_2, de modo que las distancias $\overline{OC_1}$ y $\overline{OC_2}$ son iguales. Al enviar señales simultáneas de luz que disparen los detonadores, causan la explosión de las cargas de dinamita. Supongamos que esto lo hace de modo que, en su marco de referencia, las explosiones son simultáneas con el instante en que se encuentra enfrente de O' (el observador estacionado en el tren que se mueve con

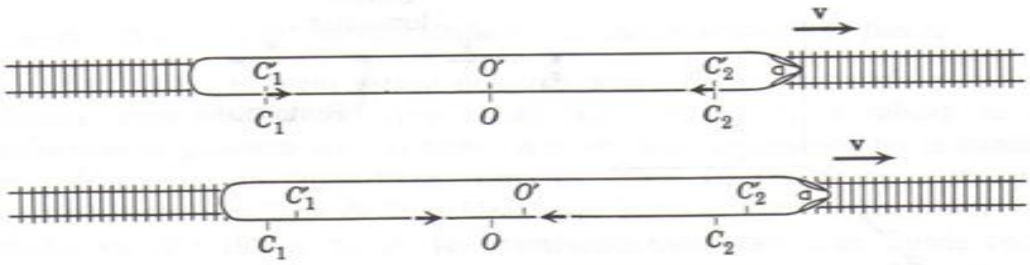

Figura 1-6. Dos vistas sucesivas de un tren que se mueve con velocidad uniforme. Las flechas pequeñas indican señales luminosas.

velocidad constante **v**). Las explosiones producen las marcas C_1' y C_2' sobre el costado del tren. Después del experimento, O' mide las distancias $\overline{O'C_1'}$ y

www.FreeLibros.me

$\overline{O'C_2'}$, y encuentra que son iguales.* Además las explosiones producen destellos luminosos. Tanto O como O' registran los tiempos en que observan los destellos. Por supuesto, el observador en O recibirá simultáneamente los destellos, confirmando que, en su marco de referencia, las explosiones ocurrieron simultáneamente. Sin embargo, O' recibirá el destello producido en C_2' antes que el destello producido en C_1', ya que el tren se ha desplazado mientras la luz llega a O'. Ya que las explosiones ocurrieron en puntos equidistantes de O', y las señales luminosas no se recibieron simultáneamente, concluye que las explosiones no fueron simultáneas.

Esta discrepancia respecto a la simultaneidad conduce a resultados interesantes. De acuerdo con O, $\overline{C_1C_2} = \overline{C_1'C_2'}$. Sin embargo, desde el punto de vista de O', C_2' pasa a C_2 antes que C_1' haya pasado a C_1. Por consiguiente, O' debe concluir que $\overline{C_1C_2} < \overline{C_1'C_2'}$. El problema de la simultaneidad hará que los dos observadores discrepen respecto a la rapidez con la que se mueven los relojes en sus respectivos marcos de referencia. Veremos que la naturaleza de la discordancia acerca de las medidas de distancia e intervalos de tiempo es tal, que *tanto O como O'* encontrarán el valor c para la velocidad de propagación de un pulso luminoso proveniente de C_1 o C_2.

6. Efectos cinemáticos de la relatividad

Los dos postulados de Einstein, junto con su definición de simultaneidad, determinan las ecuaciones que deben emplearse para transformar las coordenadas y el tiempo de un marco de referencia a otro. Estas ecuaciones pueden

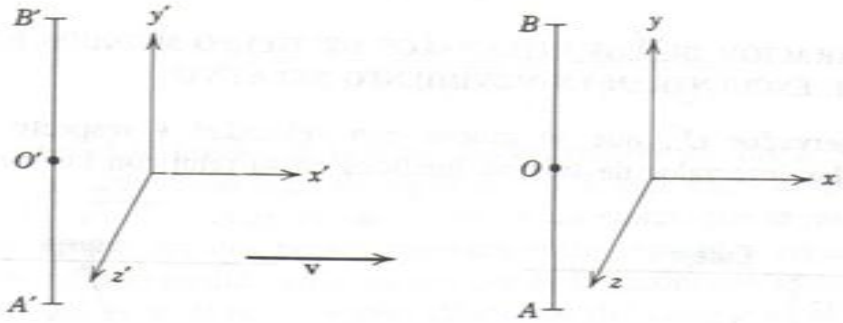

Figura 1-7. Dos barras en translación uniforme.

derivarse de muy diferentes maneras. Emplearemos aquí un procedimiento que es particularmente instructivo, ya que hace hincapié en los conceptos físicos.

* En el siguiente párrafo veremos que, de acuerdo con O', $\overline{O'C'} \neq \overline{OC}$. Sin embargo, debe inferir que $\overline{O'C_1'} = \overline{O'C_2'}$ en virtud de la homogeneidad del espacio.

www.FreeLibros.me

(I) COMPARACIÓN DE LONGITUDES ORIENTADAS PERPENDICULARMENTE A LA DIRECCIÓN DEL MOVIMIENTO

Considere dos observadores O y O', ubicados en dos marcos de referencia, de modo que O' se mueve respecto a O con velocidad **v**. Como se muestra en la figura 1–7, tanto O como O' están colocados en el centro de dos barras AB y $A'B'$ de igual longitud, como se puede verificar al superponerlas cuando se encuentran en reposo relativo. Formulamos la siguiente pregunta: ¿cuáles son las longitudes relativas de las dos barras, desde el punto de vista de cada observador, cuando una se mueve respecto a la otra?

Como se indica en la figura, suponemos que sus centros coinciden cuando las barras se cruzan. O_A y O_B son dos ayudantes de O, estacionados cerca de los extremos de AB, que envían señales luminosas cuando A' y B' cruzan la línea definida por AB, marcando los puntos donde A' y B' cruzan esta línea. Posteriormente, O puede comparar la longitud $A'B'$ con la longitud AB. Es claro, en virtud de la simetría del arreglo, que O recibirá simultáneamente las señales provenientes de O_A y O_B. Lo mismo será cierto para O'. En consecuencia, O' estará de acuerdo que O_A y O_B efectuaron simultáneamente sus medidas y, por tanto, debe aceptar sus resultados. Supongamos tentativamente que O y O' concluyen que $\overline{A'B'} < \overline{AB}$. Se repite el experimento, pidiendo ahora que la comparación de las longitudes se efectúe en el marco de referencia primo. Ya que el primer postulado de Einstein exige simetría completa entre los dos marcos, es claro que O y O' concluirán que $\overline{AB} < \overline{A'B'}$, lo que contradice la afirmación anterior. La única posible conclusión consistente es $\overline{AB} = \overline{A'B'}$. Encontramos entonces que las longitudes de dos barras idénticas, vistas por cualquier observador, son las mismas, independientemente que se encuentren en reposo relativo al observador, o se muevan perpendicularmente a la dirección de su orientación.

(II) COMPARACIÓN DE LOS INTERVALOS DE TIEMPO MEDIDOS POR RELOJES QUE SE ENCUENTRAN EN MOVIMIENTO RELATIVO

Un observador O', que se mueve con velocidad **v** respecto a O, desea comparar los intervalos de tiempo medidos en su reloj con los medidos en los

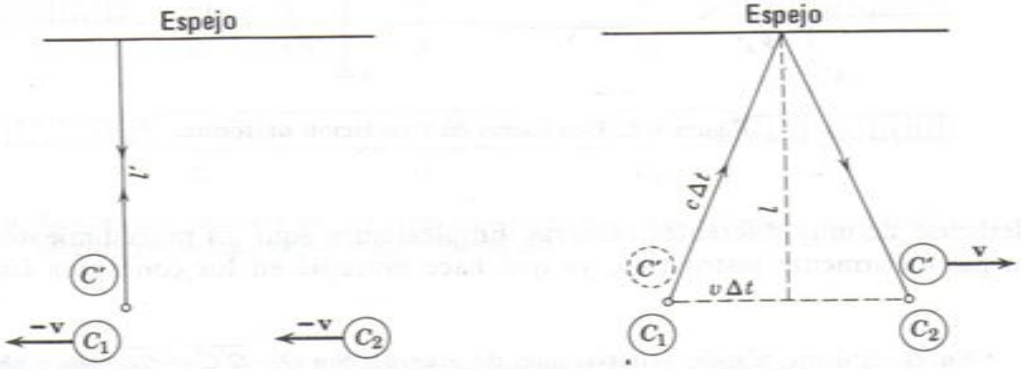

Figura 1-8. Dos conjuntos de relojes en translación uniforme.

www.FreeLibros.me

relojes correspondientes a O. Suponemos que están de acuerdo cuando uno se encuentra en reposo respecto al otro, que todos los relojes que intervienen caminan con la misma rapidez y están sincronizados. Es claro que una lectura de un reloj de O' puede ser comparada, sin dificultad alguna, con otra en un reloj de O, cuando los dos coinciden momentáneamente, aunque uno de ellos se mueva respecto al otro. De este modo, por el procedimiento ilustrado en la figura 1–8, se pueden comparar las medidas de un intervalo de tiempo hechas por los relojes en los dos marcos. El observador O' envía una señal luminosa que regresa a él al reflejarse en un espejo. Tanto O como O' registran el tiempo de transmisión de la señal con los relojes C_1 y C', respectivamente. Los dos observadores registran el tiempo de recepción de la señal con los relojes C_2 y C'. El diagrama de la izquierda muestra la sucesión de los acontecimientos desde el punto de vista de O'; el de la derecha los muestra desde el punto de vista de O.

De acuerdo con O', el tiempo transcurrido entre los dos acontecimientos es $2\Delta t'$, donde $\Delta t' = l'/c$ y l' es la distancia al espejo medida en este marco. El tiempo transcurrido medido por O es $2\Delta t$. Del diagrama es claro que

$$c^2\,\Delta t^2 = v^2\,\Delta t^2 + l^2$$

donde l es la distancia al espejo medida por O. Resolviendo para Δt, tenemos

$$\Delta t^2 = \frac{l^2}{c^2 - v^2} = \frac{l^2}{c^2}\frac{1}{1 - v^2/c^2}$$

$$\Delta t = \frac{l}{c}\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Pero $l = l'$ por el argumento I, obteniendo

$$\Delta t = \frac{l'}{c}\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{\Delta t'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \tag{1–7}$$

Vemos que el intervalo de tiempo transcurrido entre dos acontecimientos que ocurren en un mismo lugar de algún marco de referencia es *mayor*, por un factor $1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ cuando es observado en un marco que se mueve respecto al primero, donde los dos acontecimientos están separados espacialmente. El intervalo de tiempo medido en el marco donde los acontecimientos ocurren en el mismo lugar es el *tiempo propio; dilatación del tiempo* es el nombre que recibe este efecto.

(III) Comparación de longitudes orientadas paralelamente a la dirección del movimiento

Consideremos el experimento que se ha descrito, e imaginemos una barra colocada en el marco O', en uno de sus extremos se encuentra el reloj C_1 y en el otro el reloj C_2. L es la longitud de la barra en el marco O, donde se

www.FreeLibros.me

encuentra en reposo. Queremos calcular L', la longitud de la barra medida en el marco O'.

En este marco la barra se mueve en una dirección paralela a su propia longitud. Ya que la velocidad de O' respecto a O es v, la velocidad de O (y también la de la barra) con respecto a O' debe ser $-v$ (en otra forma habría una asimetría inherente entre los dos marcos, prohibida por el primer postulado de Einstein). Sea t_1' el tiempo cuando el observador O' ve pasar el extremo delantero de la barra y t_2' el tiempo cuando pasa el extremo trasero. El tiempo transcurrido, $2\Delta t' = t_2' - t_1'$, está relacionado con la longitud medida en el marco O' y su velocidad medida en este marco mediante la ecuación*

$$L' = v\,2\Delta t' \tag{1–8}$$

Debemos establecer una ecuación que relacione las cantidades correspondientes vistas desde el marco O. En este marco, C', que se mueve con la velocidad v, recorre la distancia L en el tiempo $2\Delta t$. Entonces

$$L = v\,2\Delta t \tag{1–9}$$

De las dos últimas ecuaciones obtenemos

$$L' = \frac{L\Delta t'}{\Delta t}$$

Empleando el argumento II se tiene

$$\Delta t'/\Delta t = \sqrt{1 - v^2/c^2}$$

Por consiguiente

$$L' = L\sqrt{1 - v^2/c^2} \tag{1–10}$$

Vemos que la barra es *menor*, por un factor $\sqrt{1 - v^2/c^2}$ comparada con su longitud en el marco donde está en reposo, cuando se observa desde un marco en el que se mueve *paralelamente* a su propia longitud. La longitud de la barra medida en el marco en la que está en reposo es su *longitud propia*. El efecto correspondiente recibe el nombre de *contracción de Lorentz*, ya que la ecuación (1–10) se parece a una ecuación propuesta por Lorentz (ver la sección 3). Sin embargo, existe una gran diferencia entre las dos ecuaciones: en la de Lorentz, v representa la velocidad de un cuerpo material respecto al marco del éter; en la ecuación (1–10), v es la velocidad relativa entre dos marcos inerciales arbitrarios O y O'.

Es interesante observar que la técnica empleada por el observador para medir la longitud de una barra en movimiento, en el experimento que se acaba de describir, es diferente de la usada por el observador en el experimento del argumento I. Este último observador marcó simultáneamente la ubicación de los extremos, y midió después la distancia entre las dos marcas. Sin embargo,

* Las velocidades que se miden en un marco están definidas, naturalmente, en términos de las distancias y los tiempos medidos en ese *mismo marco*.

www.FreeLibros.me

se puede mostrar muy fácilmente que las dos técnicas son equivalentes y que, si ambas se pueden aplicar a la misma situación, darán el mismo resultado.

(IV) SINCRONIZACIÓN DE LOS RELOJES QUE SE ENCUENTRAN EN MOVIMIENTO RELATIVO

En la sección 5 hemos visto cómo observadores en movimiento relativo discrepan en lo referente a la simultaneidad de dos acontecimientos. Esto conducirá a una discrepancia respecto a la sincronización de los relojes. Queremos determinar la naturaleza cuantitativa de esta discrepancia.

Consideremos nuevamente el experimento discutido en las secciones II y III, con una referencia especial al lapso entre los dos acontecimientos medidos en los relojes de los dos marcos. El intervalo de tiempo medido en el marco O es $2\,\Delta t$, y el medido en O'_1 $2\,\Delta t'$. De la ecuación (1–7) tenemos

$$2\Delta t = \frac{2\Delta t'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Ya que esta ecuación expresa la estimación en el marco O del intervalo de tiempo medido en el marco O', y que en la medida realizada en O' se empleó un solo reloj, no surgirá ahora ningún problema de sincronización. Sin embargo, al tratar de escribir una ecuación que dé la estimación que se haría en el marco O' del intervalo de tiempo medido en el marco O, debemos tomar en cuenta que el observador O' afirmaría que los dos relojes en el marco O están fuera de sincronía. Al tomar esto en cuenta, debería haber la misma dilatación en el intervalo de tiempo al transformarlo de O a O' que al hacerlo de O' a O. Escribamos entonces

$$2\Delta t' = \frac{2\Delta t + \delta}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \tag{1–11}$$

donde δ es una cantidad que debe determinarse, para corregir la sincronización.

Esta cantidad se puede determinar al exigir el cumplimiento de las ecuaciones (1–8), (1–9) y (1–10). Al substituir (1–8) y (1–9) en (1–11) tenemos

$$\frac{L'}{v} = \frac{L/v + \delta}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

y por (1–10) se puede escribir

$$\frac{L\sqrt{1 - v^2/c^2}}{v} = \frac{L/v + \delta}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

$$\frac{L}{v}\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = \frac{L}{v} + \delta$$

www.FreeLibros.me

de modo que δ es

$$\delta = -\frac{Lv^2}{v\,c^2} = -\frac{Lv}{c^2} \tag{1-12}$$

El signo menos le indica al observador O' que el segundo reloj C_2 está adelantado con respecto al reloj C_1.

Vemos nuevamente que dos relojes fijos en un cierto marco separados por L, y sincrónicos en ese marco, aparecen fuera de sincronía cuando se ven desde un marco en movimiento respecto a los relojes. Es interesante observar que la desviación de sincronía es proporcional a la separación entre los dos relojes. Aún más interesante es el hecho del cambio en el signo del efecto al cambiar el signo de **v**, ya que v aparece linealmente. De este modo, dos observadores que en diferentes marcos investigan la sincronización en el otro, estarán *totalmente* en desacuerdo. No solamente cada observador afirmará que los relojes del otro observador están fuera de sincronía, sino que discrepa sobre el signo del efecto. Esto se debe comparar con los efectos descritos en las ecuaciones (1–7) y (1–10), donde v aparece como una cantidad cuadrática. Aunque en estos casos existe también una discrepancia entre los dos observadores, hay una cierta simetría en la discrepancia: cada observador cree que se contrae la barra y se dilata la escala temporal del otro observador.

7. La transformación de Lorentz

Nos encontramos a un paso de nuestra meta: derivar la transformación de coordenadas de la teoría de la relatividad. Consideremos dos observadores O y O', que examinan el mismo acontecimiento mientras que se mueven mutuamente con velocidad **v**. Respecto a sus sistemas de coordenadas, la ubicación y el tiempo del acontecimiento se especifican por el conjunto de números (x, y, z, t) o bien (x', y', z', t'). La transformación de coordenadas consiste en obtener las ecuaciones que nos permiten calcular el conjunto de números primos en términos del conjunto no primo y viceversa.

En la figura 1–9 se muestra la orientación de los dos sistemas de coordenadas, y el del vector **v** que especifica la velocidad de O' respecto a O. Definimos los ceros de las escalas t y t' de modo que los relojes colocados en los orígenes de los dos sistemas de coordenadas marcan $t = t' = 0$ cuando éstos se encuentran en el mismo punto.

La separación entre los orígenes a un tiempo posterior es vt, visto desde O (o vt' visto desde O). Sin embargo, la distancia x' medida en el marco O' aparece contraída por el factor $\sqrt{1 - v^2/c^2}$ cuando se ve desde O. Entonces O diría que la distancia paralela a **v**, desde su plano yz, a la posición del acontecimiento es $vt + x'\sqrt{1 - v^2/c^2}$. Esta es, por definición, la coordenada x del acontecimiento. En consecuencia

$$x = vt + x'\sqrt{1 - v^2/c^2}$$

www.FreeLibros.me

Resolviendo para x', encontramos

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Ahora bien, O cree que el tiempo t' leído en el reloj fijo en el origen del marco O' que se encuentra en el punto x, y, z, se debe corregir por la cantidad $\delta' = +x'v/c^2$, para tomar en cuenta la carencia de sincronización entre ese reloj y el reloj fijo en el origen del marco O'. (Sería instructivo para

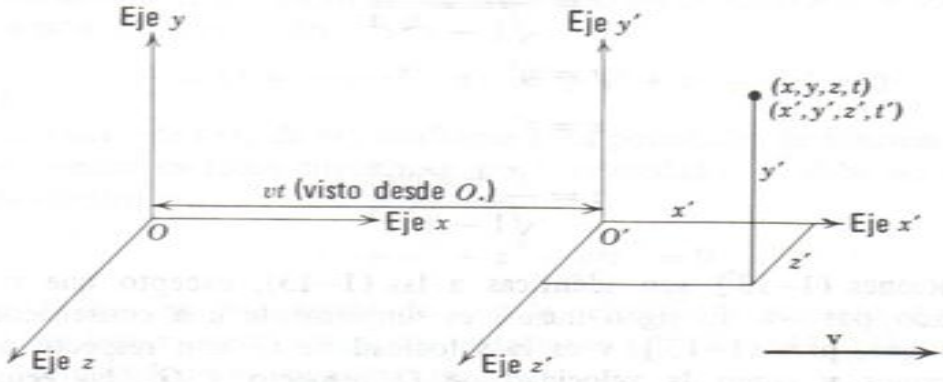

Figura 1-9. Ilustración del argumento que conduce a la transformación de Lorentz.

el lector convencerse que en este caso la cantidad δ' es positiva.) Además, los intervalos de tiempo medidos por el reloj situado en el origen de O' aparecen a O como dilatados por el factor $1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$. Así, de acuerdo con O, el acontecimiento ocurre al tiempo

$$t = \frac{t' + x'v/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Substituyendo x' de las ecuaciones anteriores y resolviendo para t' encontramos

$$t' = \frac{t - xv/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

El argumento I de la sección 6 nos dice que $y' = y$ y $z' = z$, ya que estas distancias se miden perpendicularmente a **v**. Coleccionando nuestros resultados, tenemos

$$\begin{aligned} x' &= \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \\ y' &= y \\ z' &= z \\ t' &= \frac{t - xv/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \end{aligned} \tag{1–13}$$

www.FreeLibros.me

Estas ecuaciones son las llamadas *transformaciones de Lorentz* que, según Einstein, deben emplearse para transformar las coordenadas y el tiempo de un acontecimiento en un marco inercial O a las que tiene en un marco inercial O'.*

La solución algebraica de las ecuaciones (1–13) para x, y, z, t produce otra forma de la transformación de Lorentz que es útil para transformar del marco primo al marco no primo. Estas son

$$\begin{aligned} x &= \frac{x' + vt'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \\ y &= y' \\ z &= z' \\ t &= \frac{t' + x'v/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \end{aligned} \tag{1–13'}$$

Las ecuaciones (1–13′) son idénticas a las (1–13), excepto que v se ha reemplazado por $-v$. El signo menos es simplemente una consecuencia del hecho de que, para (1–13′), **v** es la velocidad de O' con respecto a O. Si redefiniéramos **v** como la velocidad de O respecto a O', las ecuaciones resultantes serían idénticas a (1–13), sin necesidad de efectuar el álgebra, ya que el primer postulado de Einstein demanda la simetría que se observa entre ambas. Este postulado requiere que todos los marcos inerciales de referencia en translación uniforme sean equivalentes. En consecuencia, las transformaciones que hemos encontrado a partir de este postulado deben ser las mismas al pasar de O a O' que al pasar de O' a O.

Se ve inmediatamente que la transformación de Lorentz se reduce a la transformación galileana cuando $v/c \ll 1$ lo cual tiene sentido físico. La diferencia fundamental entre las dos transformaciones es que la primera toma en cuenta que las señales necesarias para sincronizar los relojes en un sistema de referencia se propagan con la velocidad finita c, mientras que en la segunda se supone ingenuamente que la velocidad de estas señales es infinita. Sin embargo, en una transformación de coordenadas en las que la velocidad relativa v es muy pequeña en comparación a la velocidad de las señales de sincronización, no existirá diferencia apreciable si ésta se toma como c o ∞. Consecuentemente, en este límite las dos transformaciones serán idénticas.

Por otra parte, surgen discrepancias notables entre las predicciones de la transformación galileana y la lorentziana, que es rigurosamente correcta, cuando v es comparable a c. En la mecánica clásica no se observaron discrepancias, ya que no se realizaron experimentos con estas velocidades. Es interesante observar que para $v/c > 1$, las ecuaciones (1–13) carecen de significado, ya que coordenadas y tiempos reales se transformarían en imaginarios. Entonces

* Lorentz, antes que Einstein, había propuesto ecuaciones de esta forma en relación con la teoría clásica de los electrones. En este caso, v representaba la velocidad con respecto al éter.

www.FreeLibros.me

aparece que c juega el papel de velocidad límite para todos los fenómenos físicos. Entenderemos mejor este hecho al proseguir la discusión.

Para finalizar esta sección, comprobemos la consistencia interna de la transformación de Lorentz con los postulados a partir de los cuales fue derivada. Considere nuevamente la figura 1–9, e imagine que en el instante $t = t' = 0$ producimos una chispa en el origen común a los dos marcos de referencia. Desde el punto de vista de O, el pulso luminoso resultante viajará en todas las direcciones con la velocidad c. Entonces, para todo tiempo t, el pulso luminoso formará un frente de onda esférico de radio $r = ct$. Este frente de onda satisfará la ecuación

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2 \quad \text{ó} \quad x^2 + y^2 + z^2 - c^2t^2 = 0 \tag{1–14}$$

Desde el punto de vista de O', conforme a los postulados de Einstein, el pulso luminoso viajará en todas direcciones con la velocidad c. O' debe ver un frente de onda esférico

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 - c^2t'^2 = 0 \tag{1–15}$$

a pesar de que se está moviendo con la velocidad v respecto a O. Como ejercicio, el lector puede aplicar las ecuaciones (1–13′) a (1–14) y obtendrá (1–15), demostrando así su consistencia.

8. Transformación de la velocidad

Considere una partícula, que se mueve con la velocidad **V** respecto al marco de referencia, como se indica en la figura 1–10. Deseamos calcular la velocidad **V**′ de la partícula, vista desde el marco de referencia O' que se mueve con velocidad **v** respecto a O.

En el marco O, el vector velocidad de la partícula tiene las componentes

$$V_x = dx/dt, \quad V_y = dy/dt, \quad V_z = dz/dt$$

Las componentes del mismo vector velocidad, medidas en el marco O', son

$$V'_x = dx'/dt', \quad V'_y = dy'/dt', \quad V'_z = dz'/dt'$$

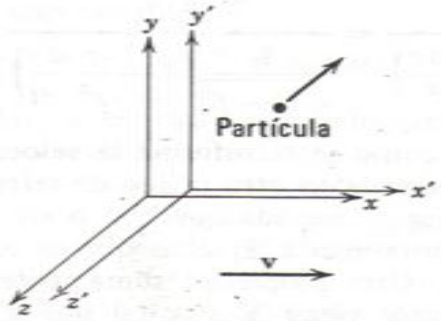

Figura 1-10. Una partícula en movimiento observada desde dos marcos de referencia en translación uniforme.

www.FreeLibros.me

De las ecuaciones (1–13), sabemos que la relación entre las coordenadas primas y las no primas son

$$x' = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}(x - vt)$$
$$y' = y$$
$$z' = z$$
$$t' = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\left(t - \frac{vx}{c^2}\right)$$

donde $\beta = v/c$. Tomemos la diferencial de estas ecuaciones, recordando que v es constante, de modo que

$$dx' = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}(dx - v\,dt)$$
$$dy' = dy$$
$$dz' = dz$$
$$dt' = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\left(dt - \frac{v\,dx}{c^2}\right)$$

Entonces

$$V'_x = \frac{\dfrac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}(dx - v\,dt)}{\dfrac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\left(dt - \dfrac{v\,dx}{c^2}\right)} = \frac{\dfrac{dx}{dt} - v}{1 - \dfrac{v}{c^2}\dfrac{dx}{dt}} = \frac{V_x - v}{1 - \dfrac{v}{c^2}V_x}$$

$$V'_y = \frac{dy}{\dfrac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\left(dt - \dfrac{v\,dx}{c^2}\right)} = \frac{dy/dt}{\dfrac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\left(1 - \dfrac{v}{c^2}\dfrac{dx}{dt}\right)} = \frac{V_y\sqrt{1-\beta^2}}{1 - \dfrac{v}{c^2}V_x} \tag{1–16}$$

y, de modo semejante

$$V'_z = \frac{dz}{\dfrac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\left(dt - \dfrac{v\,dx}{c^2}\right)} = \frac{dz/dt}{\dfrac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\left(1 - \dfrac{v}{c^2}\dfrac{dx}{dt}\right)} = \frac{V_z\sqrt{1-\beta^2}}{1 - \dfrac{v}{c^2}V_x}$$

Estas ecuaciones nos dicen cómo se transforma la velocidad observada en un marco de referencia a la observada en otro marco de referencia.

En primer lugar vemos que, a medida que V/c o v/c se aproximan a cero, las ecuaciones (1–16) se aproximan a aquéllas que se obtendrían a partir de la transformación galileana. Otra propiedad sumamente interesante de estas ecuaciones es que es imposible elegir **V** y **v** tal que V', la magnitud de la velocidad vista desde el nuevo marco, sea mayor que c. Considere el ejemplo ilustrado en la figura 1–11. Vista desde O, la partícula 1 tiene una velocidad

www.FreeLibros.me

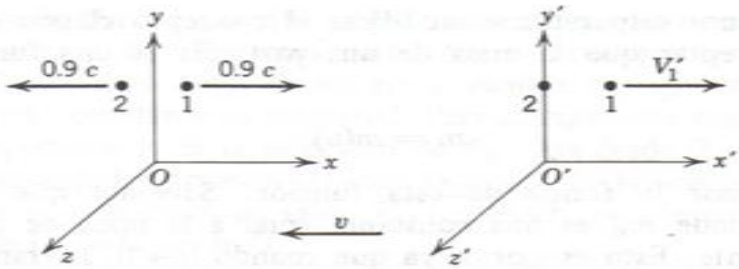

Figura 1-11. Ilustración de un ejemplo de adición de velocidades.

$0.9c$ en la dirección positiva del eje x, y la partícula 2 tiene una velocidad de $0.9c$ en la dirección negativa del eje x. Para calcular la velocidad de la partícula 1 con respecto a la partícula 2, empleando la primera de las ecuaciones (1–16) transformamos de marco O al O' que se mueve en la dirección negativa del eje x con velocidad $v = 0.9c$. Obtenemos

$$V_1' = \frac{0.9c - (-0.9c)}{1 - \dfrac{(-0.9c)}{c^2}(0.9c)} = \frac{1.80c}{1.81} < c$$

No es difícil dar una prueba rigurosa de esta propiedad a partir de las ecuaciones (1–16). Las ecuaciones de transformación de la velocidad muestran otro aspecto del hecho de que en la teoría de la relatividad c actúa como la velocidad límite para todos los fenómenos físicos.

9. La mecánica relativista

Se ha subrayado que la modificación de Einstein a las ecuaciones de transformación requerirá, a su vez, una modificación compensadora en las leyes de la mecánica, de modo que satisfagan el requisito de conservar su forma bajo la influencia de una transformación de coordenadas.* En esta sección estableceremos las leyes de la nueva mecánica, que recibe el nombre de *mecánica relativista*.

Obviamente es deseable trasladar cuanto sea posible a la mecánica relativista lo propio de la mecánica clásica. Veremos que es viable conservar la definición clásica de impulso

$$\mathbf{p} = m\mathbf{u} \tag{1–17}$$

donde $\mathbf{p}$ es el impulso, m la masa y $\mathbf{u}$ la velocidad de la partícula. También la ley clásica de la conservación del impulso

$$\left[\sum_i \mathbf{p}_i\right]_{\text{inicial}} = \left[\sum_i \mathbf{p}_i\right]_{\text{final}} \tag{1–18}$$

* Lo opuesto es cierto para las leyes que gobiernan los fenómenos electromagnéticos (las ecuaciones de Maxwell), ya que el segundo postulado de Einstein prohibe su modificación.

www.FreeLibros.me

siempre que estemos dispuestos a modificar el concepto clásico de la masa. Será necesario aceptar que la masa de una partícula es una función de la rapidez, o sea

$$m = m(u) \tag{1-19}$$

Debemos determinar la forma de esta función. Sabemos que $m(u) \to m_0$ cuando $u \to 0$, donde m_0 es una constante igual a la masa de la partícula medida clásicamente. Esto es cierto, ya que cuando $u \to 0$, la transformación de Lorentz se aproxima a la transformación galileana y no es necesario modificar la mecánica clásica.

Para calcular la función $m(u)$, efectuemos el siguiente experimento. Visto desde el marco xyz indicado en la figura 1–12, los observadores O_1 y O_2 se mueven en una dirección paralela al eje x con velocidades iguales y opuestas. Estos observadores tienen dos pelotas iguales, P_1 y P_2, de masa m_0 medida cuando se encuentran en reposo. Al pasar uno enfrente del otro, cada observador lanza su pelota hacia la otra con una velocidad tal que, desde su punto de vista, es perpendicular al eje x, y de magnitud V.

En el marco xyz se observará que P_1 y P_2 se aproximan con velocidades iguales a lo largo de líneas paralelas que forman ángulos iguales $\theta_{1_i} = \theta_{2_i}$ con el eje x, y rebotan con los ángulos θ_{1_f} y θ_{2_f}. Suponiendo que el impulso se conserva, y que la colisión es elástica, puede mostrarse fácilmente que $\theta_{1_f} = \theta_{2_f}$, y que la magnitud de la velocidad de las pelotas antes de la colisión es igual a la que tienen después de ella. Los valores de θ_{1_f} o bien θ_{2_f} dependen del parámetro de impacto d, que suponemos es tal que $\theta_{1_f} = \theta_{1_i}$, como se muestra en la figura.

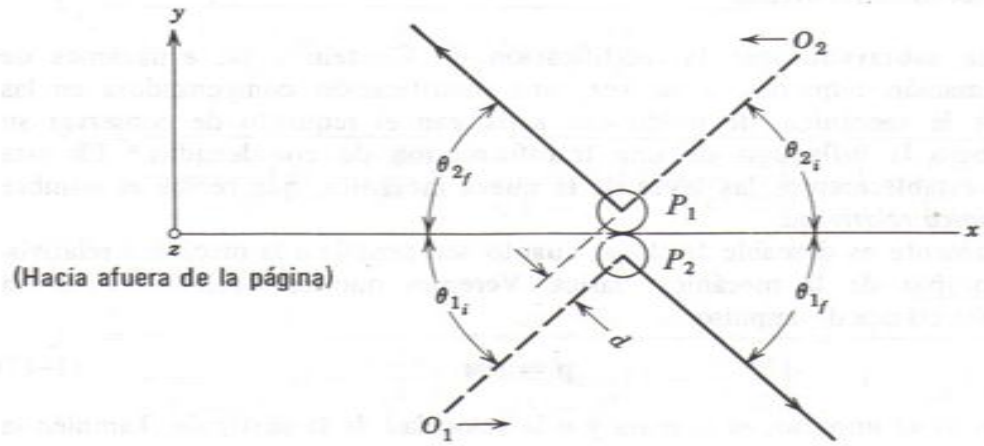

Figura 1-12. Una colisión entre dos pelotas de igual masa en reposo.

Consideremos al proceso desde el punto de vista de O_1, como se muestra en la figura 1–13. El observador O_1 lanza P_1 con velocidad V a lo largo de una línea paralela a su eje y; regresa a lo largo de la misma línea con igual velocidad, aunque de signo opuesto. Observa que P_2 mantiene una velocidad

www.FreeLibros.me

constante en la dirección x, que es precisamente igual a v, la velocidad relativa de O_2 respecto a O_1. Por otra parte, O_1 observa que la componente de la velocidad de P_2 a lo largo de su eje y cambia de signo durante la colisión permaneciendo constante su magnitud. Para calcular esta magnitud observamos que la componente y de la velocidad de P_2 vista desde O_2 es V. Transformamos esta velocidad al marco O_1 con la ayuda de la segunda de las ecuaciones (1–16) y obtenemos el valor $V\sqrt{1-v^2/c^2}$ para la componente y de la velocidad de P_2 vista desde O_1.

La componente y del impulso, tanto de P_1 como de P_2, medidas en el marco O_1, cambian simplemente de signo durante la colisión. En consecuencia, la componente y del impulso total del sistema formado por las dos pelotas cambia de signo. Pero la ley de la conservación del impulso demanda que la componente y del impulso total antes de la colisión sea igual a la componente y del impulso total después de la colisión. Esto sólo puede ser cierto si la componente y del impulso total, visto desde O_1, es igual a cero antes y después de la colisión. Calculando el impulso de acuerdo con la definición (1–17) e igualando a cero la componente y del impulso total para satisfacer la conservación del impulso (1–18), obtenemos una ecuación que, obviamente, no es consistente con la hipótesis de que m sea una constante igual a m_0. Sin embargo, al aceptar que m sea una función de la velocidad, como en (1–19), la ecuación queda

$$V\,m(V) = V\sqrt{1-v^2/c^2}\,m\left(\sqrt{V^2(1-v^2/c^2)+v^2}\right)$$

ó

$$m(V) = \sqrt{1-v^2/c^2}\,m\left(\sqrt{V^2(1-v^2/c^2)+v^2}\right)$$

donde el argumento de la función m en el segundo miembro de la ecuación es,

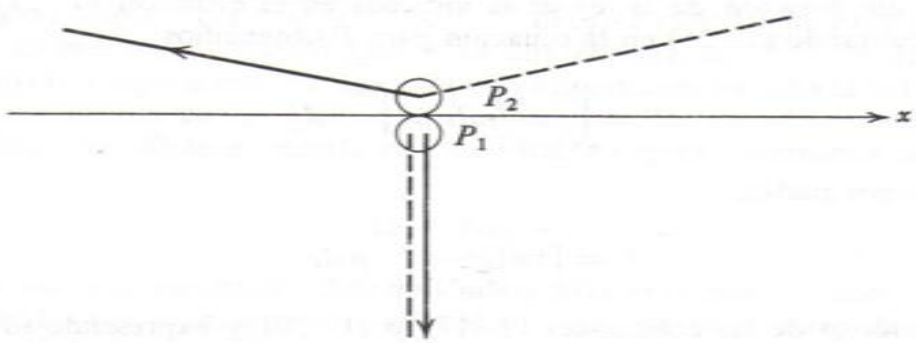

Figura 1-13. Una colisión entre dos pelotas con igual masa en reposo vista por el observador O_1.

simplemente, la magnitud de la velocidad de P_2 vista desde O_1. Esta ecuación es satisfactoria y nos permite calcular inmediatamente la función m si tomamos $V \to 0$. Entonces

$$m(0) = m_0 = \sqrt{1-v^2/c^2}\,m(v)$$

de modo que

$$m(v) = m_0/\sqrt{1-v^2/c^2} \qquad (1\text{–}20)$$

www.FreeLibros.me

[Obsérvese que el cálculo de la forma funcional (1–20), a partir de la ecuación para $m(V)$ tomando $V \to 0$, es una simplificación y no una aproximación. Puede mostrarse fácilmente que (1–20) satisface la ecuación para $m(V)$.] De este modo, una teoría consistente de la mecánica relativista requiere que la masa de una partícula que se mueve con la velocidad v sea *mayor* que su masa cuando se encuentra en reposo por el factor $1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$. La masa $m(v)$ recibe el nombre de *masa relativista* de la partícula y m_0 el de *masa en reposo*.

Para una velocidad de $v = 0.1c$, velocidad grande, por cierto, la masa relativista es sólo 0.5 por ciento mayor que la masa en reposo. Sin embargo, la masa relativista aumenta rápidamente al aumentar v, puesto que $m(v) \to \infty$ cuando $v \to c$. Es claro que si (1–20) es válida, la velocidad de la partícula no puede exceder c.

Prosiguiendo nuestra discusión sobre la mecánica relativista, consideremos una partícula de masa m_0 cuando está inicialmente en reposo y que se encuentra bajo la acción de una fuerza de magnitud F aplicada en la dirección x. El trabajo total efectuado sobre la partícula al desplazarla la distancia x_f es

$$T = \int_0^{x_f} F\,dx = \int_0^{t_f} F\frac{dx}{dt}\,dt = \int_0^{t_f} Fv\,dt$$

Para calcularlo necesitamos conocer la forma relativista de la ley de Newton. *Supongamos* que es

$$F = \frac{dp}{dt} = \frac{d}{dt}(mv) \tag{1–21}$$

Observe que si $m =$ constante, se tiene $F = m\,dv/dt = ma$. Realmente, el enunciado que dio Newton de la ley es la indicada en la ecuación (1–21), y no $F = ma$. Insertando (1–21) en la ecuación para T obtenemos

$$T = \int_0^{t_f} v\frac{dp}{dt}\,dt = \int_0^{p_f} v\,dp$$

Integrando por partes,

$$T = [vp]_0^{v_f} - \int_0^{v_f} p\,dv$$

Substituyendo p de las ecuaciones (1–17) y (1–20), y expresando $v\,dv$ como $d(v^2)/2$ tenemos

$$T = \left[\frac{m_0 v^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\right]_0^{v_f} - \frac{m_0}{2}\int_0^{v_f} \frac{d(v^2)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

El segundo término se encuentra en una forma normal. Integrándolo, obtenemos

$$T = m_0 c^2\left[\frac{v^2/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + \sqrt{1 - v^2/c^2}\right]_0^{v_f}$$

www.FreeLibros.me

lo cual se reduce a

$$T = m_0c^2\left[\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\right]_0^{v_f}$$

Evaluando los límites y eliminando el índice para simplificar nuestra notación, tenemos

$$T = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - m_0c^2 \tag{1–22}$$

Ahora bien, el teorema de la conservación de la energía implica que el trabajo total efectuado sobre una partícula debe ser igual a su energía cinética, T. Como verificación hagamos $v/c \to 0$. Entonces

$$T = m_0c^2\left[\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2} - 1\right] \simeq m_0c^2\left[1 + \frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2} - 1\right]$$

$$T \simeq \frac{1}{2}m_0c^2\frac{v^2}{c^2} = \frac{1}{2}m_0v^2$$

Esto concuerda con la expresión clásica para la energía cinética y confirma nuestra identificación de T.

Todavía más acerca de la ecuación (1–22): observamos que T es una función de v que se puede escribir como la diferencia de un término dependiente de v y otro constante:

$$T(v) = E(v) - E(0)$$

donde $E(v) = m_0c^2/\sqrt{1 - v^2/c^2} = mc^2$, y $E(0)$ es el valor de $E(v)$ para $v = 0$, esto es $E(0) = m_0c^2$. Puesto que T es una energía, también lo serán $E(v)$ y $E(0) - E(v)$ es alguna energía asociada con la partícula cuando la velocidad es v y $E(0)$ es alguna energía asociada con la partícula cuando su velocidad es cero. Para identificar el significado de estas energías, escribimos la ecuación como

$$E(v) = T(v) + E(0)$$

La conclusión es inevitable: debemos interpretar $E(v)$ como la energía total de la partícula que se mueve con velocidad v, ya que es la suma de la energía cinética $T(v)$ de la partícula y una energía intrínseca, $E(0)$, asociada con la partícula cuando se encuentra en reposo.

Hemos establecido la bien conocida relación de Einstein entre la masa y la energía: *la energía de masa en reposo es igual a c^2 multiplicada por su masa en reposo.* Esto es

$$E(0) = m_0c^2 \tag{1–23}$$

y *la energía relativista total es igual a c^2 por su masa relativista.* Esto es

$$E(v) = mc^2 \tag{1–24}$$

www.FreeLibros.me

La ecuación (1–22) afirma que la relación entre la energía relativista total, la energía cinética y la energía de masa en reposo es

$$mc^2 = T + m_0c^2 \tag{1–22'}$$

Si V es la energía potencial de la partícula, es posible extender el argumento y mostrar que

$$mc^2 = T + V + m_0c^2 \tag{1–22''}$$

lo cual pone de relieve que la masa relativista es una medida directa del contenido energético total de una partícula. Todo lo que incremente su contenido energético, aumentará su masa relativista.

Conviene tener una relación semejante a (1–22′) en términos explícitos del impulso p. Puede obtenerse calculando la cantidad

$$m^2c^4 - m_0^2c^4 = m_0^2c^4\left[\frac{1}{1-\beta^2} - 1\right]$$

donde $\beta = v/c$. Esto es

$$m^2c^4 - m_0^2c^4 = m_0^2c^4\frac{\beta^2}{1-\beta^2} = \frac{m_0^2c^2v^2}{1-\beta^2} = m^2c^2v^2 = c^2p^2$$

de modo que

$$E^2 = m^2c^4 = c^2p^2 + m_0^2c^4 \tag{1–25}$$

Las propiedades relativistas de la masa y la energía, así como la relación entre ambas, se derivaron de la transformación de Lorentz y la hipótesis adicional que hicimos acerca de la nueva forma de las leyes de la mecánica. Esta hipótesis adicional es razonable, ya que obviamente se las introdujo para preservar la mecánica clásica, tanto como fue posible. Sin embargo, su justificación en última instancia sólo se puede encontrar comparando las predicciones de la mecánica relativista con el experimento. Posponemos esta comparación hasta la sección 11, aunque señalamos que la existencia de la energía de masa en reposo m_0c^2 no está en conflicto con la mecánica clásica. Ya que los experimentos de la física clásica son tales que la masa total en reposo es constante, las energías de masa en reposo pueden sumarse a ambos miembros de todas las ecuaciones de balance sin destruir su validez.

La teoría relativista de la energía, sin embargo, tiene un interés mayor que el meramente académico. Una razón importante es que existen en la naturaleza procesos en los que la masa total en reposo de un sistema aislado no permanece constante. Experimentalmente se muestra que, en estos procesos, el cambio de la energía de masa en reposo se compensa por el cambio en la energía cinética o potencial, conservándose la energía total relativista del sistema. Esta es la base de algunos procedimientos sumamente prácticos para la conversión de la energía de masa en reposo en otras formas de energía, como en el caso del reactor nuclear. También muestra que en nuestra teoría

www.FreeLibros.me

relativista, debemos reemplazar las leyes de la conservación de la masa y de la energía en una ley, amplia, de la *conservación de la energía relativista total.*

Observada desde un marco de referencia, la energía relativista total de un sistema aislado permanece constante.*

10. Transformación del impulso y de la energía

En ciertos problemas, particularmente en aquellos que trata la mecánica de las colisiones, es conveniente transformar el impulso y la energía relativista total de una partícula de un marco de referencia a otro. En esta sección deduciremos la transformación correspondiente.

Considere una partícula de masa en reposo m_0 que se mueve con velocidad V a lo largo del eje x en un marco de referencia O. En este marco las componentes del impulso son

$$p_x = \frac{m_0 V}{\sqrt{1 - V^2/c^2}}, \qquad p_y = 0, \qquad p_z = 0$$

y la energía relativista total

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - V^2/c^2}}$$

Considere ahora un observador O' que se mueve a lo largo del eje positivo x con velocidad v.

Para este observador, el impulso de la partícula tendría la componente

$$p'_x = \frac{m_0 V'}{\sqrt{1 - V'^2/c^2}}, \qquad p'_y = 0, \qquad p'_z = 0$$

y la energía relativista total

$$E' = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - V'^2/c^2}}$$

donde V' es la velocidad de la partícula con respecto a O'.

Para establecer la relación entre el impulso y la energía en los dos marcos, calculemos las cantidades

$$V'/\sqrt{1 - V'^2/c^2} \quad \text{y} \quad c^2/\sqrt{1 - V'^2/c^2}$$

* Por supuesto que se aplica la misma restricción a la ley de la conservación de la energía en la física clásica. Por ejemplo, el contenido energético total de una partícula aumentará si clásicamente transformamos de un sistema donde la partícula se encuentra en reposo a otro donde la partícula se encuentre en movimiento y, por lo tanto, poseerá energía cinética. Véase la sección 10.

www.FreeLibros.me

en términos de V. Para esto empleamos las ecuaciones de transformación de la velocidad (1–16), que en este caso toman la forma

$$V' = \frac{V - v}{1 - Vv/c^2}$$

No reproduciremos el cálculo; es directo, aunque tedioso. El resultado es

$$\begin{aligned} p'_x &= \frac{p_x - vE/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \\ p'_y &= p_y \\ p'_z &= p_z \\ E' &= \frac{E - p_x v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \end{aligned} \tag{1–26}$$

Aunque en este cálculo la velocidad de la partícula es paralela al eje x, se puede mostrar que las ecuaciones (1–26) son válidas para cualquier orientación del vector velocidad.

11. Verificación experimental de la teoría

La teoría de la relatividad fue diseñada para concordar con el hecho experimental de que la velocidad de la luz es la misma cuando se la observa en diferentes marcos de referencia que se encuentran en mutua translación uniforme. Sin embargo, además de lograr esto, la teoría *predice* una cantidad de fenómenos nuevos, como la contracción de la longitud, la dilatación del tiempo, el aumento relativista en la masa y la relación entre la masa y la energía. Esto es propio de una teoría científica. También lo es el hecho de que la aceptación inicial de la teoría fue tentativa, aunque aparecía basada en una lógica correcta. La teoría no se aceptó hasta que sus predicciones respecto a nuevos fenómenos se pusieron bajo prueba experimental. Para concluir nuestra discusión de la teoría de la relatividad mencionaremos brevemente algunos de los experimentos que confirman sus predicciones.

El primero de ellos fue realizado en 1909 por Bucherer, quien midió la masa de los electrones con grandes velocidades, empleando una técnica bastante directa que se discutirá en el capítulo 3. Las cruces en la figura 1–14, muestran los resultados de Bucherer; algunos resultados más amplios, obtenidos en los últimos años, se muestran por puntos y las predicciones de la ecuación (1–20) se muestran mediante la línea sólida. Observe que estos resultados prueban no sólo que las ecuaciones (1–20) tienen la forma funcional correcta, sino que la velocidad c, que entra en la teoría de la relatividad esencialmente como una velocidad límite para la transmisión de la información es, de hecho, igual a la velocidad de la luz, 3.00×10^{10} cm/seg. Actualmente se conocen diferentes pruebas experimentales de la contracción de la longitud y de la dilatación del tiempo. Uno de los más claros consiste en medir la vida media de partículas inestables llamadas mesones, para mesones de diferentes

www.FreeLibros.me

velocidades. Se observa que el aumento en la vida media de un mesón en movimiento rápido se encuentra en excelente concordancia con la ecuación (1–7). En el capítulo 16 mencionaremos estos experimentos, donde presentaremos también un número abrumador de hechos experimentales que probarán la validez de las ecuaciones (1–23) y (1–24), las relaciones de Einstein entre la masa y la energía. Las predicciones de la teoría de la relatividad han sido confirmadas punto por punto, y actualmente es aceptada universalmente su validez.

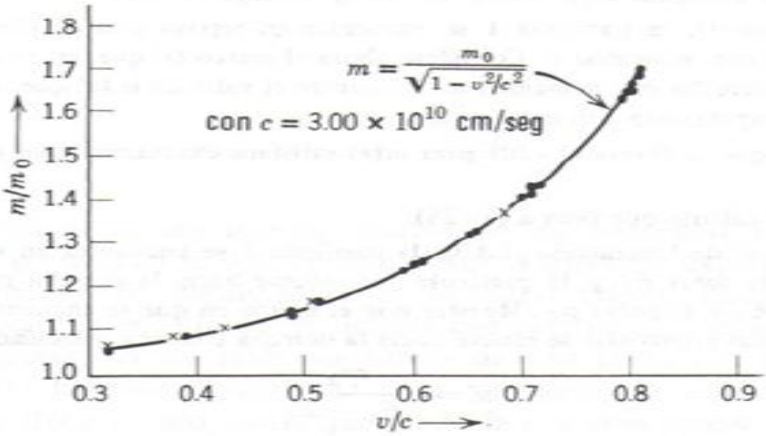

Figura 1-14. Una verificación experimental de la dependencia de la masa con la velocidad. De I. Kaplan, *Nuclear Physics*, 1955, Addison Wesley, Reading, Mass.

Un tema que lógicamente debe ser mencionado en este punto es la llamada *teoría general de la relatividad*, que considera marcos de referencia que se encuentran *acelerados* uno con respecto al otro. Se hallan relaciones sumamente interesantes entre la aceleración y los efectos gravitacionales. Sin embargo, el tema es de tal naturaleza que un tratamiento serio se debe dar en términos del cálculo tensorial, por lo que omitiremos su discusión. Esto no es un inconveniente, ya que la teoría general ofrece muy poca relación con las otras ramas de la física moderna, y también porque es posible, mediante diferentes subterfugios, emplear la teoría especial que hemos desarrollado en ciertos problemas que comprenden movimiento acelerado. Por ejemplo, en el capítulo 11 haremos tal cálculo para el movimiento circular uniforme.

BIBLIOGRAFIA

Bergmann, P. G., *Introduction to the Theory of Relativity*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1942.

Leighton, R. B., *Principles of Modern Physics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1959.

Lorentz, H. A., A. Einstein, H. Minkowski, y H. Weyl, *The Principle of Relativity*, Dover Publications, Nueva York, 1951.

www.FreeLibros.me

EJERCICIOS

1. Escriba las ecuaciones análogas a las (1–2) para el caso en que el vector de velocidad relativa **u** no sea paralelo a ninguno de los ejes, y utilícelas para mostrar que aún se obtienen las ecuaciones (1–3).

2. Derive la ecuación (1–6′).

3. La distancia a la estrella más lejana de nuestra galaxia es del orden de 10^5 años luz. Explique por qué es posible, en principio, que un ser humano viaje a esta estrella dentro del lapso de una vida y estime la velocidad requerida.

4. Aplique las ecuaciones (1–13′) y (1–14) y obtenga (1–15).

5. En el marco O, la partícula 1 se encuentra en reposo y la partícula 2 se mueve hacia la derecha con velocidad v. Considere ahora el marco O' que, en relación con O, se mueve hacia la derecha con velocidad u. Encuentre el valor de u tal que, vistas desde O', las partículas se aproximen con igual rapidez.

6. Verifique que la forma (1–20) para $m(v)$ satisface exactamente las ecuaciones para $m(V)$.

7. Efectúe el cálculo que lleva a (1–26).

8. En el marco de laboratorio (LAB), la partícula 1 se encuentra en reposo con una energía relativista total E_1 y la partícula 2 se mueve hacia la derecha con una energía relativista total E_2 e impulso p_2. Muestre que el marco en que se encuentra en reposo el centro de las masas relativistas se mueve hacia la derecha con una velocidad

$$u = c\,\frac{cp_2}{E_1 + E_2}$$

relativa al marco LAB, y que el impulso total del sistema es cero en el marco del *centro de masa* (CM). Considere ahora que las partículas tienen la misma masa en reposo m_0 y que la energía cinética total del sistema en el marco LAB es T_{LAB}. Evalúe T_{CM}, la energía cinética total del sistema en el marco CM y muestre que

$$T_{\mathrm{CM}} \simeq \sqrt{2m_0c^2}\,\sqrt{T_{\mathrm{LAB}}}$$

en el límite relativista extremo, donde $T_{\mathrm{LAB}} \gg m_0c^2$. ¿Cuáles serían las consecuencias prácticas en el estudio de las reacciones nucleares de alta energía?

9. Considere una colisión en el marco LAB entre una partícula 2 en movimiento y una partícula 1 estacionaria, ambas de masa en reposo m_0. Muestre que el ángulo entre los vectores velocidad de las dos partículas después de la colisión es siempre 90° en la mecánica clásica, y considere cómo se modifica este resultado en la mecánica relativista. *Sugerencia:* Transforme al marco CM, trate la colisión, y vuelva al marco LAB.

10. Un electrón (carga -4.8×10^{-10} ues, masa 9.1×10^{-28} g), inicialmente en reposo en una de las placas de un condensador de placas planas y paralelas, se separa de ella y se mueve en el vacío bajo la influencia del campo eléctrico del condensador hasta llegar a la otra placa. La separación entre las placas es de 10^2 cm, y el voltaje entre ellas es de 10^7 volts ($10^7/300$ stat-volts). Calcule el tiempo necesario, en el marco de referencia del condensador, para que el electrón pase de una placa a la otra. Discuta la justificación del uso de la teoría desarrollada en este capítulo en este problema, en el que existen aceleraciones. *Sugerencia:* la magnitud de la carga eléctrica y la magnitud de la componente del campo eléctrico paralela a la dirección del movimiento permanecen invariantes frente a una transformación de Lorentz.

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 2

La radiación térmica y el origen de la mecánica cuántica

1. Introducción

En el transcurso de un intento afortunado de encontrar la solución al problema que presentaba la discrepancia entre el espectro experimental de la radiación térmica y las predicciones de la teoría clásica, Planck llegó a la conclusión de que la energía de un sistema que efectúa oscilaciones armónicas simples, sólo puede ser un múltiplo entero de una cierta cantidad finita de energía (1901). Einstein aplicó una idea semejante al explicar el efecto fotoeléctrico y Bohr en una teoría que predecía con gran precisión muchas de las características del complejo espectro atómico (1913). El trabajo de estos tres físicos y los desarrollos subsiguientes de Broglie, Schrödinger y Heisenberg (hacia 1925), constituye lo que se conoce como *teoría cuántica*. Esta teoría, junto con la relatividad, encierran las características más sobresalientes de la física moderna. En este capítulo comenzaremos el estudio de la teoría cuántica con una discusión sobre la radiación térmica.

Tal es la naturaleza del tema, que cualquier discusión sobre la radiación térmica se debe basar en conocimientos avanzados de diferentes campos de la física clásica: termodinámica, mecánica estadística y electromagnetismo. En muchos casos, solamente citaremos los resultados y los justificaremos mediante argumentos cualitativos, ya que la demostración tiene un lugar más apropiado en libros de texto especializados. Sin embargo, reproduciremos con detalle el paso en el que Planck introduce la cuantización de la energía, y entonces veremos exactamente cómo su introducción resuelve un conflicto serio entre el experimento y la teoría clásica.

2. La emisión de la radiación electromagnética por cargas aceleradas

La superficie de todo cuerpo que se encuentra a una temperatura mayor que el cero absoluto emite energía, en forma de energía térmica, generada por el movimiento de las cargas eléctricas que se encuentran cerca de la superficie. Esta radiación consiste de ondas electromagnéticas (llamadas frecuentemente ondas infrarrojas), cuya naturaleza es igual a la de la luz visible, aunque de una longitud de onda mayor. Puesto que en diferentes ocasiones hablaremos

www.FreeLibros.me

en este libro de la emisión de radiación electromagnética por una carga en movimiento, es oportuno dar ahora una descripción de la teoría clásica del proceso. Esta descripción será cualitativa, aunque se presentarán algunos resultados cuantitativos de la teoría.

La teoría elemental de la electrostática muestra que toda carga estacionaria q se encuentra rodeada por un campo eléctrico especificado por el vector **E**. Para una carga puntual, este campo está dado por la ley de Coulomb:

$$\mathbf{E} = \frac{q}{r^2}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) \tag{2–1}$$

donde **r** es el vector que va de la carga al punto donde se calcula **E** y $(\mathbf{r}/r)$ un vector unitario en esa dirección.* A menudo es conveniente representar el campo eléctrico en términos de *líneas de fuerza* que se construyen de modo que, en cualquier punto, son paralelas a la dirección local de **E**, y su densidad (número de líneas por cm^2 que cruzan una superficie normal a la dirección de **E**) es igual al valor local de E. En la figura 2–1 se muestra una representación bidimensional de las líneas de fuerza que rodean una carga estacionaria. Este campo eléctrico estático (esto es, no varía al transcurrir el tiempo) contiene energía almacenada. Así, ρ, la energía almacenada por unidad de volumen, está relacionada con el valor local de E por la ecuación

$$\rho = E^2/8\pi \tag{2–2}$$

si el campo se encuentra en un medio de permeabilidad igual a uno, como lo es el vacío. Esta relación se puede verificar sin dificultad, al considerar un condensador de placas paralelas, donde E es constante en todo punto, e igualando la energía necesaria para cargar el condensador a la energía almacenada en el campo eléctrico.

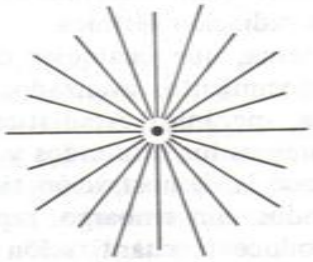

Figura 2-1. Las líneas de fuerza alrededor de una carga estacionaria.

La energía almacenada en el campo de una carga en reposo es estática y no se radía en forma de radiación electromagnética; si no fuera éste el caso, claramente se violaría el principio de la conservación de la energía. También es cierto que la energía almacenada en el campo de una carga que se mueve con velocidad constante no se radía, sino que acompaña a la carga en su movi-

* A menos que se indique lo contrario, emplearemos en este libro las unidades del sistema cgs-Gauss. De este modo, las cargas se expresarán siempre en ues (unidades electrostáticas).

www.FreeLibros.me

miento, aunque está asociada con la carga un campo eléctrico **E** no estático y, también, de acuerdo con la ley de Ampere, un campo magnético **H** no estático. Puede verse que esto es así transformando mentalmente a un marco de referencia en el cual la carga se encuentre en reposo, observando que allí la carga no puede radiar y aplicando el requisito relativista de que el comportamiento de la carga no puede depender —ya sea que radíe o no— del marco de referencia desde el cual se la ve. La energía total almacenada en el campo de una carga que se mueve con velocidad constante es mayor que la almacenada cuando se encuentra estacionaria: ya que existe, además, un campo magnético **H**. La teoría electromagnética muestra que la densidad de energía es

$$\rho = \frac{1}{8\pi}(E^2 + H^2) \qquad (2\text{–}2')$$

para una permeabilidad igual a uno. El exceso de energía es igual al trabajo que efectúan las fuerzas que mueven inicialmente a la carga.

Para una carga que está acelerada, es imposible que los campos eléctrico y magnético no estáticos se ajusten mutuamente, de modo que la energía almacenada no se radíe, como pueden hacerlo en el caso de una carga que se mueve con velocidad constante. Podemos verlo cualitativamente considerando el comportamiento del campo eléctrico. En la figura 2–2 describimos el campo mediante algunas de las líneas de fuerza que rodean una carga que al tiempo t se encontraba en reposo; posteriormente tuvo una aceleración constante hacia la derecha durante el intervalo de t a t' y, finalmente continuó moviéndose con velocidad constante. La figura muestra las líneas de fuerza en algún instante posterior t'', observadas en el marco de referencia que se mueve con la velocidad final y con la restricción de que todos los tiempos se miden en ese marco. En la vecindad de la carga, las líneas de fuerza están dirigidas radialmente hacia afuera de la posición presente de la carga, mientras que a

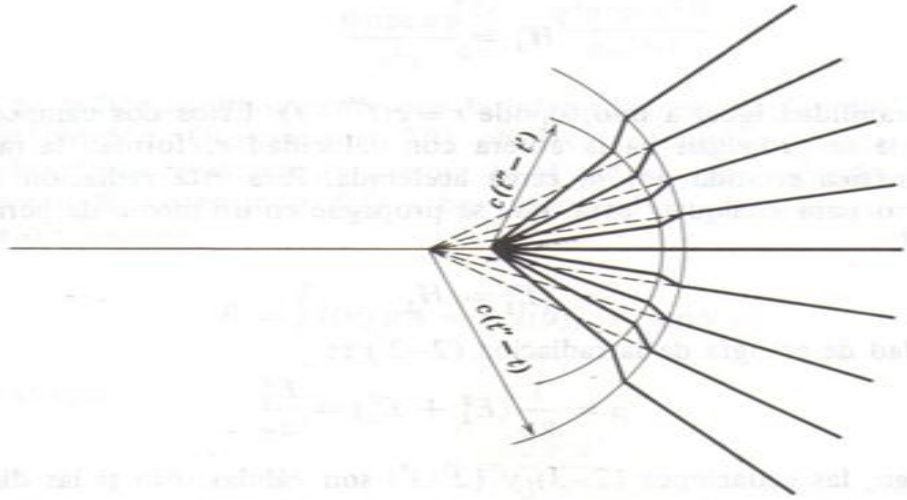

Figura 2-2. Las líneas de fuerza alrededor de una carga acelerada. Sólo se indican algunas de las líneas.

www.FreeLibros.me

distancias mayores están dirigidas radialmente a partir de la posición inicial de la carga. La razón es simplemente que la información respecto a la posición de la carga no se puede transmitir con velocidad infinita, sino con la velocidad c. Como consecuencia, existen fracturas en las líneas de fuerza contenidas entre la esfera cuyo centro es la carga en la posición inicial y de radio $c(t'' - t)$, —que corresponde a la mínima distancia a la que el campo puede "saber" que comenzó la aceleración—, y una esfera cuyo centro es la carga en la posición actual y de radio $c(t'' - t')$ —que es la distancia mínima a la cual el campo puede saber que la aceleración cesó. A medida que t'' aumenta, la región que contiene las fracturas se expande hacia afuera con velocidad c. En esta región, el campo eléctrico tiene componentes longitudinales y transversales en la dirección de expansión. Sin embargo, puede verse fácilmente, al construir los diagramas para diferentes valores de t'', que la componente longitudinal se anula rápidamente, de modo que puede ser ignorada, mientras la componente transversal lo hace lentamente. Mediante cálculos basados en la misma idea de nuestra discusión cualitativa se puede mostrar que, a grandes distancias de la región de aceleración (t'' grande), el campo eléctrico transversal obedece la ecuación

$$E_\perp = \frac{qa \operatorname{sen} \theta}{c^2 r} \tag{2–3}$$

para permeabilidad igual a uno, donde $r = c(t'' - t)$ es el módulo del vector **r** que va desde el punto donde se produjo la aceleración **a** al punto donde se calcula el campo transversal y θ el es el ángulo entre **r** y **a**. Puede verse en nuestros diagramas la dependencia de $E_\perp$ con θ y r; es claro que $E_\perp$ debe ser proporcional a q y a a.

La teoría electromagnética muestra también que, a causa de la aceleración, habrá un campo magnético transversal $H_\perp$ que se mueve junto con $E_\perp$, y que a distancias grandes de la región de aceleración tiene el valor

$$H_\perp = \frac{qa \operatorname{sen} \theta}{c^2 r} \tag{2–3'}$$

para permeabilidad igual a uno, donde $r = c(t'' - t)$. Estos dos campos transversales, que se propagan hacia afuera con velocidad c, forman la radiación electromagnética emitida por la carga acelerada. Para esta radiación electromagnética, o para cualquier otra, que se propague en un medio de permeabilidad unidad,

$$E_\perp = H_\perp$$

y la densidad de energía de la radiación (2–2′) es

$$\rho = \frac{1}{8\pi}(E_\perp^2 + E_\perp^2) = \frac{E_\perp^2}{4\pi} \tag{2–4}$$

Sin embargo, las ecuaciones (2–3) y (2–3′) son válidas sólo si las dimensiones de la región en las que se produjo la aceleración son pequeñas en comparación con el producto de c y el lapso que duró la aceleración, como lo hemos supuesto.

www.FreeLibros.me

La intensidad I de la radiación emitida se define como la energía que atraviesa cada segundo un cm² de una superficie normal a la dirección de propagación. Considere la figura 2–3, que muestra la radiación propagándose en alguna dirección, a una distancia suficientemente grande de la región de aceleración, de modo que forma un haz de rayos que consideraremos paralelos. La radiación se propaga con la velocidad de c cm/seg; en un segundo se moverá la distancia c cm. En consecuencia, toda la energía contenida en el paralelepípedo cuya base tiene 1 cm² de área, normal a la dirección de

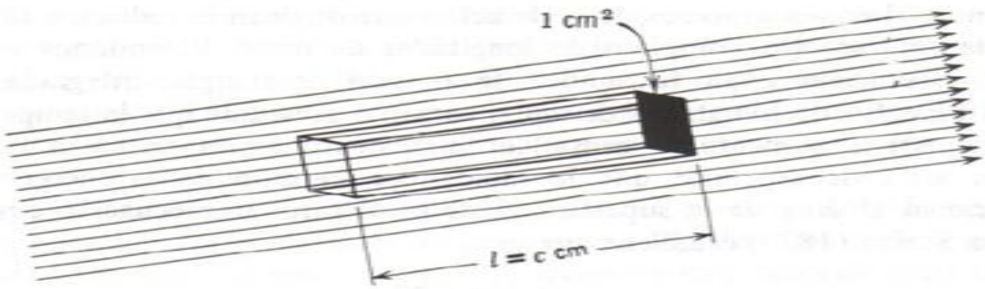

Figura 2-3. Ilustrando el transporte de energía en un haz paralelo de radiación.

propagación, y de longitud $l = c$ cm, pasará por la base en un segundo. La energía contenida en el paralelepípedo es igual a la densidad de energía ρ por el volumen c cm³. La intensidad I es, entonces,

$$I = \rho c \tag{2–5}$$

Empleando las ecuaciones (2–3) y (2–4), tenemos

$$I(\theta) = \frac{E_\perp^2 c}{4\pi} = \frac{q^2 a^2 \operatorname{sen}^2 \theta}{4\pi c^3 r^2} \tag{2–6}$$

donde se indica explícitamente que la intensidad es una función de la dirección de emisión. Observe que $I(\theta)$ obedece la familiar ley del inverso del cuadrado. Puede evaluarse la energía total radiada por segundo en todas las direcciones, R, integrando $I(\theta)$ sobre la superficie de una esfera de radio arbitrario r, esto es,

$$R = \int I(\theta)\, dA = \int_0^\pi I(\theta) 2\pi r^2 \operatorname{sen}\theta\, d\theta$$

que da el valor

$$R = \frac{2}{3}\frac{q^2 a^2}{c^3} \tag{2–7}$$

para la rapidez de radiación de energía. En los capítulos siguientes emplearemos solamente algunas ideas cualitativas de esta sección; las ecuaciones se emplearán en la parte final del libro.

www.FreeLibros.me

3. Emisión y absorción de la radiación por superficies

Retornemos al fenómeno de la radiación térmica. Como hemos dicho, todo cuerpo cuya temperatura es mayor que la del cero absoluto, emite esta radiación. Esto se puede describir, en la teoría clásica, como el resultado de la aceleración de las cargas eléctricas debida al movimiento térmico. Ahora bien, en una aceleración que dura un cierto período de tiempo, la mayor parte de la radiación emitida tiene una frecuencia aproximadamente igual al recíproco del período, y una longitud de onda igual a c multiplicada por el período. Pero, en los muy diversos procesos de aceleración que originan la radiación térmica, se emite un espectro completo de longitudes de onda. Basándonos en esta imagen, esperaríamos que la rapidez de emisión de energía, integrada sobre todo el espectro de longitudes de onda, aumente a medida que la temperatura de la superficie aumenta, a causa del incremento en la agitación térmica; también sería de esperarse que la rapidez de emisión de la energía fuera proporcional al área de la superficie. Este es el caso: una ecuación empírica debida a Stefan (1879) establece que

$$I_T = \sigma e T^4 \tag{2–8}$$

La cantidad I_T es la energía total emitida, por segundo y por cm^2, por una superficie a la temperatura T; e es una constante denominada *emisividad*, cuyo valor varía entre 0 y 1, que depende de la naturaleza de la superficie emisora, y $\sigma = 0.567 \times 10^{-4}$ erg cm^{-2} grado^{-4} s^{-1}, es la constante de Stefan y Boltzmann. La energía emitida es proporcionada por la energía de agitación térmica.

También consideraremos la absorción de radiación térmica por una superficie. En este proceso, se elimina energía de la radiación térmica incidente, a través de su acción sobre las cargas eléctricas, y termina como energía de agitación térmica. Es interesante la relación que existe entre la eficiencia de la superficie como emisor, medida por e, y su eficiencia como un absorbente. Esta la mide un constante, llamada *absortividad*, a, que se define como la relación entre la energía térmica total absorbida por la superficie y la energía térmica total que incide sobre ella. La relación entre e y a fue descubierta por Kirchhoff (1895) y es, simplemente,

$$e = a \tag{2–9}$$

Esta relación se establece mediante un argumento termodinámico, —independiente de cualquier hipótesis detallada acerca de los procesos de absorción y emisión—, al considerar el equilibrio térmico entre superficies de diferente naturaleza que intercambian energía por emisión y absorción. Por otra parte, esta relación ha sido verificada experimentalmente.

4. La radiación del cuerpo negro

Un cuerpo que tiene la propiedad de absorber toda la radiación que incide sobre él, esto es, con $a = 1$, recibe el nombre de *cuerpo negro*. En la

www.FreeLibros.me

naturaleza existen objetos cuyo comportamiento se aproxima al del cuerpo negro. Por ejemplo: un cuerpo cubierto con una capa difusa de pigmento negro; posteriormente daremos otro ejemplo. Ya que la absortividad de un cuerpo negro es igual a la unidad, se sigue, de la ley de Kirchhoff, que también lo es su emisividad. Un cuerpo negro, que es el absorbente más eficiente, también es el radiador más eficiente. Aplicando la condición $e = 1$ a la ecuación (2–8), vemos que la potencia radiante emitida por cm^2 es la misma para los cuerpos negros que se encuentran a una temperatura dada. Esto sugiere poderosamente que las otras propiedades de la radiación térmica emitida por los cuerpos negros, tal como la distribución espectral de la radiación, también dependen de la temperatura del cuerpo negro, aunque no de su estructura detallada. Puede mostrarse termodinámicamente que éste es el caso para dos cuerpos negros que se encuentran en equilibrio. Es claro que las propiedades universales de la radiación térmica emitida por cuerpos negros les concede un particular interés teórico.

La distribución espectral de la radiación del cuerpo negro se especificará por la cantidad $I_T(\lambda)$, definida de manera que $I_T(\lambda)d\lambda$ sea igual a la energía emitida cada segundo por cm^2 en el intervalo de longitudes de onda comprendido entre λ y $\lambda + d\lambda$, por la superficie a la temperatura T. Las primeras medidas precisas de esta cantidad están asociadas con los nombres de Lummer y Pringsheim (1899); se hicieron con un instrumento semejante al espectrómetro de prisma usado para medir el espectro óptico, salvo que es necesario el empleo de materiales especiales para que los lentes, prismas, etc., sean transparentes a la radiación térmica de longitud de onda larga. En la figura 2–4 se indica la dependencia observada de $I_T(\lambda)$ con respecto a λ y a T; la flecha sobre la abscisa indica la longitud de onda para la que el ojo tiene su máxima respuesta (luz verde).

Observamos que, para una λ dada, $I_T(\lambda)$ aumenta al incrementar T. La integral de $I_T(\lambda)$ sobre toda λ es, por supuesto, igual a la cantidad I_T definida anteriormente. Esta integral, que es igual al área bajo las curvas, aumenta como la cuarta potencia de T, en concordancia con la ecuación (2–8). La figura 2–4 muestra también el corrimiento del espectro hacia longitudes de onda pequeña a medida que T aumenta. Una inspección cualitativa de la figura demostrará la validez de la ecuación

$$\lambda_{\text{máx}} \propto 1/T \tag{2–10}$$

donde $\lambda_{\text{máx}}$ es el valor de λ para el cual $I_T(\lambda)$ alcanza su valor máximo para un valor particular de T. Estos resultados concuerdan con la experiencia diaria, de que los cuerpos emiten una cantidad mayor de calor a medida que aumenta su temperatura y que, en este caso, su "color" va del rojo mate al azul blanco (esto es, la energía radiante aumenta en la región de las longitudes de onda corta).

Considere ahora un objeto que tiene una cavidad conectada al exterior mediante un pequeño orificio. La radiación externa incidente sobre el orificio entra en la cavidad y es reflejada sucesivamente por la superficie de ésta y, ocasionalmente, es absorbida por sus paredes. Si el área del orificio es pequeña en comparación con el área de la superficie interna de la cavidad, una cantidad

www.FreeLibros.me

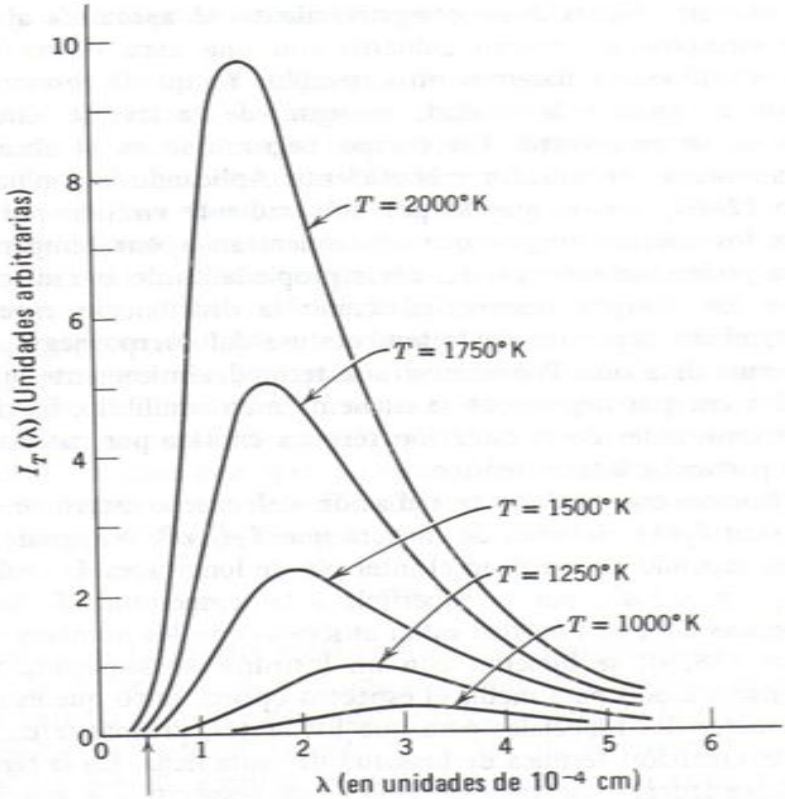

Figura 2-4. La distribución espectral de la radiación del cuerpo negro para diferentes temperaturas.

despreciable de la radiación incidente será reflejada nuevamente al orificio; esto es, se absorbe toda la radiación incidente. Para este caso $a = 1$ y, por tanto, deberá tener las propiedades de la superficie de un cuerpo negro.

Suponga ahora que las paredes de la cavidad se calientan a la temperatura T. Estas emitirán radiación térmica, que llenará la cavidad. La pequeña fracción de esta radiación incidente desde dentro sobre el orificio, pasará a través de él, actuando como un emisor de radiación térmica. Ya que el orificio debe tener las propiedades de la superficie de un cuerpo negro, la radiación emitida debe tener el espectro de cuerpo negro. Puesto que el orificio sólo selecciona a la radiación térmica presente dentro de la cavidad, es claro que la radiación en la cavidad debe tener también un espectro de cuerpo negro. De hecho, deberá tener un espectro de cuerpo negro característico de la temperatura T de las superficies, ya que es la única temperatura definida para el sistema. El espectro emitido por el orificio de la cavidad se especifica en términos del flujo de energía $I_T(\lambda)$; dentro de la cavidad, empero, es conveniente especificarlo en términos de una densidad de energía $\rho_T(\lambda)$, que se define de modo que $\rho_T(\lambda)\,d\lambda$ es la energía contenida en 1 cm^3 de la cavidad en la longitud de onda de λ a $\lambda + d\lambda$. Es claro, entonces que $\rho_T(\lambda)$ será proporcional a $I_T(\lambda)$, con una constante de proporcionalidad independiente de

www.FreeLibros.me

λ y T. Esta afirmación, como las hechas en los dos últimos párrafos, puede, por supuesto, demostrarse rigurosamente.

5. La ley de Wien

A partir de la termodinámica clásica, se pueden entender muchas propiedades de la radiación del cuerpo negro. En 1884 Boltzmann derivó teóricamente la ecuación para I_T, la energía total emitida por cm² cada segundo por el radiador de cuerpo negro (ecuación (2–8) para el caso $e = 1$). En su derivación consideró una cavidad cilíndrica con paredes reflectoras, con un pistón móvil, y llena de radiación térmica a la temperatura T. Puede mostrarse que la radiación térmica, como toda radiación electromagnética, ejerce una presión proporcional a la densidad de energía.* Considerando este sistema a través de un ciclo de expansión y compresión, un ciclo de Carnot, como se le llama en termodinámica, Boltzmann obtuvo una relación entre el trabajo efectuado por la presión de la radiación y la temperatura, relación que conduce al resultado deseado, ya que la presión puede ponerse en términos de la densidad de energía la que, a su vez, se expresa en función de I_T.

En el proceso de expansión o compresión de esta cavidad, cambiará la longitud de onda de cualquier componente de la radiación como resultado del corrimiento Doppler al reflejarse en un pistón móvil. Al considerar detalladamente este hecho, Wien (1893) derivó una función general para la distribución espectral de la radiación del cuerpo negro, que se conoce como ley de Wien,

$$\rho_T(\lambda) = \frac{f(\lambda T)}{\lambda^5} \tag{2–11}$$

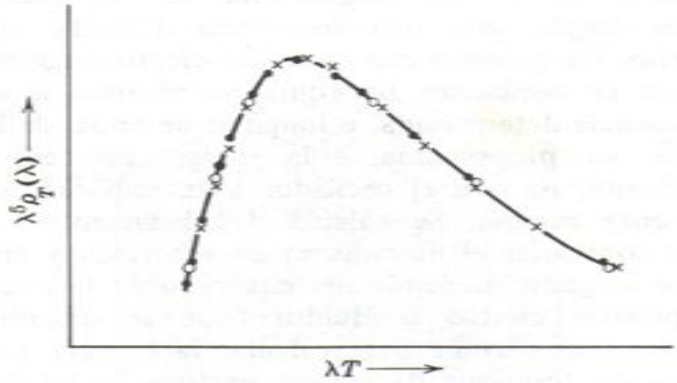

Figura 2-5. Una verificación experimental de la ley de Wien, ●, $T = 1646°K$; ×, $T = 1449°K$; ○, $T = 1259°K$. Según F. K. Richtmyer, E. H. Kennard y T. Lauritsen, *Introduction to Modern Physics*, quinta edición, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

* En este aspecto se comporta precisamente como un gas.

www.FreeLibros.me

donde $f(\lambda T)$ es función del producto de la longitud de onda y la temperatura. Wien no especificó la forma de esta función. La ecuación concuerda excelentemente con los datos experimentales, como puede verse en la figura 2–5, donde se grafica $\lambda^5 \rho_T(\lambda)$ como una función de λT usando los datos de Lummer y Pringsheim para $I_T(\lambda)$ (lo que es proporcional a $\rho_T(\lambda)$ a las temperaturas de 1259°, 1449° y 1646°. Vemos que todos los datos se encuentran sobre la misma curva, confirmando lo predicho por la ecuación (2–11) esto es, que $\lambda^5 \rho_T(\lambda)$ es una función universal de la variable λT. Es claro que la ley de Wien concuerda con el hecho empírico expresado en la ecuación (2–10).

6. La teoría de Rayleigh y Jeans

La derivación termodinámica de Wien fue útil en cuanto permitió discutir el espectro de radiación del cuerpo negro para diferentes temperaturas, en términos de una sola función $f(\lambda T)$. Wien no determinó la forma de esta función. Es característico de los argumentos termodinámicos mostrar que deben existir ciertas relaciones entre las variables que describen algún sistema físico, sin requerir una teoría completa sobre el comportamiento del sistema; sus argumentos están basados en principios generales, aplicables a todos los sistemas físicos, sin tomar en cuenta los detalles de la composición de un sistema particular. Una teoría que evalúe la función $f(\lambda T)$ debe tomar cuenta detallada de algunas de las propiedades del cuerpo negro.

A principios de este siglo se llevaron a cabo varios intentos para formular esta teoría. En uno de ellos se consideró el comportamiento de las cargas aceleradas en las paredes de la cavidad del cuerpo negro: las cargas son la fuente de la radiación del cuerpo negro; cada una de ellas efectuaba una oscilación armónica simple, con una frecuencia definida, alrededor de su posición de equilibrio. De acuerdo con la teoría electromagnética, cada carga radia a la frecuencia de oscilación. En equilibrio térmico, la componente de energía de una frecuencia determinada, o longitud de onda, de la radiación del cuerpo negro, debe ser proporcional a la energía promedio del oscilador cargado correspondiente, ya que el oscilador y la radiación están intercambiando constantemente energía. Se calculó detalladamente la constante de proporcionalidad al considerar el mecanismo de absorción y emisión de energía de un oscilador cargado: depende del cuadrado de la frecuencia. A continuación, se emplearon ciertos resultados (que se describirán posteriormente) de la mecánica estadística para calcular la energía promedio de los osciladores cargados en términos de la temperatura de las paredes. Así, se obtiene inmediatamente la distribución espectral de la radiación del cuerpo negro y, por consiguiente, la función $f(\lambda T)$. Dejando lo anterior a un lado, regresemos a la teoría de Rayleigh y Jeans, que conduce a los mismos resultados, y que tiene unas bases más firmes, pues no requiere de una imagen detallada del origen de la radiación del cuerpo negro. De hecho, se ha mostrado que la forma de $f(\lambda T)$, obtenida por Rayleigh y Jeans, es una consecuencia necesaria de las teorías de la física clásica.

www.FreeLibros.me

Considere una cavidad de paredes metálicas a la temperatura T que emiten radiación electromagnética térmica. Cuando se encuentra en equilibrio, esta radiación tiene un espectro característico al del cuerpo negro a esa temperatura. Además, como probaremos, en el estado estacionario, que se obtiene cuando está en equilibrio la radiación electromagnética dentro de la cavidad, la radiación se encuentra en la forma de ondas estacionarias con nodos sobre las superficies metálicas. Rayleigh y Jeans calcularon el número de estas ondas contenidas dentro del intervalo de longitud de onda entre λ y $\lambda + d\lambda$. A continuación calcularon su energía promedio. Esta energía depende de la temperatura T, como se muestra en la mecánica estadística. El número de ondas estacionarias en el intervalo de longitud de onda, multiplicado por la energía promedio de las ondas y dividido entre el volumen de la cavidad, es igual a la energía promedio por cm^3 en el intervalo de longitud de la onda entre λ y $\lambda + d\lambda$, lo que es igual a $\rho_T(\lambda)$. A partir de lo anterior, se puede calcular $f(\lambda T)$ mediante la ecuación (2–11).

Supongamos que la cavidad de paredes metálicas es un cubo de arista a, como se muestra en la figura 2–6. La radiación que se refleja en las paredes se puede analizar en componentes a lo largo de las tres direcciones mutuamente perpendiculares definidas por las aristas de la cavidad. Ya que las paredes opuestas son paralelas, las tres componentes de la radiación no se mezclan y podemos tratarlas separadamente. Considere la componente x y la pared metálica en $x = 0$: ésta refleja la componente de la radiación incidente, de modo que las ondas incidente y reflejada se combinan para formar una onda estacionaria. Ahora bien, puesto que la radiación electromagnética es una vibración transversal, esto es, su vector eléctrico **E** es perpendicular a la

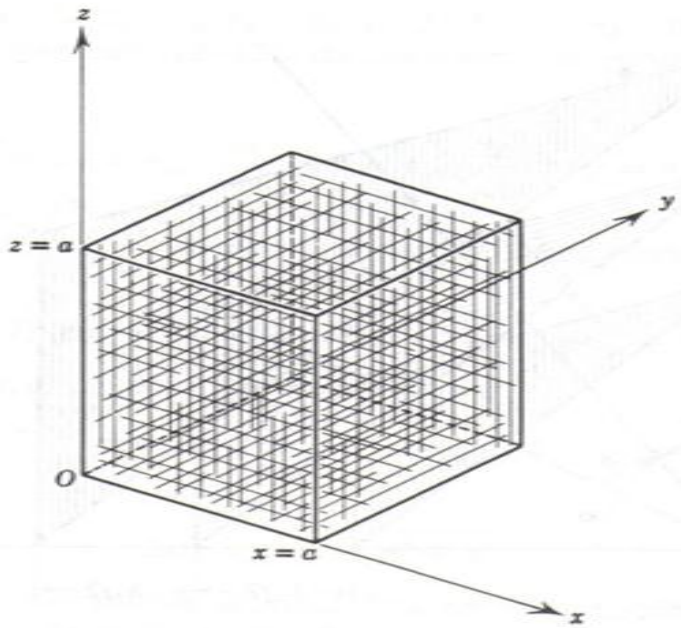

Figura 2-6. Una cavidad cúbica que contiene radiación electromagnética.

www.FreeLibros.me

dirección de propagación, que, a su vez, es perpendicular a la pared en cuestión, la **E** resulta paralela a la pared. Pero una pared metálica no puede tolerar un campo eléctrico paralelo a ella, ya que fluyen corrientes para neutralizarlo. Por consiguiente, la **E** para esta componente debe cancelarse sobre la pared, esto es, la onda estacionaria asociada con la componente x tendrá un nodo en $x = 0$; asimismo tendrá un nodo en $x = a$, puesto que no puede existir un campo eléctrico paralelo sobre la pared opuesta. Argumentos análogos se aplican a las otras dos componentes: la onda estacionaria asociada con la componente y tendrá nodos en $y = 0$ y $y = a$; la onda estacionaria asociada con la componente z, tendrá dos, en $z = 0$ y $z = a$. Como veremos a continuación, estas condiciones limitan el número de las posibles longitudes de onda de la radiación electromagnética contenida en la cavidad.

Para calcular el número de longitudes de onda posibles, considere la radiación de longitud de onda λ, de frecuencia $\nu = c/\lambda$, que se muestra en la figura 2–7. La radiación es una onda estacionaria, ya que sus tres componentes son ondas estacionarias. Hemos indicado la ubicación de algunos de los nodos de esta onda por un conjunto de planos perpendiculares a la dirección de propagación α, β y γ. La distancia entre estos planos nodales es $\lambda/2$, donde λ es su longitud de onda. También hemos indicado la ubicación de los nodos de las tres componentes sobre los ejes coordenados. Las distancias entre estos nodos son

$$\frac{\lambda_x}{2} = \frac{\lambda}{2\cos\alpha}\ ;\ \frac{\lambda_y}{2} = \frac{\lambda}{2\cos\beta}\ ;\ \frac{\lambda_z}{2} = \frac{\lambda}{2\cos\gamma} \tag{2–12}$$

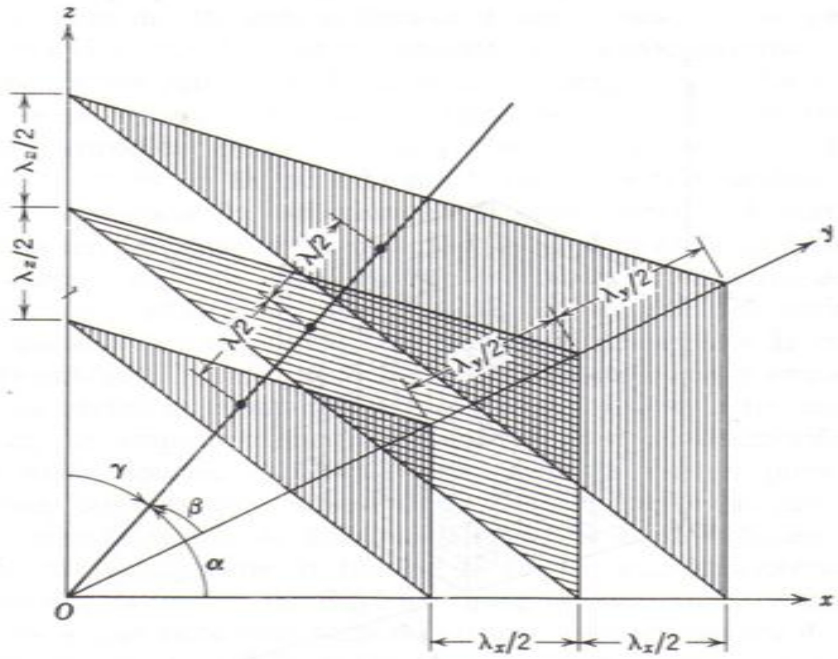

Figura 2-7. Los planos nodales de una onda estacionaria que se propaga en cierta dirección dentro de una cavidad cúbica.

www.FreeLibros.me

Escribamos las expresiones para la magnitud de las tres componentes del campo eléctrico sobre los ejes:

$$\begin{aligned} E(x, t) &= A \operatorname{sen}(2\pi x/\lambda_x) \operatorname{sen}(2\pi\nu t) \\ E(y, t) &= B \operatorname{sen}(2\pi y/\lambda_y) \operatorname{sen}(2\pi\nu t) \\ E(z, t) &= C \operatorname{sen}(2\pi z/\lambda_z) \operatorname{sen}(2\pi\nu t) \end{aligned} \tag{2-13}$$

La expresión para la componente x representa una onda de amplitud máxima A, con una variación espacial $\operatorname{sen}(2\pi x/\lambda_x)$ y de frecuencia ν. Ya que $\operatorname{sen}(2\pi x/\lambda_x)$ se cancela para $2x/\lambda_x = 0, 1, 2, 3, \ldots$, la onda es estacionaria con una longitud de onda λ_x, y la separación entre sus nodos es de $\Delta x = \lambda_x/2$. La expresión para las componentes y y z representan ondas estacionarias de amplitud máxima B y C, con longitudes de onda λ_y y λ_z, respectivamente; las tres componentes oscilan con la frecuencia ν de la radiación. Observe que estas tres expresiones satisfacen automáticamente el requisito de tener un nodo en $x = 0$, $y = 0$ y $z = 0$. Para que también satisfagan el requisito de que la componente x tenga un nodo en $x = a$, la componente y un nodo en $y = a$ y la componente z un nodo en $z = a$, debemos poner

$$\begin{aligned} 2x/\lambda_x &= n_x, \quad \text{para } x = a \\ 2y/\lambda_y &= n_y, \quad \text{para } y = a \\ 2z/\lambda_z &= n_z, \quad \text{para } z = a \end{aligned} \tag{2-14}$$

donde $n_x = 0, 1, 2, 3, \ldots$; $n_y = 0, 1, 2, 3, \ldots$; $n_z = 0, 1, 2, 3, \ldots$. Empleando las ecuaciones (2–12), las condiciones anteriores se pueden escribir en la forma

$$\frac{2a}{\lambda}\cos\alpha = n_x, \quad \frac{2a}{\lambda}\cos\beta = n_y, \quad \frac{2a}{\lambda}\cos\gamma = n_z$$

Elevando al cuadrado ambos miembros de estas ecuaciones y sumándolos obtenemos

$$(2a/\lambda)^2(\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma) = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

Pero los ángulos α, β, y γ poseen la propiedad

$$\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1$$

de modo que

$$2a/\lambda = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

donde n_x, n_y, n_z, son enteros positivos. Esta ecuación describe la limitación sobre las longitudes de onda posibles de la radiación electromagnética contenida en la cavidad.

www.FreeLibros.me

Conviene continuar la discusión en términos de las frecuencias permitidas en lugar de las longitudes de ond permitidas, que son

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{2a}\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \tag{2–15}$$

Contaremos el número de frecuencias permitidas en un determinado intervalo de frecuencias, construyendo una red cúbica uniforme en un octante de un sistema rectangular de coordenadas, de modo que las tres coordenadas de cada punto de la red son iguales a un conjunto posible de los tres enteros n_x, n_y, n_z. Vea la figura 2–8. Por construcción, cada punto de la red corresponde a una frecuencia permitida. Además, $N(\nu)d\nu$, el número de frecuencias permitidas en el intervalo de ν a $\nu + d\nu$, es igual a $N(r)dr$, el número de puntos contenidos entre dos esferas concéntricas de radios r y $r + dr$, donde

$$r = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

De la ecuación (2–15) esto es igual a

$$r = \frac{2a}{c}\nu \tag{2–16}$$

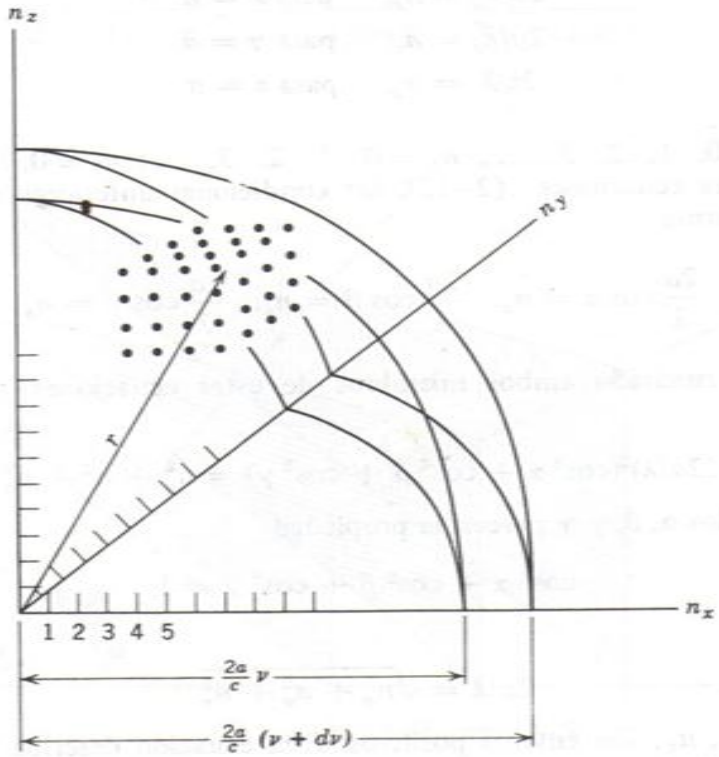

Figura 2-8. Un sistema de coordenadas rectangulares útil para contar el número de frecuencias permitidas en una cavidad cúbica. Sólo se muestran algunos puntos.

www.FreeLibros.me

Ya que $N(r)dr$ es igual al volumen encerrado por las dos esferas multiplicado por la densidad de puntos de la red, que, por construcción, es igual a uno, entonces

$$N(r)\,dr = \frac{1}{8}\,4\pi r^2\,dr = \frac{\pi r^2\,dr}{2}$$

Igualándolo a $N(\nu)d\nu$, y calculando $r^2\,dr$ a partir de la ecuación (2–16), obtenemos

$$N(\nu)\,d\nu = \frac{\pi}{2}\left(\frac{2a}{c}\right)^3 \nu^2\,d\nu$$

Esto completa el cálculo, salvo que debemos multiplicar estos resultados por dos, ya que, para cada una de las frecuencias permitidas que hemos enumerado, hay dos ondas independientes correspondientes a los dos estados posibles de polarización de la radiación electromagnética.* Así, el número de frecuencias permitidas en el intervalo de frecuencias de ν a $\nu + d\nu$ es

$$N(\nu)\,d\nu = \frac{8\pi a^3 \nu^2\,d\nu}{c^3} \tag{2–17}$$

Puede mostrarse que $N(\nu)d\nu$ es independiente de la *forma* que tenga la cavidad, dependiendo solamente de su volumen a^3.

7. La distribución de probabilidad de Boltzmann

El siguiente paso en el cálculo de Rayleigh y Jeans es la evaluación de la energía promedio contenida en cada onda estacionaria de frecuencia ν. Conforme a la física clásica, la energía de alguna onda particular puede tener cualquier valor comprendido entre cero e infinito; su valor es proporcional al promedio de cuadrado de su amplitud (comparar con la ecuación (2–4)). Pero si tenemos un sistema que contiene un número grande de entidades físicas de la misma naturaleza que se encuentran en equilibrio térmico a la temperatura T, como lo es el sistema de ondas estacionarias en equilibrio dentro de la cavidad de cuerpo negro, la teoría clásica de la mecánica estadística requiere que las energías de estas entidades esté distribuida de acuerdo con una distribución de probabilidad cuya forma está especificada por T. Puesto que la *energía promedio* está determinada por la distribución de probabilidad, debe tener un *valor definido* que depende de T.

No es difícil entender las ideas esenciales en las que se apoyan estos resultados de la mecánica estadística si se considera un sistema suficientemente simple. Imagínese un sistema formado por entidades de la misma naturaleza

* Que la radiación electromagnética en el intervalo visible (luz) pueda encontrarse en cualquiera de las dos polarizaciones circulares independientes, es un hecho que se discute en casi cualquier texto de física elemental.

www.FreeLibros.me

que contienen energía. Por ejemplo, un conjunto de resortes idénticos en vibración. Suponga, también, que el sistema se encuentra aislado, de modo que su contenido energético permanece constante, y que las diferentes entidades intercambian energía a través de algún mecanismo, de manera que el sistema se encuentra en equilibrio térmico. Suponga, finalmente, que el sistema está formado por cuatro entidades, y que la energía total de cada entidad puede tomar solamente los valores $\epsilon = 0$, $\Delta\epsilon$, $2\Delta\epsilon$, $3\Delta\epsilon$, $4\Delta\epsilon$, $5\Delta\epsilon, \ldots$, y que el valor de la energía total del sistema (que debe ser algún múltiplo entero de $\Delta\epsilon$) es de $3\Delta\epsilon$. Las últimas hipótesis se hacen con el propósito de simplificar el cálculo que vamos a realizar. Después de haber efectuado el cálculo imaginaremos que $\Delta\epsilon$ tiende a cero, de modo que ϵ puede tomar cualquier valor, aunque la energía total del sistema se mantendrá constante. Al mismo tiempo supondremos que el número de entidades que forman al sistema crece indefinidamente.

Ya que las entidades intercambian mutuamente energía, se pueden presentar todas las divisiones posibles de la energía total $3\Delta\epsilon$ entre las cuatro entidades. En el diagrama de la figura 2–9 se indican todas las divisiones posibles. Considere el diagrama marcado con $i = 1$. Este corresponde a una división de la energía total en la que $\epsilon = 0$ para tres de las entidades y $\epsilon = 3\Delta\epsilon$ para la cuarta. Pero, de hecho, existen cuatro divisiones de este tipo, ya que cualquiera de las cuatro entidades se puede encontrar en el estado de energía $\epsilon = 3\Delta\epsilon$. Esto se indica en la columna correspondiente a "número de repetición de las divisiones". Lo mismo es cierto para las divisiones del tipo $i = 3$. El lector puede verificar por sí mismo que el número de repetición para la división $i = 2$ es igual a 12. Al calcular este número se debe tener en cuenta

Índice de las divisiones	$\epsilon = 0$	$\epsilon = \Delta\epsilon$	$\epsilon = 2\Delta\epsilon$	$\epsilon = 3\Delta\epsilon$	$\epsilon = 4\Delta\epsilon$	Número de repetición de las divisiones	P_i
$i = 1$	3			1		4	4/20
$i = 2$	2	1	1			12	12/20
$i = 3$	1	3				4	4/20
$P'(\epsilon)$	40/20	24/20	12/20	4/20	0/20		

Figura 2-9. Ilustración de un cálculo simple que lleva a la distribución de probabilidad de Boltzmann.

www.FreeLibros.me

que cualquier arreglo de las entidades entre los diferentes estados de energía se debe contar como una nueva división, ya que podemos suponer que las entidades se pueden distinguir experimentalmente cuando se encuentran en diferentes estados de energía, aun cuando sean de la misma naturaleza. Por otra parte, la reordenación de entidades en el mismo estado de energía no se contó, puesto que es imposible distinguir las entidades cuando se encuentran en el mismo estado de energía.* Haremos ahora la *hipótesis* final: *las diferentes divisiones de la energía total ocurren con la misma probabilidad.* De este modo, la probabilidad de que ocurra una división de un cierto tipo es proporcional al número de repetición de las divisiones de este tipo, y que la probabilidad relativa, P_i, es igual a este número dividido entre el número total de divisiones. Este número se indica en la columna marcada "P_i". A continuación calculemos $P'(\epsilon)$, la probabilidad de encontrar una entidad en el estado de energía ϵ. Considere, por ejemplo, $\epsilon = 0$. Para las divisiones del tipo $i = 1$ existen tres entidades en este estado, y la probabilidad relativa de que existan estas divisiones es 4/20; para $i = 2$ se tienen dos entidades, con una probabilidad relativa de 12/20; para $i = 3$ existe una entidad, con probabilidad relativa de 4/20. En esta forma, $P'(0)$, la probabilidad de encontrar una entidad en el estado $\epsilon = 0$ es igual a $3 \times 4/20 + 2 \times 12/20 + 1 \times 4/20 = 40/20$. Los valores de $P'(\epsilon)$, calculada en la misma forma para los otros valores de ϵ se indican en el renglón correspondiente a "$P'(\epsilon)$". Estos puntos se encuentran dibujados en la figura 2–10. La línea gruesa corresponde a la función exponencial

$$P(\epsilon) = Ae^{-\epsilon/\epsilon_0} \tag{2–18}$$

donde A y ϵ_0 son constantes. (En la figura se han ajustado las constantes de manera de producir la mejor concordancia con los puntos que representan los resultados de nuestro cálculo.)

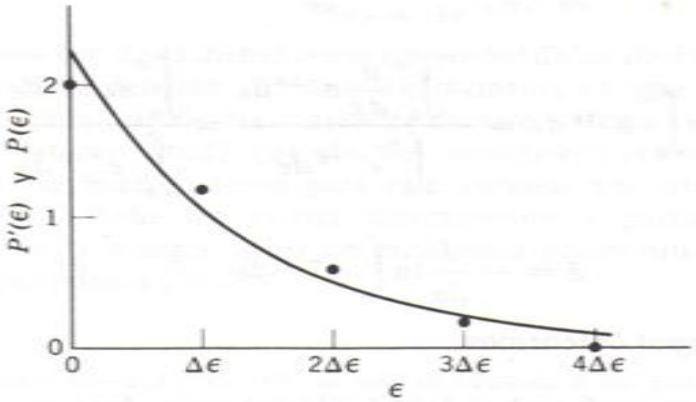

Figura 2-10. Comparación de los resultados de un cálculo simple con la distribución de probabilidad de Boltzmann.

* *Sugerencia:* El número total de reordenaciones (permutaciones) de las cuatro entidades es $4! \equiv 4 \times 3 \times 2 \times 1$. Pero hay que eliminar las reordenaciones de dos entidades dentro del mismo estado de energía, de modo que el número anterior deberá dividirse entre 2! .

www.FreeLibros.me

Imaginemos ahora que $\Delta\epsilon$ tiende a cero, cambiando a su vez el valor de la energía total de $3\Delta\epsilon$ a $N\Delta\epsilon$, haciendo crecer a N en la misma proporción en que $\Delta\epsilon$ decrece de tal forma que la energía total permanezca constante. Como resultado de este paso se tiene que la función $P'(\epsilon)$ está definida para valores de ϵ que se encuentran cada vez más próximos; en el límite, la energía ϵ llega a ser una función continua, como la física clásica lo requiere, y la distribución de probabilidad, $P'(\epsilon)$, se convierte en una función continua. Finalmente, cuando el número de elementos del sistema es grande, la función $P(\epsilon)$ es idéntica a la de la ecuación (2–18).

La cantidad $P(\epsilon)d\epsilon$ da la probabilidad de encontrar una entidad cuya energía se encuentra entre ϵ y $\epsilon + d\epsilon$ para un sistema que está compuesto de un gran número de entidades en equilibrio térmico. También especifica la energía promedio de las entidades:

$$\bar{\epsilon} = \frac{\int_0^\infty \epsilon P(\epsilon)\, d\epsilon}{\int_0^\infty P(\epsilon)\, d\epsilon} \tag{2–19}$$

El integrando en el numerador es la energía ϵ pesada por la probabilidad de que una entidad posea esta energía.* El denominador es la probabilidad de encontrar una entidad con esta energía; es igual al número de entidades en el sistema. Calculando $P(\epsilon)$ de la ecuación (2–18)

$$P(\epsilon) = Ae^{-\epsilon/\epsilon_0} = Ae^{-\alpha\epsilon}, \qquad \alpha \equiv 1/\epsilon_0$$

encontramos que

$$\bar{\epsilon} = \frac{\int_0^\infty A\epsilon e^{-\alpha\epsilon}\, d\epsilon}{\int_0^\infty Ae^{-\alpha\epsilon}\, d\epsilon} = \frac{\int_0^\infty \epsilon e^{-\alpha\epsilon}\, d\epsilon}{\int_0^\infty e^{-\alpha\epsilon}\, d\epsilon}$$

Ahora

$$-\frac{d}{d\alpha}\ln\int_0^\infty e^{-\alpha\epsilon}\, d\epsilon = \frac{-\int_0^\infty \frac{d}{d\alpha} e^{-\alpha\epsilon}\, d\epsilon}{\int_0^\infty e^{-\alpha\epsilon}\, d\epsilon} = \frac{\int_0^\infty \epsilon e^{-\alpha\epsilon}\, d\epsilon}{\int_0^\infty e^{-\alpha\epsilon}\, d\epsilon}$$

de modo que

$$\bar{\epsilon} = -\frac{d}{d\alpha}\ln\int_0^\infty e^{-\alpha\epsilon}\, d\epsilon$$

y calculando la integral obtenemos

$$\bar{\epsilon} = -\frac{d}{d\alpha}\ln\frac{1}{\alpha} = -\alpha\frac{d\alpha^{-1}}{d\alpha} = \alpha\alpha^{-2} = \frac{1}{\alpha}$$

* Suponemos que el número de estados de energía dentro del intervalo ϵ a $\epsilon + d\epsilon$ es independiente de ϵ. Esta hipótesis es válida para un sistema compuesto por osciladores armónicos simples al cual aplicaremos la ecuación.

www.FreeLibros.me

Por consiguiente

$$\bar{\epsilon} = \epsilon_0 \tag{2–20}$$

Puede mostrarse que para un sistema formado por dos clases de elementos en equilibrio térmico a una temperatura dada, la constante ϵ_0 debe ser independiente de la naturaleza de las entidades que forman al sistema. Consideremos, entonces, un sistema que contiene un conjunto de resortes idénticos que, mediante algún proceso, intercambian energía y que se encuentran en equilibrio a la temperatura T. Supongamos que los resortes sólo pueden vibrar, alrededor de sus posiciones de relajamiento. La longitud del resorte es suficiente para describir el sistema en cualquier instante, y se dice que el sistema tiene un grado de libertad por entidad. En cualquier texto de física elemental se muestra que para un sistema de moléculas gaseosas que se mueven en equilibrio térmico a la temperatura T, la energía cinética promedio por grado de libertad es $kT/2$, donde $k = 1.38 \times 10^{-16}$ erg-grad^{-1} es la *constante de Boltzmann*. Esta es la *ley de la equipartición de la energía* y es cierta para todo sistema *clásico*. De esta manera, para nuestro sistema clásico de resortes, la energía cinética promedio de vibración de cada uno de los resortes es $kT/2$. Pero, para todo resorte en vibración, como para cualquier entidad cuya única coordenada ejecuta oscilaciones armónicas simples, la energía total promedio es el doble de la energía cinética promedio. El lector podrá mostrarlo para un péndulo simple. Por consiguiente, para uno de los resortes de nuestro sistema, la energía *total* promedio $\bar{\epsilon}$ será

$$\bar{\epsilon} = kT \tag{2–21}$$

Mediante las ecuaciones (2–20) y (2–21) encontramos

$$\epsilon_0 = kT \tag{2–22}$$

Esto determina el valor de ϵ_0, y la ecuación (2–18) toma la forma

$$P(\epsilon) = Ae^{-\epsilon/kT} \tag{2–23}$$

que es la famosa ley de la *distribución de probabilidad de Boltzmann.*

Estas ecuaciones deberán aplicarse directamente en una cavidad de cuerpo negro, ya que cada una de las entidades de este sistema tiene solamente una "coordenada" (su amplitud) que efectúa oscilaciones armónicas simples.* En el cálculo de Reyleigh y Jeans para este sistema nos interesa solamente la ecuación (2–21). Pudo ser escrita directamente a partir de la ley de la equipartición de la energía, pero necesitaremos posteriormente (2–23) y los cálculos que preceden a (2–20).

* Las ecuaciones (2–22) y (2–23) se aplican también a un sistema formado por moléculas gaseosas en movimiento; habrá necesidad de reemplazar la ecuación (2–21) por $\bar{\epsilon} = \frac{3}{2}kT$ para la energía promedio total, que en este caso es igual a la energía cinética; el 3 proviene de que la molécula tiene 3 grados translacionales de libertad. No surge inconsistencia con la ecuación (2–20), porque también será modificada: se reemplaza por $\bar{\epsilon} = \frac{3}{2}\epsilon_0$ ya que debe incluirse en (2–19) un factor proporcional a $\epsilon^{1/2}$ para tomar en cuenta el hecho de que el número de estados de energía contenidos en el intervalo definido por ϵ y $\epsilon + d\epsilon$ es proporcional a $\epsilon^{1/2}$ (véase la ecuación 12–37). El producto de este factor y $P(\epsilon)$ da la distribución de energía de Maxwell para las moléculas gaseosas, $A\epsilon^{1/2}e^{-\epsilon/kT}$.

www.FreeLibros.me

8. Comparación con el experimento

La energía por cm^3 en el intervalo de frecuencia ν y $\nu + d\nu$ del espectro del cuerpo negro a la temperatura T es precisamente el producto de la energía promedio por onda estacionaria ecuación (2–21) y el número de ondas estacionarias en el intervalo de frecuencia ecuación (2–17) dividido entre el volumen de la cavidad. Esto es

$$\rho_T(\nu)\, d\nu = \frac{8\pi\nu^2 kT}{c^3}\, d\nu \tag{2–24}$$

Para comparar con la discusión anterior, debemos expresar la densidad de energía en términos de la longitud de onda λ. Esto puede hacerse mediante la relación

$$\nu = c/\lambda$$

De este modo

$$d\nu = -\frac{c}{\lambda^2}\, d\lambda \tag{2–25}$$

Consideremos un determinado intervalo del espectro, que puede definirse en términos de la frecuencia como ν y $\nu + d\nu$, o en términos de la longitud de onda entre λ y $\lambda + d\lambda$. Se obtiene la siguiente relación para este intervalo:

$$\rho_T(\lambda)\, d\lambda = -\rho_T(\nu)\, d\nu \tag{2–26}$$

ya que ambos miembros son iguales a la energía contenida por cm^3 en ese intervalo de espectro. (El signo menos se compensa por el hecho de que, de acuerdo con la ecuación (2–25), $d\lambda$ y $d\nu$ tienen signo opuesto.) Combinando las ecuaciones (2–25) y (2–26) obtenemos

$$\rho_T(\lambda)\, d\lambda = \rho_T(\nu)\, \frac{c}{\lambda^2}\, d\lambda \tag{2–27}$$

Empleando esta relación para transformar la ecuación a la variable λ, encontramos

$$\rho_T(\lambda)\, d\lambda = \frac{8\pi k}{\lambda^5}\, \lambda T\, d\lambda \tag{2–28}$$

Esta es la distribución espectral de Rayleigh y Jeans para la radiación del cuerpo negro. Observamos que tiene la forma requerida por la ley de Wien, ecuación (2–11) ya que se puede escribir como $\rho_T(\lambda)d\lambda = f(\lambda T)/\lambda^5$, donde $f(\lambda T) = 8\pi k\lambda T$. Sin embargo, como se observa en la figura 2–11, el espectro de Rayleigh y Jeans discuerda completamente con el experimento; predice una forma equivocada para la función $f(\lambda T)$.

En el límite de longitudes de onda larga, el espectro de Rayleigh y Jeans se aproxima a los resultados experimentales. Pero a medida que $\lambda \to 0$ la teoría

www.FreeLibros.me

predice que $\rho_T(\lambda) \to \infty$, mientras que el experimento muestra que $\rho_T(\lambda)$ permanece siempre finita e igual a cero para la longitud de onda cero. El comportamiento irreal de la distribución de Rayleigh y Jeans para las longi-

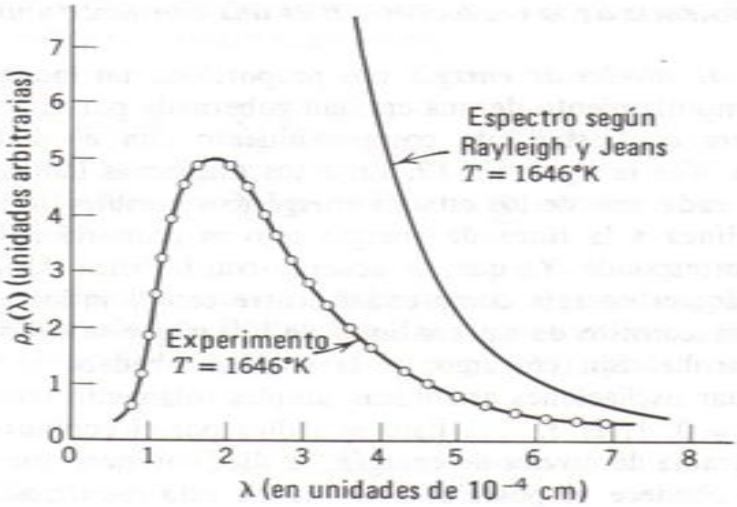

Figura 2-11. Comparación del espectro según Rayleigh y Jeans con el experimento.

tudes de onda cortas se conoce en física con la "catástrofe ultravioleta". Esta terminología sugiere la importancia del fracaso de la teoría de Rayleigh y Jeans. Calculemos la energía total por cm³ del espectro de Rayleigh y Jeans:

$$\int_0^\infty \rho_T(\lambda)\, d\lambda = 8\pi kT \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\lambda^4} = \frac{8\pi}{3}\, kT \lim_{\lambda \to 0} \left(\frac{1}{\lambda^3}\right)$$

que es infinita a menos que $T = 0$. Tenemos aquí una indicación más impresionante del fracaso total del espectro de Rayleigh y Jeans. Este espectro es, como lo hemos mencionado anteriormente, una consecuencia necesaria de las teorías de la física clásica.

9. La teoría de Planck

En 1901 Planck pudo eliminar la discrepancia entre el experimento y la teoría sólo a expensas de la introducción de un postulado que no solamente era nuevo, sino que discrepaba abiertamente con ciertos conceptos de la física clásica. El postulado de Planck puede enunciarse en la forma siguiente:

www.FreeLibros.me

Cualquier entidad física cuya única "coordenada" efectúa oscilaciones armónicas simples (esto es, que sea una función sinusoidal del tiempo), solamente puede tener una energía total ϵ que satisface la relación*

$$\epsilon = nh\nu, \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{2–29}$$

donde ν es la frecuencia de la oscilación y h es una constante universal.

Un *diagrama de niveles de energía* nos proporciona un modo conveniente de ilustrar el comportamiento de una entidad gobernada por este postulado; es también útil para contrastar este comportamiento con el predicho por la mecánica clásica. Vea la figura 2–12. En estos diagramas indicamos con una línea horizontal cada uno de los estados energéticos posibles de la entidad. La distancia de la línea a la línea de energía cero es proporcional a la energía total a la que corresponde. Ya que, de acuerdo con la física clásica, la entidad puede tener cualquier energía comprendida entre cero e infinito, el diagrama clásico de energía consiste de un continuo de líneas que se extienden a partir de cero hacia arriba. Sin embargo, si la entidad obedece el postulado de Planck, al efectuar oscilaciones armónicas simples solamente tendrá la energía total $\epsilon = nh\nu$, $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$. Esto se indica por el conjunto discreto de líneas en el diagrama de niveles de energía. Se dice entonces que la energía de un sistema que obedece el postulado de Planck está *cuantizada;* los estados permitidos de energía son los *estados cuánticos* y el entero n es el *número cuántico.*

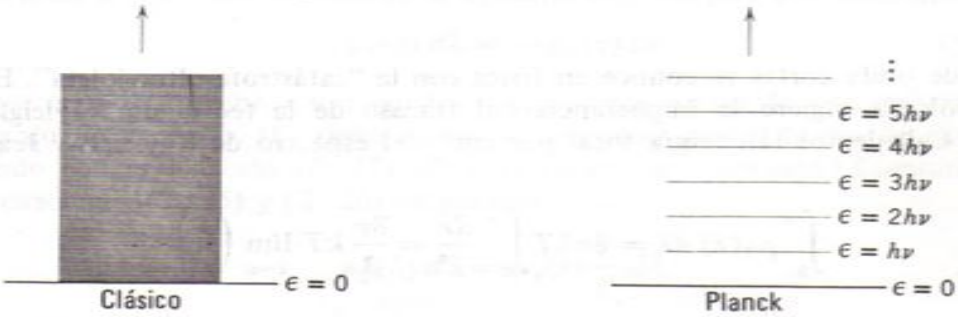

Figura 2-12. Diagramas de niveles de energía para un oscilador armónico simple clásico y un oscilador armónico simple que obedece el postulado de Planck.

Calculemos nuevamente $\rho_T(\lambda)$ bajo la hipótesis de que las ondas electromagnéticas estacionarias (cuyas amplitudes realizan, de acuerdo con la ecuación (2–13), una oscilación armónica simple de frecuencia ν) satisfacen el postulado de Planck. No será necesaria modificación alguna en el cálculo de $N(\nu)d\nu$, ya que en ningún momento fue necesario especificar la energía de las

* El término "coordenada" significa en su sentido general, cualquier cantidad que describa la condición instantánea de una entidad. Por ejemplo: la longitud de un resorte, la posición angular de un péndulo, la amplitud de una onda. En estos casos, las coordenadas son funciones sinusoidales del tiempo.

www.FreeLibros.me

ondas estacionarias. Sin embargo, en la evaluación de $\bar{\epsilon}$ entraban integrales en las que la energía de la onda estacionaria, ϵ, era la variable de integración. Esto era adecuado en el cálculo original, ya que clásicamente la energía puede tomar cualquier valor. Pero, de acuerdo con el postulado de Planck, la energía ϵ solamente puede tomar los valores discretos $\epsilon = nh\nu$ donde $n = 0, 1, 2, 3 \ldots$. Tenemos que calcular nuevamente $\bar{\epsilon}$, reemplazando las integrales sobre ϵ por sumas sobre esta variable. Entonces

$$\bar{\epsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon P(\epsilon)}{\sum_{n=0}^{\infty} P(\epsilon)} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} A\epsilon e^{-\epsilon/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} Ae^{-\epsilon/kT}} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-\alpha nh\nu}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha nh\nu}}, \qquad \alpha = \frac{1}{kT}$$

donde hemos supuesto, como lo hizo Planck, que todavía se aplica la distribución de probabilidad de Boltzmann. De manera análoga a la empleada en los cálculos que precedieron a la ecuación (2–20), podemos mostrar que se obtiene

$$\bar{\epsilon} = -\frac{d}{d\alpha} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha nh\nu}$$

Ahora

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha nh\nu} = 1 + e^{-\alpha h\nu} + e^{-2\alpha h\nu} + e^{-3\alpha h\nu} + \cdots$$

o

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha nh\nu} = 1 + x + x^2 + x^3 + \cdots$$

donde $x = e^{-\alpha h\nu}$. Pero

$$(1 - x)^{-1} = 1 + x + x^2 + x^3 + \cdots$$

Por consiguiente

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha nh\nu} = (1 - e^{-\alpha h\nu})^{-1}$$

y

$$\bar{\epsilon} = -\frac{d}{d\alpha} \ln (1 - e^{-\alpha h\nu})^{-1}$$

$$\bar{\epsilon} = -(1 - e^{-\alpha h\nu})(-1)(1 - e^{-\alpha h\nu})^{-2}[-(-h\nu)e^{-\alpha h\nu}]$$

$$\bar{\epsilon} = \frac{h\nu e^{-\alpha h\nu}}{1 - e^{-\alpha h\nu}} = \frac{h\nu}{e^{\alpha h\nu} - 1} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \tag{2–30}$$

Calculando $\rho_T(\nu)d\nu$ como se hizo anteriormente, empleando la ecuación (2–17) tenemos,

$$\rho_T(\nu)\, d\nu = \frac{\bar{\epsilon} N(\nu)\, d\nu}{a^3} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}\, d\nu \tag{2–31}$$

www.FreeLibros.me

En términos de la variable λ ecuación (2–25), obtenemos

$$\rho_T(\lambda)\,d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{e^{hc/k\lambda T}-1}\,d\lambda \qquad (2\text{–}32)$$

Esta es la distribución espectral del cuerpo negro derivada por Planck. Satisface la ley de Wien con $f(\lambda T) = 8\pi hc/(e^{hc/k\lambda T} - 1)$. Esta función contiene a la constante h, cuyo valor numérico se determina ajustando el espectro teórico a los datos experimentales. En la figura 2–13 se muestra tal ajuste. El valor de h que ajusta mejor los datos experimentales es

$$h = 6.63 \times 10^{-27}\ \text{erg-seg}$$

Esta es la llamada *constante de Planck*. La figura muestra que el espectro teórico de Planck concuerda estupendamente con el espectro experimental para $T = 1646°\text{K}$. Ya que satisface la ley de Wien, también sabemos que concordará con el experimento para cualquier otra temperatura.

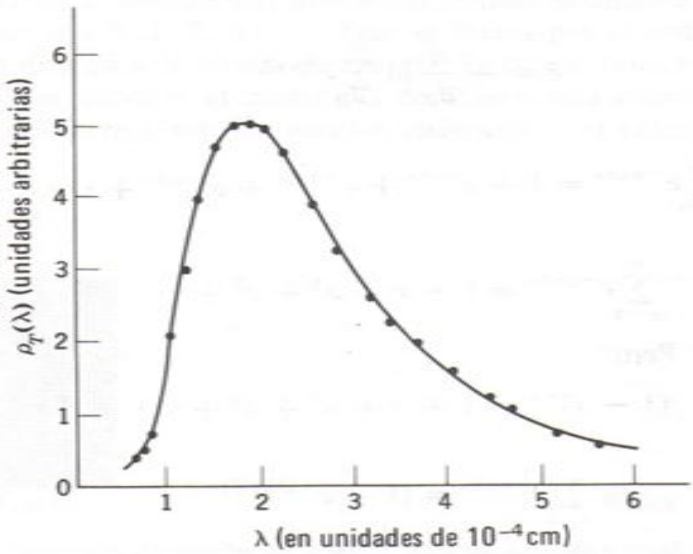

Figura 2-13. Una comparación del espectro de Planck con el experimento. Los puntos indican los resultados experimentales y la curva los teóricos. $T = 1646°\text{K}$.

10. Algunos comentarios sobre el postulado de Planck

Es conveniente explicar cualitativamente cómo el postulado de Planck, que en términos matemáticos tiene solamente el efecto de reemplazar integrales por sumas, produce un cambio notable en los resultados del cálculo. El fracaso de la teoría de Rayleigh y Jeans se debe esencialmente al aumento rápido de $N(\nu)d\nu$ a medida que ν aumenta. Ya que la ley de la equipartición de la energía requiere que $\bar{\epsilon}$ sea independiente de ν, el espectro aumentará rápida-

www.FreeLibros.me

mente al aumentar ν (o disminuir λ). El postulado de Planck tiene el efecto de poner un corte en $\bar{\epsilon}$ de modo que no obedece la ley clásica. Esto hace que el espectro permanezca acotado y que sea igual a cero para $\nu \to \infty$ (o cuando $\lambda \to 0$). Puede observarse directamente este comportamiento a partir de la ecuación (2–30). La disminución de $\bar{\epsilon}$ cuando $\nu \to \infty$ se produce de la siguiente forma: bajo el postulado de Planck, la energía de una onda estacionaria es $\epsilon = 0$, o $\epsilon = h\nu$, o $\epsilon = 2h\nu$, etc. Si consideramos la distribución de probabilidad de Boltzmann, ecuación (2–23), vemos que para una ν suficientemente grande tal que $h\nu \gg kT$, la probabilidad de que una onda estacionaria tenga una energía diferente a $\epsilon = 0$ es despreciable. En consecuencia, cuando calculamos $\bar{\epsilon}$ para una onda estacionaria cuya frecuencia ν es grande, encontramos que $\bar{\epsilon} \simeq 0$. Por otra parte, para las ondas estacionarias de baja frecuencia en las cuales $h\nu \ll kT$, los estados cuánticos se encuentran tan cercanos que se comportan como si estuvieran distribuidos continuamente, como pasa en la teoría clásica. Entonces, en el límite de frecuencias bajas, el valor que da Planck para $\bar{\epsilon}$ se aproxima al valor clásico $\bar{\epsilon} = kT$, como es claro de la ecuación (2–30).

El postulado de Planck no tuvo en su forma original el alcance que tiene en la forma que se le dio aquí. El trabajo inicial de Planck fue realizado con la teoría descrita en la sección 6, donde la energía de una componente particular de la frecuencia de la radiación del cuerpo negro se relaciona con la energía de una partícula cargada en la pared de una cavidad del cuerpo negro oscilando sinusoidalmente a la misma frecuencia, y postuló que la energía de la partícula oscilante estaba cuantizada. Después de la formulación de la teoría de Rayleigh y Jeans, quedó claro que esto es equivalente a cuantizar directamente las ondas electromagnéticas y se amplió el postulado para incluir cualquier entidad cuya única coordenada oscile sinusoidalmente. El primer paso de Planck consistió en encontrar, por tanteos, una ecuación empírica que concordase con el espectro experimental. Entonces consideró qué modificaciones eran necesarias a la teoría clásica para producir esta ecuación. Al ver la derivación de la distribución de probabilidad de Boltzmann, $P(\epsilon)$, que describimos mediante un ejemplo simple en la sección 7, fue forzado a mantener constante la cantidad que llamamos $\Delta\epsilon$ en nuestro ejemplo, en lugar de hacerla cero, como lo requiere la teoría clásica. Aunque $P(\epsilon)$ está definida solamente para valores discretos de ϵ, estos valores no cambian. Sin embargo, $\bar{\epsilon}$ cambia, como hemos visto, y su nuevo valor depende de $\Delta\epsilon$. Planck encontró que se obtiene la distribución espectral deseada si $\Delta\epsilon$ es proporcional a la frecuencia de oscilación ν. Entonces las energías posibles $\epsilon = n\,\Delta\epsilon$ son precisamente $\epsilon = nh\nu$, como se establece en su postulado.

El triunfo del postulado de Planck al conducir a la explicación teórica del espectro del cuerpo negro nos hace aceptar tentativamente su validez, a menos que se demuestre algún día que lleva a conclusiones que discuerdan con el experimento. Al lector se le habrá ocurrido que existen sistemas físicos cuyo comportamiento aparente, discuerda con este postulado. Por ejemplo, un péndulo ordinario efectúa oscilaciones armónicas simples, y aparentemente es capaz de poseer un intervalo continuo de energías. Antes que aceptemos este argumento, es prudente efectuar algunos cálculos simples respecto a este sistema. Considere un péndulo cuya lenteja pesa 1gm, colgada de un hilo de 10

www.FreeLibros.me

cm de longitud. La frecuencia de oscilación de este péndulo es de 1.6/seg y su energía depende de la amplitud de la oscilación. Suponga que la amplitud es tal que, en su posición extrema, la cuerda forma un ángulo de 0.1 radián con la vertical; su energía potencial es de 50 ergs, aproximadamente. Si la energía del péndulo está cuantizada, cualquier decremento en ésta, debida, por ejemplo, a efectos de fricción, se efectuará en saltos discontinuos, de magnitud $\Delta E = h\nu$. Esto no se observa. Pero si consideramos que $\Delta E = h\nu = 6.63 \times 10^{-27} \times 1.6 \simeq 10^{-26}$ ergs, mientras que $E \simeq 50$ ergs, es claro que aun el equipo experimental más sensible no tendría la resolución necesaria para descubrir la naturaleza discontinua en el decremento de la energía.

No existen pruebas, ni en favor ni en contra, respecto a la validez del postulado de Planck, que puedan encontrarse con experimentos efectuados con péndulos. Lo mismo es cierto de los otros sistemas mecánicos macroscópicos. Sólo si consideramos un sistema en el cual ν es grande y/o E es pequeño de modo que $h\nu$ sea del orden de E, estaremos en posibilidad de probar el postulado de Planck. Un ejemplo lo encontramos, por supuesto, en las ondas de gran frecuencia de la radiación del cuerpo negro. Consideraremos otros ejemplos en los capítulos siguientes.

BIBLIOGRAFIA

Mayer, J. E., y M. G. Mayer, *Statistical Mechanics*, John Wiley and Sons, Nueva York, 1940.

Peck, E. R., *Electricity and Magnetism*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1953.

Richtmyer, F. K., E. H. Kennard y T. Lauritsen, *Introduction to Modern Physics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

EJERCICIOS

1. Verifique (2–2) siguiendo el procedimiento sugerido inmediatamente después de esta ecuación.

2. Cuando el Sol se encuentra en el cenit, la energía térmica que incide sobre la Tierra es de 1.4×10^6 ergs-cm^{-2}-seg^{-1} aproximadamente. El diámetro solar es de 1.6×10^{11} cm, y la distancia Tierra-Sol de 1.3×10^{13} cm. Suponiendo que el Sol radia como un cuerpo negro, estime la temperatura de su superficie mediante la ecuación (2–8).

3. Repita el cálculo de la sección 7 para un sistema de seis entidades y una energía total de $6\,\Delta\epsilon$. Compare los resultados con la ecuación (2–18), como se hizo en la figura 2–10.

4. Demuestre el hecho empleado para obtener la ecuación (2–21), de que la energía total de un oscilador armónico simple es el duplo de su energía cinética promedio. Hágalo para el caso del péndulo.

5. Integre la ecuación (2–32) sobre toda λ, y muestre que la dependencia con T del resultado concuerda con la ecuación (2–8).

www.FreeLibros.me

6. Dentro de una cierta aproximación, un átomo en un cristal efectúa oscilaciones armónicas simples alrededor de su posición de equilibrio ya que posee energía de agitación térmica y experimenta una fuerza restauradora aproximadamente lineal. Use el módulo de compresibilidad de algún cristal para estimar la intensidad de la fuerza de restauración y, a partir de ella, la frecuencia de oscilación a la temperatura ambiente. De lo anterior determine un valor aproximado del número cuántico que describa el movimiento de este oscilador armónico microscópico y compárelo con el valor aproximado del número cuántico que describe el movimiento del oscilador armónico macroscópico discutido en la sección 10.

www.FreeLibros.me

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 3

Electrones y cuantos

1. Los rayos catódicos

En este capítulo trataremos dos fenómenos, el *efecto fotoeléctrico* y el *efecto Compton*, cuya interpretación fue crucial en el desarrollo de la teoría cuántica. Estos fenómenos comprenden la interacción de la radiación electromagnética con la materia —específicamente con los *electrones* que contiene. En consecuencia, primero describiremos someramente el descubrimiento del electrón y los métodos para medir cuantitativamente su carga y su masa.

La conducción de la electricidad a través de gases enrarecidos fue objeto de múltiples investigaciones durante la segunda mitad del siglo XIX. En la figura 3–1 se muestra un dispositivo experimental típico. Un alto voltaje aplicado entre el electrodo negativo, o cátodo, y el electrodo positivo, o ánodo, hace fluir una corriente a través del tubo que está lleno de algún gas (por ejemplo, aire) a baja presión. La corriente produce un vistoso patrón de capas de gas incandescente que se alternan con capas obscuras. La naturaleza exacta del patrón depende de la presión del gas, así como de su composición y del voltaje. Un conjunto de fenómenos complicados, respecto a la ionización del gas, es el responsable de la conducción de la corriente y de la luz emitida por el gas. No discutiremos aquí estos procesos. Cuando en el tubo existen

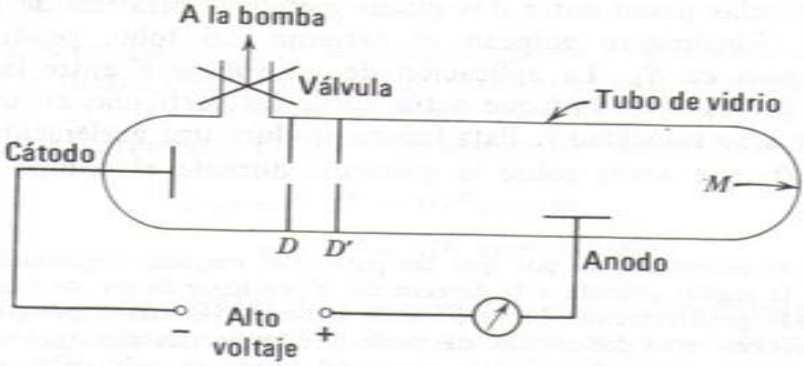

Figura 3-1. Un tubo de rayos catódicos.

www.FreeLibros.me

presiones muy bajas, aproximadamente de 0.01 mm de Hg o menos, se presenta un fenómeno bastante distinto: el gas cesa de estar incandescente (por una razón: queda muy poco gas). Sin embargo, el amperímetro señala que todavía fluye una corriente en el tubo. Otra indicación de que todavía está pasando alguna cosa en el tubo es la presencia de una mancha luminosa, M, sobre la superficie interna del vidrio en el extremo del tubo. Se observa que el tamaño de la mancha y su posición sobre la pared del tubo dependen del tamaño y la ubicación de los agujeros en los diafragmas D y D', de modo que puede inferirse que la mancha luminosa es producida por rayos de partículas que abandonan el cátodo y viajan en línea recta, incidiendo finalmente sobre la pared. Se obtienen pruebas adicionales al observar que un objeto sólido colocado a la derecha de D' proyecta una sombra nítida sobre la mancha luminosa en el extremo del tubo. Puede modificarse la posición de la mancha luminosa mediante un campo eléctrico o magnético intenso ubicado a la derecha de D', lo que muestra que las partículas emitidas por el cátodo están cargadas eléctricamente. El sentido en que la mancha se desvía indica que la carga de las partículas es negativa.* Lo anterior se confirma por un experimento en el que se coloca en S, dentro del tubo, una cámara metálica aislada; se observa que la cámara recoge cargas negativas. A estas partículas, que viajan en trayectorias rectilíneas a partir del cátodo, se les dio el nombre de *partículas de rayos catódicos* o, a veces, simplemente *rayos catódicos*. El aparato que se muestra en la figura 3–1 es un tubo de *rayos catódicos*. Actualmente se sabe que las partículas de rayos catódicos son emitidas por el cátodo al ser bombardeado por los iones positivos del gas contenido en el tubo.

2. La relación e/m para los electrones

En 1897 Thomson efectuó medidas precisas para la relación e/m, entre la carga de las partículas de rayos catódicos y su masa. Esto dio la clave para su identificación. En la figura 3–2 se muestra el aparato de Thomson. Las partículas de rayos catódicos de carga e (negativa) y masa m viajan del cátodo C hacia el ánodo A, que tiene un pequeño orificio y actúa como el primero de los dos diafragmas, D y D', los cuales confinan a las partículas en un delgado haz. Las partículas pasan entre dos placas metálicas paralelas de longitud l y separación d. Finalmente golpean el extremo del tubo, produciendo una mancha luminosa en S_1. La aplicación de un voltaje V entre las dos placas produce una fuerza $F = eV/d$ que actúa sobre las partículas en una dirección perpendicular a su velocidad v. Esta fuerza produce una aceleración transversal $a = (e/m)(V/d)$, que actúa sobre la partícula durante el tiempo l/v mientras

* El lector se asombrará de por qué las partículas cargadas negativamente viajan en línea recta en la región ubicada a la derecha de D', en lugar de ser atraídas por el ánodo que está cargado positivamente. La razón es la siguiente: la mayor parte de la caída de potencial se efectúa cerca del cátodo, de modo que las partículas cargadas se aceleran en esta región; ya que el campo eléctrico cerca del ánodo es muy débil, continúan moviéndose en línea recta, sin una desviación apreciable.

www.FreeLibros.me

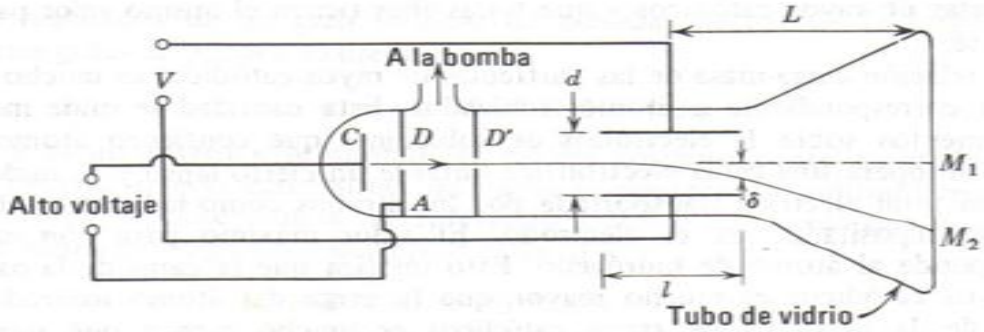

Figura 3-2. Un aparato que sirve para medir la relación e/m para los electrones.

pasa entre las placas. Al salir, su desviación transversal es $\delta = \frac{1}{2}at^2 = \frac{1}{2}(e/m)(V/d)(l/v)^2$. La desviación $\overline{M_1M_2}$ de la mancha luminosa es amplificada por un factor que, para desviaciones pequeñas, es casi exactamente $2L/l$, donde L es la distancia del centro de las placas al extremo del tubo. De este modo,

$$\overline{M_1M_2} = \frac{e}{m}\frac{V}{d}\frac{L}{l}\left(\frac{l}{v}\right)^2 \tag{3-1}$$

Si se mide $\overline{M_1M_2}$ y se conoce la velocidad de las partículas, la ecuación (3–1) permite calcular e/m.

Para determinar v, Thomson efectuó un experimento por separado, empleando una fuerza electrostática debida al voltaje V a través de las dos placas y también una fuerza magnética que resulta de la interacción de las partículas cargadas en movimiento con un campo magnético H aplicado entre las placas y en una dirección perpendicular al plano de la figura 3–2. Cuando los campos magnéticos y eléctricos están adecuadamente orientados, la fuerza eléctrica tendrá el sentido opuesto a la magnética; de hecho, para un cierto valor del campo magnético las dos fuerzas se cancelarán. Esto se presenta cuando H satisface la relación:

$$eV/d = Hev/c \tag{3-2}$$

y la mancha luminosa no sufre desviación alguna. El miembro izquierdo de la ecuación es la fuerza electrostática y el derecho es la fuerza magnética. De las ecuaciones (3–1) y (3–2) puede evaluarse e/m en términos de las cantidades medidas en el experimento. El valor corrientemente aceptado es

$$e/m = 5.27 \times 10^{17}\ \text{ues/gm}$$
$$= 1.76 \times 10^{8}\ \text{coulomb/gm}$$

Se observó que los resultados del experimento eran independientes tanto de la composición del cátodo como de la naturaleza del gas residual en el tubo. Esto muestra que el valor de e/m anotado arriba es característico de las

www.FreeLibros.me

partículas de rayos catódicos y que todas ellas tienen el mismo valor para este cociente.

La relación carga-masa de las partículas de rayos catódicos es mucho mayor que la correspondiente a átomos ionizados. Esta cantidad se mide mediante experimentos sobre la electrólisis de soluciones que contienen átomos ionizados; se opera una celda electrolítica durante un cierto lapso y se mide tanto la carga total eléctrica transportada por los átomos como la masa total de los átomos depositados en el electrodo. El valor máximo para e/m atómico corresponde al átomo de hidrógeno. Esto implica que la carga de la partícula de rayos catódicos es mucho mayor que la carga del átomo ionizado, o la masa de la partícula de rayos catódicos es mucho menor que una masa atómica.

Thomson supuso que la segunda alternativa era la correcta. Más aún, supuso que la carga de la partícula de rayos catódicos es igual en magnitud a la carga del átomo ionizado una sola vez. Esta unidad de carga recibe el nombre de *carga electrónica*. Las partículas de rayos catódicos, en la terminología moderna, son llamadas *electrones*.

3. La carga y la masa del electrón

En una serie de experimentos efectuados por Townsend y Thomson (alrededor de 1900) y por Millikan (1909) se determinó la magnitud de la carga electrónica. Se basaron en la observación de que, frecuentemente, gotas muy pequeñas de líquido atrapan cargas eléctricas. Al aplicar un voltaje V entre dos placas paralelas horizontales ubicadas por arriba y por abajo de una región que contiene gotitas cargadas, una de ellas puede ser suspendida contra la fuerza de la gravedad si

$$q\frac{V}{d} = Mg \tag{3–3}$$

donde d es la separación de las placas paralelas, q es la carga sobre la gota, M su masa y $g = 980$ cm-seg^{-2}. Para determinar M se elimina el voltaje y la gota cae bajo la acción de la gravedad, hasta que alcanza la velocidad terminal cuando el arrastre de la fricción F_v iguala la fuerza gravitacional Mg. De acuerdo con la *ley de Stokes*, $F_v = 6\pi\eta a v$, donde a es el radio de la gota, v su velocidad terminal y η es el coeficiente de viscosidad del medio (aire) en el que se mueve la gota. Cuando llega a la velocidad terminal se satisface la relación:

$$Mg = 6\pi\eta a v \tag{3–4}$$

El radio de la gota se puede expresar en términos de su masa y su densidad: $M = \frac{4}{3}\pi a^3 \rho$. Insertando esta relación en la ecuación (3–4), podemos encontrar M en términos de la velocidad terminal v, la que se mide observando con un microscopio la distancia que recorre la gota en un lapso determinado. Conocida M, de la ecuación (3–3) puede obtenerse q.

www.FreeLibros.me

Los resultados de un gran número de medidas hechas de la carga sobre diferentes gotas se pueden expresar como

$$q = n \times 4.80 \times 10^{-10} \text{ ues} \tag{3-5}$$

donde n es un entero y se anotan los valores corrientemente aceptados. Esto es, se observa que la carga sobre una gota es siempre un múltiplo entero de 4.80×10^{-10} ues. Se sugiere interpretar lo anterior aceptando que existe una unidad básica de carga cuya magnitud es igual a

$$\begin{aligned} e &= 4.80 \times 10^{-10} \text{ ues} \\ &= 1.60 \times 10^{-19} \text{ coulombs} \end{aligned}$$

ya que no se ha encontrado ninguna gota con carga menor a esta cantidad.

Thomson y sus colaboradores supusieron que la carga electrónica era igual a esta unidad básica de carga. De este modo, al conocer e/m para un electrón, podían calcular la magnitud de su masa. El valor que obtuvieron no se encontraba muy lejos del valor que actualmente es aceptado,

$$m = 9.11 \times 10^{-28} \text{ gm}$$

Existe un número enorme de pruebas que apoyan la validez de la hipótesis de que la carga electrónica es igual a 4.80×10^{-10} ues. Por ejemplo, es posible calcular la masa del electrón a partir de la ecuación

$$m = m_{H^+} \frac{(e/m)_{H^+}}{e/m} = m_{H^+} \frac{1}{1836}$$

donde $(e/m)_{H^+}$ representa la relación carga-masa para un átomo ionizado de hidrógeno y m_{H^+} su masa. Esta cantidad es igual al peso atómico químico del hidrógeno dividido entre el número de Avogadro.* Así

$$m = \frac{1.008}{6.02 \times 10^{23}} \frac{1}{1836} = 9.11 \times 10^{-28} \text{ gm}$$

Esto proporciona una verificación independiente sobre el valor de la masa electrónica determinada a partir de e/m y el valor de e, y confirma el valor que anteriormente se dio para e.

En resumen, el electrón es una partícula negativamente cargada, cuya magnitud es igual a la magnitud de la carga de un átomo simplemente ionizado y con una masa que es 1836 veces menor que la masa del átomo de hidrógeno ionizado.

4. El experimento de Bucherer

Este es un lugar apropiado para describir el trabajo de Bucherer (1909) que proporciona la primera verificación experimental de la dependencia relativista

* Despreciamos la diferencia de 0.05 por ciento entre la masa de un átomo de hidrógeno ionizado y la masa del átomo neutro.

www.FreeLibros.me

de la masa con la velocidad: $m = m_0/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ (ecuación 1–20). El experimento consistió en una serie de medidas de la relación e/m para electrones de alta velocidad. El lector recordará que la teoría de la relatividad no altera las leyes de los fenómenos electromagnéticos; la carga e de un electrón es una constante independiente de su velocidad tanto en la teoría de la relatividad como en la teoría clásica. En consecuencia, la teoría de la relatividad predice

$$\frac{e}{m} = \frac{e}{m_0}\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2} = \left(\frac{e}{m}\right)_{v/c\to 0}\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2} \tag{3–6}$$

donde $(e/m)_{v/c\to 0}$ es el valor de e/m para electrones con velocidades pequeñas comparadas con c. La cantidad $(e/m)_{v/c\to 0}$ es la que fue medida en los experimentos de Thomson, ya que la velocidad de los electrones en el tubo de rayos catódicos es muy pequeña en comparación con c. Para que la velocidad de los electrones sea comparable con c, Bucherer empleó electrones que son emitidos espontáneamente por los elementos radioactivos naturales (ver sección 2, capítulo 4). Estos electrones se emiten con un espectro continuo de velocidades que se extienden, en algunos casos, a velocidades tan grandes como $0.99c$. El aparato empleado por Bucherer fue esencialmente similar al empleado por Thomson. En primer lugar, del espectro continuo, se seleccionaban electrones con una velocidad determinada por una combinación de campos eléctricos y magnéticos. Estos electrones se desviaban en campos magnéticos y la relación e/m se determinaba a partir de la magnitud de la desviación. Los resultados del experimento, que se muestran en la figura 1–14 se encuentran en concordancia excelente con la ecuación (3–6), sobre todo el intervalo de velocidades que se investigó.

5. El efecto fotoeléctrico

En un tubo de rayos catódicos, los electrones son emitidos de un electrodo metálico (el cátodo) como consecuencia del bombardeo del electrodo por iones positivos del gas contenido en el tubo. Otro proceso por el cual se emiten electrones de la superficie de un metal fue descubierto por Hertz en 1887. En la figura 3–3 se muestra un modelo posterior de su aparato. Un tubo de vidrio contiene un electrodo de metal pulido llamado *fotocátodo*, y un segundo electrodo en la forma de placa metálica perforada. La diferencia de potencial entre los dos electrodos es de algunos voltios (normalmente el segundo electrodo es positivo respecto al fotocátodo). Se observa que fluye una corriente a través del tubo, cuando se hace pasar *luz ultravioleta* (frecuencia $\nu \sim 10^{16}$ seg^{-1}) por el segundo electrodo perforado, e incide sobre la superficie interna del fotocátodo. A este fenómeno se le llama *efecto fotoeléctrico*. El efecto persiste aun cuando en el tubo se haya reducido la presión considerablemente, lo que implica que los iones gaseosos no son los portadores de la corriente. Los experimentos en los que se aplicaba un campo magnético en la región entre el fotocátodo y el segundo electrodo indican que la corriente consistía de un flujo de partículas cargadas negativamente. El descubrimiento de Thomson sobre la existencia de los electrones sugería que las

www.FreeLibros.me

partículas cargadas negativamente en el efecto fotoeléctrico podían ser también electrones liberados del fotocátodo como resultado del bombardeo con la luz ultravioleta. Esta hipótesis fue confirmada por Lenard en 1900, quien midió la relación e/m para las partículas fotoeléctricas y mostró que su valor era igual al que se tiene para el electrón.

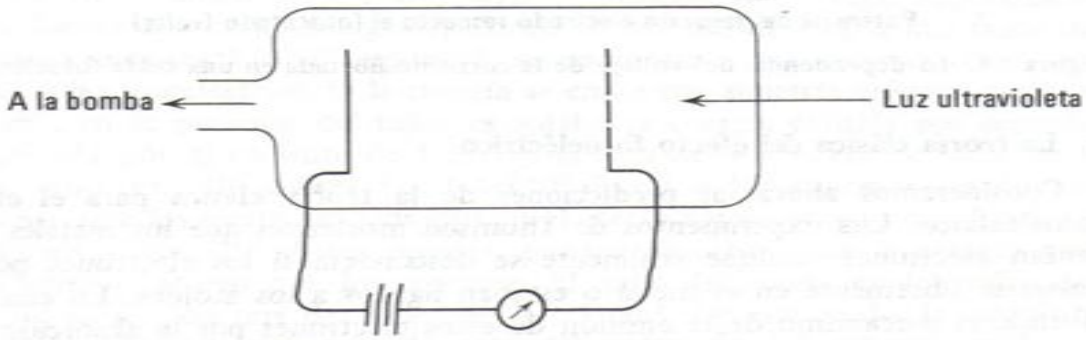

Figura 3-3. Una celda fotoeléctrica.

Los experimentos de Lenard aclararon la cuestión relativa a la identidad de las partículas fotoeléctricas, pero también mostraron que algunas propiedades del efecto fotoeléctrico eran difíciles de entender en términos de la física clásica, como veremos posteriormente. Lenard midió la corriente que llegaba al segundo electrodo como función del potencial entre este electrodo y el fotocátodo, manteniendo fijos los demás parámetros. En la figura 3–3 se representan sus datos. Una característica interesante de estos datos es que todavía llega corriente al segundo electrodo aun cuando el potencial V de ese electrodo es negativo respecto al fotocátodo. Un potencial con este signo tenderá, por supuesto, a repeler a los fotoelectrones cargados negativamente. Esto significa obviamente que los fotoelectrones son emitidos del fotocátodo con energía cinética no despreciable. La forma de la curva indica que no todos los fotoelectrones poseen la misma energía cinética; pero existe un punto extremo bien definido en $V = -V_{\text{máx}}$ que muestra la existencia de una energía máxima bien definida $E_{\text{máx}} = eV_{\text{máx}}$, donde e es la magnitud de la carga electrónica. Rápidamente se sugirió que los fotoelectrones de energía máxima eran emitidos de la superficie del fotocátodo, mientras que los fotoelectrones de energía menor provenían del interior del fotocátodo y perdían energía cinética para llegar a la superficie. Esta sugerencia implica que $E_{\text{máx}}$ es una buena medida de la energía comunicada a un electrón en el proceso fotoeléctrico. Lenard efectuó una serie de medidas, del tipo indicado en la figura 3–4, en función de la intensidad de la luz ultravioleta incidente. Encontró que la corriente fotoeléctrica para valores positivos de V (para los cuales los fotoelectrones de cualquier energía cinética llegarán al segundo electrodo) era directamente proporcional a la intensidad luminosa. Sin embargo, se observaba que el potencial de corte, $-V_{\text{máx}}$ era independiente de la intensidad luminosa. Entonces, la energía máxima adquirida por los fotoelectrones no depende de la intensidad de la luz incidente.

www.FreeLibros.me

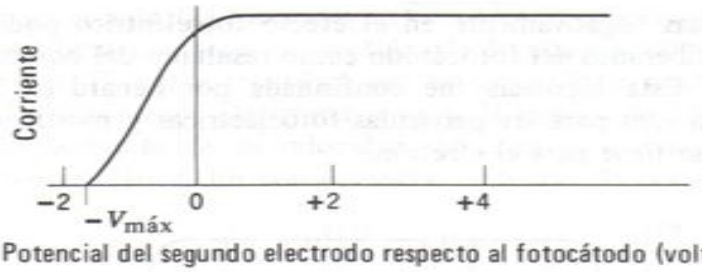

Figura 3-4. La dependencia del voltaje de la corriente liberada en una celda fotoeléctrica.

6. La teoría clásica del efecto fotoeléctrico

Consideremos ahora las predicciones de la teoría clásica para el efecto fotoeléctrico. Los experimentos de Thomson mostraron que los metales contenían electrones, aunque realmente se desconocía si los electrones podían moverse libremente en el metal o estaban ligados a los átomos. En cualquier forma, el mecanismo de la emisión de estos electrones por la absorción de la luz incidente debe incluir una interacción entre el campo eléctrico de las ondas electromagnéticas luminosas y la carga eléctrica de los electrones. El campo eléctrico oscilante que actúa sobre los electrones cargados los pondrán en vibración con una amplitud que será proporcional a la amplitud del campo eléctrico. Ahora bien, se puede mostrar fácilmente que la energía cinética promedio es proporcional al cuadrado de la amplitud de la vibración. Además, se tiene que la amplitud de un campo eléctrico oscilante es proporcional a la raíz cuadrada de la intensidad luminosa [comparar con la ecuación (2–6)]. Tenemos, entonces,

$$(\text{energía cinética promedio}) \propto (\text{amplitud de la vibración})^2 \propto (\text{amplitud del campo eléctrico})^2 \propto (\sqrt{\text{intensidad luminosa}})^2$$

Esto es, la energía cinética promedio de los electrones en vibración será proporcional a la intensidad de la luz incidente. Por esto es difícil entender por qué la energía adquirida por los electrones es independiente de la intensidad luminosa.

Un problema todavía más serio surge al tratar de explicar el efecto fotoeléctrico en términos de la teoría ondulatoria clásica de la luz ya que, de acuerdo con ella, es necesario un tiempo sumamente grande para que un electrón absorba una cantidad suficiente de energía. El problema puede ser ilustrado mediante un simple cálculo.

Para esto se requiere una estimación del radio del átomo. Este puede obtenerse a partir de la densidad macroscópica de un elemento, ρ, su peso atómico A y el número de Avogadro N. Consideremos un elemento específico, la plata, por ejemplo: $\rho \simeq 10$ gm-cm^{-3}, $A \simeq 100$ y $N \simeq 6 \times 10^{23}$ gm^{-1}. La masa de un átomo es $A/N \simeq 100/(6 \times 10^{23}$ gm). El volumen de un átomo es $V = \frac{4}{3}\pi r^3$, donde r es su radio. Suponiendo que el sólido es compacto, la densidad de éste será aproximadamente igual a la del átomo. En esta forma

$$\rho \simeq \frac{\text{masa/átomo}}{\text{volumen/átomo}} \quad \text{ó} \quad 10 \text{ gm-cm}^{-3} \simeq \frac{100/6 \times 10^{23} \text{ gm}^{-1}}{\frac{4}{3}\pi r^3}$$

www.FreeLibros.me

de donde obtenemos que $r \sim 10^{-8}$ cm. Este resultado puede confirmarse de diversas maneras. Por ejemplo, mediante un análisis, en términos de la teoría cinética de los gases, de la rapidez de difusión de un gas compuesto de átomos, se encuentra asimismo que $r \sim 10^{-8}$ cm.

Calculemos ahora el tiempo necesario para que los fotoelectrones absorban la energía $E_{\text{máx}} = eV_{\text{máx}}$ que, de acuerdo con el experimento, es del orden de 1.6×10^{-19} coulombs $\times$ 1 volt $\simeq 10^{-19}$ joules $= 10^{-12}$ ergs. Supongamos que la fuente que emite energía en forma de luz ultravioleta, a una razón de 1 watt = 1 joule-seg^{-1} = 10^7 erg-seg^{-1}, se encuentra a una distancia de 1 metro del tubo fotoeléctrico. Si la energía se emite con simetría esférica, su flujo por cm^2, en la posición del tubo, es igual a la energía emitida por segundo multiplicada por el cociente de 1 cm^2 y el área de una esfera de radio de 1 metro; esto es, 10^7 erg-seg^{-1} $\times$ $1/4\pi(10^2)^2$ cm^2 $\simeq 10^2$ erg-cm^{-2}-seg^{-1}. Supongamos que los electrones emitidos en el efecto fotoeléctrico están ligados a los átomos y que, de alguna manera, pueden absorber toda la energía que incide sobre el átomo que los contiene. El radio del átomo es del orden de 10^{-8} cm; su sección será del orden de 10^{-16} cm^2. De este modo, la cantidad de energía absorbida por segundo será del orden de 10^2 erg-cm^2-seg^{-1} $\times$ 10^{-16} cm^2 = 10^{-14} erg-seg^{-1}, aproximadamente. Si suponemos que los electrones no estuvieran ligados a los átomos, probablemente la rapidez con la cual absorberían energía sería menor. Finalmente, podemos estimar el tiempo que requiere un fotoelectrón para absorber los 10^{-12} ergs observados es de 10^2 segundos aproximadamente. Este cálculo, basado en una hipótesis característica de la teoría ondulatoria —que la energía luminosa se distribuye uniformemente sobre frentes de onda de onda esféricos cuyo centro es la fuente— predice que el retraso entre la incidencia de la luz y la emisión del primer fotoelectrón es de un minuto. Este retraso no fue observado por Lenard. Efectivamente, los experimentos efectuados en 1928 por Lawrence y Beams, que emplearon una fuente luminosa de una magnitud *más débil* por varios órdenes de magnitud que la supuesta en el cálculo anterior, pusieron un límite superior para el retardo del orden de 10^{-9} seg.

7. La teoría cuántica del efecto fotoeléctrico

En 1905 Einstein enunció una teoría cuántica para el efecto fotoeléctrico, íntimamente relacionada con la teoría cuántica de la radiación del cuerpo negro. Arguyó que el requisito impuesto por Planck de que el contenido energético de una onda electromagnética de frecuencia ν en una fuente de radiación (por ejemplo, una fuente de radiación ultravioleta) podía tener solamente los valores, 0, o $h\nu$, o $2h\nu$, . . . , o $nh\nu$, implicaba que al pasar del estado de energía $nh\nu$ al estado $(n-1)h\nu$, la fuente emitía un paquete de energía electromagnética con un contenido energético $h\nu$.

Einstein propuso que este paquete de energía está localizado inicialmente en una pequeña región del espacio; además, permanecía localizado cuando se aleja de la fuente luminosa con velocidad c, en lugar de extenderse en la forma característica de las ondas en movimiento. Además, el contenido ener-

www.FreeLibros.me

gético en tal paquete, o cuanto de energía, está relacionado con la frecuencia mediante la ecuación

$$\varepsilon = h\nu \tag{3-7}$$

Supuso también que en el proceso fotoeléctrico se absorbía completamente un cuanto por algún electrón del fotocátodo.

Este mecanismo impartiría al electrón una energía igual a $h\nu$. Si esta energía es mayor que ΔE, el electrón puede escapar de la superficie del fotocátodo. (ΔE es la energía que debe poseer un electrón para llegar a la superficie del fotocátodo más la energía W necesaria para superar las fuerzas atractivas que, como es sabido, están presentes en la superficie, ya que los electrones no escapan normalmente.) La energía cinética con la que escapan los electrones de la superficie del fotocátodo es igual a $E = h\nu - \Delta E$. Para un electrón proveniente de la superficie, ΔE sería igual a W, y E obtendría su valor máximo

$$E_{\text{máx}} = h\nu - W \tag{3-8}$$

donde W es una constante que depende solamente de la composición del fotocátodo.

De acuerdo con esta teoría, la rapidez de emisión de fotoelectrones será proporcional al flujo de cuantos incidentes sobre el fotocátodo que, a su vez, es proporcional a la intensidad de la radiación electromagnética incidente. Esto concuerda con la observación de Lenard de que la corriente fotoeléctrica es proporcional a la intensidad. Como se puede ver de la ecuación (3–8), la teoría concuerda también con la observación de que $E_{\text{máx}}$ no depende de la intensidad. Además, elimina la dificultad respecto al tiempo necesario para que los electrones reciban suficiente energía. Esta dificultad se presentó en la teoría ondulatoria, ya que la energía de la fuente se encontraba distribuida uniformemente sobre todo el frente de onda; en la teoría cuántica, la energía se encuentra concentrada en el cuanto. Después de un lapso breve, a partir del momento en que la fuente es encendida, un cuanto golpeará el fotocátodo donde será absorbido por uno de los electrones produciéndose la emisión de éste.

La teoría de Einstein, resumida en la ecuación (3–8), predice que la energía cinética máxima de los fotoelectrones debe ser una función lineal de la frecuencia de la radiación electromagnética incidente. Esta predicción fue puesta a prueba por Millikan (1916), quien midió $E_{\text{máx}}$ para la radiación en el intervalo de frecuencias de 6 a 12×10^{14} seg^{-1}. En la figura 3–5 se indica la naturaleza de sus datos. El experimento muestra que $E_{\text{máx}}$ es, efectivamente, una función lineal de la frecuencia ν. De acuerdo con la ecuación (3–8), la pendiente de la línea recta que ajusta los datos experimentales, debe ser igual a la constante de Planck, h, y su intersección con el eje ν debe ser igual a W/h. Combinando los experimentos fotoeléctricos con la teoría de Einstein, es posible determinar el valor numérico de h. El valor obtenido en esta forma concordó, con un error menor del 0.5 por ciento, con el valor determinado por un método completamente independiente, el de ajustar la teoría de Planck al espectro experimental del cuerpo negro. Este hallazgo representa un gran triunfo de las teorías cuánticas.

www.FreeLibros.me

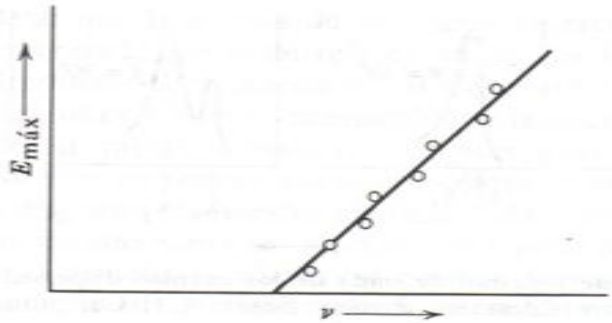

Figura 3-5. Dependencia con la frecuencia de la energía cinética máxima de los fotoelectrones.

8. El efecto Compton

En 1923 Compton descubrió que cuando un haz de rayos X de una longitud de onda λ_0 es dispersado por un ángulo θ al enviarlo a través de una lámina metálica, la radiación dispersada contiene una componente de una longitud de onda λ_1, bien definida, que es mayor que λ_0. A este fenómeno se le llama *efecto Compton.* Como veremos, proporciona pruebas convincentes de la existencia de los cuantos. Aunque no será sino hasta el capítulo 14 donde presentaremos una descripción de la producción de rayos X y la medida de su longitud de onda, es apropiado discutir ahora el efecto Compton.

Los rayos X son una radiación electromagnética de una longitud de onda menor que la luz visible por un factor del orden de 10^4. Esto se muestra mediante experimentos en los que los rayos X pueden ser difractados y polarizados de la misma manera que la luz. En el experimento de Compton la longitud de onda λ_0 de la radiación incidente era de 0.708×10^{-8} cm. Se observaba que la longitud λ_1 dependía del ángulo de dispersión θ, pero era independiente del material de la hoja metálica. En la figura 3–6 se muestran datos para $\theta = 0°, 45°, 90°$ y $135°$. Estas curvas dan el espectro de longitudes de onda de la radiación dispersa. La abscisa es la longitud de onda y la ordenada es la intensidad por unidad de longitud de onda. Se observa que, para todos los ángulos, la radiación dispersada contiene una componente cuya longitud de onda es igual a la de la radiación incidente λ_0. La razón de su presencia se discutirá en el capítulo 14. Por el momento solamente nos interesa la componente de longitud de onda λ_1. Se observa que la longitud de onda de esta componente es siempre mayor que la de la radiación incidente, y que aumenta al aumentar el ángulo de dispersión. Para 90°, $\lambda_1 - \lambda_0 = 0.024 \times 10^{-8}$ cm. En términos de la frecuencia de la radiación dispersada, $\nu_1 = c/\lambda_1$, observamos que ν_1 siempre es menor que la frecuencia de la radiación incidente ν_0 y disminuye al disminuir el ángulo de dispersión.

Lo anterior sugirió a Compton que si ν_1 es proporcional a la energía E_1 del cuanto asociado con la radiación electromagnética de esta frecuencia, la dependencia de E_1 con θ es cualitativamente semejante a la dependencia angular de la energía de una partícula que ha sido dispersada por otra

www.FreeLibros.me

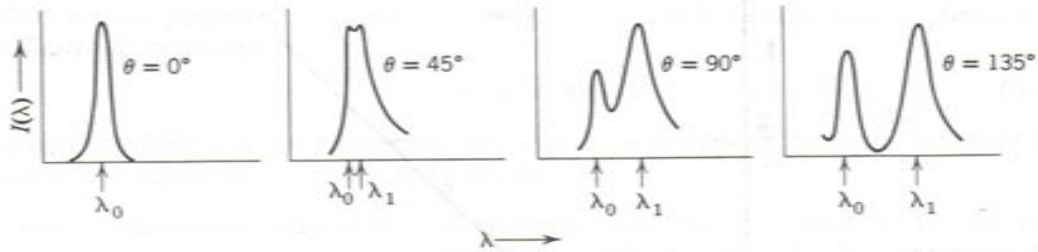

Figura 3-6. Espectro de longitud de onda de los cuantos dispersados por una lámina de carbón para diferentes ángulos. Según A. H. Compton, Phys. Rev. 22, 409 (1923).

partícula. Prosiguiendo esta idea desarrolló una teoría simple, aunque sumamente acertada.

Considere un cuanto en el haz incidente de radiación electromagnética. Para una radiación de frecuencia ν, la energía del cuanto es

$$E = h\nu \tag{3-9}$$

Tomando literalmente la idea de cuanto como un paquete localizado de energía, supongamos que sea una partícula con energía E e impulso p. Sin embargo, esta partícula deberá tener ciertas propiedades especiales. Considere las ecuaciones (1–20) y (1–24), que dan la energía total relativista de una partícula de masa en reposo m_0 con velocidad v:

$$E = m_0c^2/\sqrt{1 - v^2/c^2}$$

Puesto que la velocidad de un cuanto es igual a c y su contenido energético $E = h\nu$ es finito, su masa en reposo debe ser igual a cero. Puede considerarse que el cuanto es una partícula de masa en reposo igual a cero y que su energía total relativista E es completamente cinética. El impulso de un cuanto puede calcularse de la relación general (1–25) entre la energía total relativista E, el impulso p y la masa en reposo m_0, esto es

$$E^2 = c^2p^2 + (m_0c^2)^2$$

Para un cuanto, el segundo término del miembro derecho es igual a cero, de modo que

$$p = E/c = h\nu/c = h/\lambda \tag{3-10}$$

donde λ es la longitud de onda de la radiación electromagnética asociada con el cuanto. Es sumamente interesante observar que, de la teoría clásica de Maxwell de la radiación electromagnética, se obtiene que $p = E/c$, donde p es el impulso por unidad de volumen de la radiación electromagnética y E la densidad de energía.

Se observa que la frecuencia ν de la radiación dispersada es independiente del material de la hoja metálica. Esto implica que en la dispersión no participa el átomo completo. Compton supuso que la dispersión se debía a las colisiones entre los cuantos y los electrones individuales en la lámina que se encuentran libres e inicialmente en reposo. Puede darse una justificación *a priori* de esta

www.FreeLibros.me

hipótesis, al considerar que la energía de un cuanto de rayos X es mayor, por varios órdenes de magnitud, que la energía de un cuanto de luz ultravioleta y que, como se ve claramente de la discusión del efecto fotoeléctrico, la energía de un cuanto de luz ultravioleta es comparable a la energía con la que un electrón está ligado al metal. Considere, entonces, una colisión entre un cuanto y un electrón libre en reposo, como se muestra en la figura 3–7. En la parte izquierda del diagrama se muestra un cuanto de energía total relativista E_0 e impulso p_0 incidiendo sobre un electrón en reposo de energía de masa en reposo m_0c^2. A la derecha se muestra el cuanto, dispersado por un ángulo θ, que se mueve con una energía relativista E_1 e impulso p_1, mientras que el electrón retrocede por un ángulo ϕ con energía cinética T e impulso p. Compton aplicó en este problema la conservación del impulso y de la energía relativista total. La conservación del impulso demanda

$$p_0 = p_1 \cos\theta + p\cos\phi \tag{3–11}$$

y

$$p_1 \operatorname{sen}\theta = p \operatorname{sen}\phi \tag{3–12}$$

Al elevar al cuadrado estas expresiones obtenemos

$$(p_0 - p_1\cos\theta)^2 = p^2\cos^2\phi$$

y

$$p_1^2 \operatorname{sen}^2\theta = p^2 \operatorname{sen}^2\phi$$

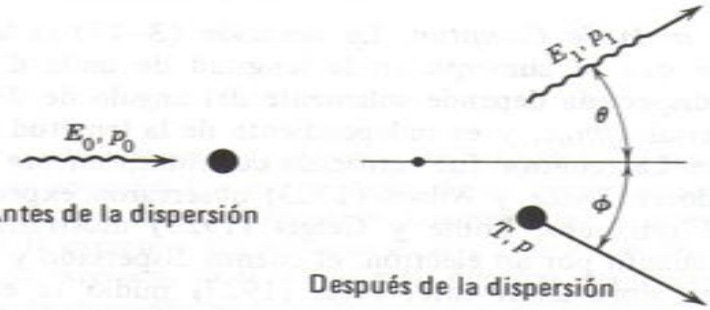

Figura 3-7. Una colisión entre un cuanto con un electrón libre estacionario.

Sumándolas encontramos

$$p_0^2 + p_1^2 - 2p_0p_1\cos\theta = p^2 \tag{3–13}$$

La conservación de la energía total relativista requiere que

$$E_0 + m_0c^2 = E_1 + T + m_0c^2 \tag{3–14}$$

de modo que

$$E_0 - E_1 = T$$

de acuerdo con la ecuación (3–10), se tiene

$$c(p_0 - p_1) = T \tag{3–15}$$

www.FreeLibros.me

y tomando en consideración las ecuaciones (1–22′) y (1–25)

$$(T + m_0c^2)^2 = c^2p^2 + (m_0c^2)^2$$

de modo que

$$T^2 + 2Tm_0c^2 = c^2p^2$$

o bien

$$T^2/c^2 + 2Tm_0 = p^2 \tag{3–16}$$

Al calcular p^2 de las ecuaciones (3–13), y T de la ecuación (3–15) obtenemos,

$$(p_0 - p_1)^2 + 2m_0c(p_0 - p_1) = p_0^2 + p_1^2 - 2p_0p_1 \cos\theta$$

lo cual se reduce a

$$m_0c(p_0 - p_1) = p_0p_1(1 - \cos\theta)$$

o bien

$$\left(\frac{1}{p_1} - \frac{1}{p_0}\right) = \frac{1}{m_0c}(1 - \cos\theta)$$

Multiplicando por h ambos miembros y usando la ecuación (3–10) se obtiene

$$\lambda_1 - \lambda_0 = \lambda_C(1 - \cos\theta) \tag{3–17}$$

donde

$$\lambda_C \equiv \frac{h}{m_0c} = 0.02426 \times 10^{-8}\,\text{cm}$$

es la *longitud de onda de Compton.* La ecuación (3–17) es la *ecuación de Compton:* predice que el aumento en la longitud de onda de la radiación electromagnética dispersada depende solamente del ángulo de dispersión y de la constante universal h/m_0c, y es independiente de la longitud de onda de la radiación incidente. La ecuación fue verificada cuantitativamente por Compton y otros investigadores. Bothe y Wilson (1923) observaron experimentalmente los electrones de retroceso; Bothe y Geiger (1925) mostraron que, en la dispersión de un cuanto por un electrón, el cuanto dispersado y el electrón de retroceso aparecen simultáneamente; Bless (1927) midió la energía de los electrones de retroceso y encontró que concordaba con las predicciones de la teoría. Estos experimentos y su interpretación teórica proporcionan una prueba más convincente de la existencia de los cuantos que la que se obtiene del efecto fotoélectrico.

9. La naturaleza dual de la radiación electromagnética

La teoría cuántica del efecto fotoeléctrico explicó un fenómeno ininteligible en términos de la teoría clásica. Sin embargo, muchos físicos se rehusaban a aceptarla, ya que representaba el reverso de la aceptada naturaleza ondulatoria de la radiación electromagnética. Después del descubrimiento y la explicación del efecto Compton, no pudo ser objetada la existencia de los cuantos. Se consideró que la física se encontraba en una situación incómoda.

www.FreeLibros.me

Por otra parte, la radiación electromagnética tiene ciertas propiedades, como la de difracción, que solamente puede ser explicada en términos del movimiento ondulatorio; otras propiedades, como las que exhiben los efectos fotoeléctricos y Compton, requerían de los cuantos para su explicación que, al encontrarse *localizados*, tenían las características esenciales a las partículas. Parece como si la radiación electromagnética tuviera una doble personalidad: una ondulatoria y otra corpuscular.

Los hechos experimentales respecto a las propiedades de la radiación electromagnética, así como su interpretación en términos de la existencia de aspectos ondulatorios y corpusculares permanecen actualmente invariables. Sin embargo, como consecuencia del amplio punto de vista introducido por el desarrollo de la mecánica cuántica, la actitud actual de los físicos, respecto a la inicial, ha cambiado considerablemente. Las pruebas sobre la dualidad partícula-onda de la radiación electromagnética no se consideran inusitados, ya que se sabe que es una característica general de todas las entidades físicas. Además, no se considera que esta dualidad represente un problema, ya que es posible conciliar la existencia de ambos aspectos con la ayuda de la mecánica cuántica. Posteriormente discutiremos con detalle esta teoría.

BIBLIOGRAFIA

Born, M., *Atomic Physics*, Blackie and Son, Londres, 1957.

Richtmyer, F. K., E. H. Kennard y T. Lauritsen, *Introduction to Modern Physics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

EJERCICIOS

1. Un cátodo calentado emite electrones con velocidades térmicas y se aceleran por una diferencia de potencial V y por la acción de un campo magnético de intensidad H perpendicular a su dirección de movimiento. Los electrones se mueven en un círculo de radio R. Derive la expresión que relacione V, H y R con e/m. Diseñe un experimento, basándose en esta expresión, en el cual se mida e/m con una precisión del 1 por ciento.

2. Demuestre la afirmación hecha en la sección 6, de que la energía cinética promedio de un sistema en vibración es proporcional al cuadrado de su amplitud de vibración. Hágalo para el caso de un péndulo.

3. Derive una expresión para la energía cinética de los electrones de retroceso en el proceso de dispersión de Compton.

4. Derive la ecuación de Compton para el caso de $\theta = 180°$, transformando al marco CM; trate ahí la colisión y transforme posteriormente al marco LAB.

5. Liste las pruebas experimentales que se mencionan en la sección 9 sobre las propiedades de la radiación electromagnética que pueden ser explicadas mediante el movimiento ondulatorio.

www.FreeLibros.me

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 4

El descubrimiento del núcleo atómico

1. El modelo atómico de Thomson

La emisión de electrones por el cátodo metálico del tubo de rayos catódicos, o el del fotoeléctrico, es un indicio de la presencia de electrones en los átomos que forman el cátodo. Entonces, es razonable suponer que esto es cierto para cualquier átomo. La hipótesis es atractiva, pues conduce a una imagen simple de un átomo positivamente ionizado, como al que se le han extraído uno o varios electrones. Lo anterior está en concordancia con la observación experimental de que la carga de un átomo ionizado una sola vez es igual, en magnitud, a la de un electrón; si está doblemente ionizado, la magnitud de su carga es igual a la de dos electrones, etc. A partir de los experimentos de Barkla (1909), entre otros, sobre la dispersión de rayos X por átomos, se obtuvieron inmediatamente pruebas adicionales de la existencia de electrones en los átomos. Aunque estos experimentos se discutirán en el capítulo 14, es conveniente mencionar ahora que proporcionaron una estimación para el valor de Z, del número de electrones en el átomo. Se encontró que Z es aproximadamente igual a $A/2$, donde A es el peso atómico químico del átomo en cuestión. En este capítulo describiremos otro grupo de experimentos que permiten determinar el número de electrones en un átomo.

Dado que en su estado normal los átomos son neutros, deben contener una carga positiva de magnitud igual a la de los electrones que normalmente contiene. De este modo, un átomo neutro tiene una carga negativa de magnitud Ze, donde e es la carga del electrón, y una carga positiva de la misma magnitud. Ya que la masa del electrón es muy pequeña en comparación con la del átomo (aun a la del más ligero), la mayor parte de la masa atómica debe estar asociada con la carga positiva.

Estas consideraciones nos conducen, de un modo natural, al problema de la distribución de las cargas positivas y negativas en el átomo. Thomson propuso una descripción tentativa, o *modelo*, de la estructura atómica, en la que los electrones, cargados negativamente, estaban colocados dentro de una distribución uniforme de carga positiva, la cual ocupa una esfera cuyo radio es del orden de 10^{-8} cm (valor aceptado en aquella época para el orden de magnitud del radio atómico). Puesto que los electrones se repelen mutuamente, deben estar uniformemente distribuidos en la esfera de carga positiva, como se ilustra

www.FreeLibros.me

en la figura 4–1. Cuando un átomo se encuentra en su estado de mínima energía, los electrones deben estar fijos en su posición de equilibrio; cuando se encuentra excitado (esto es, los átomos se hallan en un material a gran temperatura), los electrones deben vibrar alrededor de su posición de equilibrio. Ya que al acelerar un cuerpo cargado, como lo es un electrón vibrando, se emite radiación electromagnética, fue posible entender cualitativamente, en términos del modelo de Thomson, la radiación emitida por átomos excitados. Sin embargo, el cálculo del espectro de la radiación emitida indica que este modelo es incapaz de conducir a una concordancia cuantitativa con el espectro experimentalmente observado.

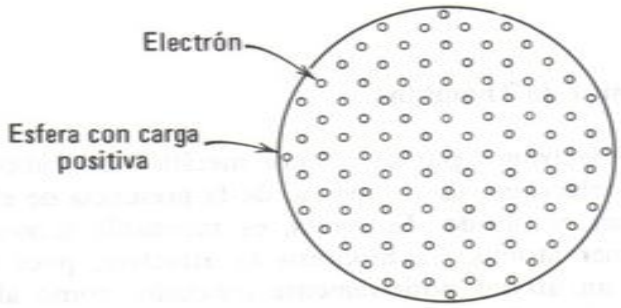

Figura 4-1. Modelo de Thomson del átomo.

La prueba concluyente de lo inadecuado del modelo de Thomson fue dada por Rutherford (1911), a partir de experimentos basados en la dispersión de *partículas alfa* por átomos. Se encontró que la carga eléctrica positiva está localizada en una región pequeña, o *núcleo*, colocada en el centro del átomo, en lugar de estar distribuida en éste. El trabajo de Rutherford es uno de los logros más importantes de la física atómica y, asimismo, marca el inicio de la física nuclear.

2. Partículas alfa

Las partículas alfa son átomos de helio doblemente ionizados, emitidos espontáneamente a grandes velocidades por átomos pesados (uranio, radio, etcétera). A reserva de discutir posteriormente este fenómeno con detalle, presentaremos por lo pronto sólo algunos puntos interesantes para describir los experimentos que condujeron a Rutherford al descubrimiento del núcleo atómico.

Entre 1896 y 1898, Becquerel y Mme. Curie descubrieron que varios de los elementos químicos más pesados emitían espontáneamente una radiación penetrante, capaz de velar una placa fotográfica. En diferentes laboratorios se estudió este tipo de *radiación*. Mediante dispositivos, como el descrito en la figura 4–2, se encontró que la radiación constaba de tres componentes distintas. En el fondo de un orificio practicado en un bloque de plomo, se coloca una substancia radioactiva. La radiación que se emite es colimada por el

www.FreeLibros.me

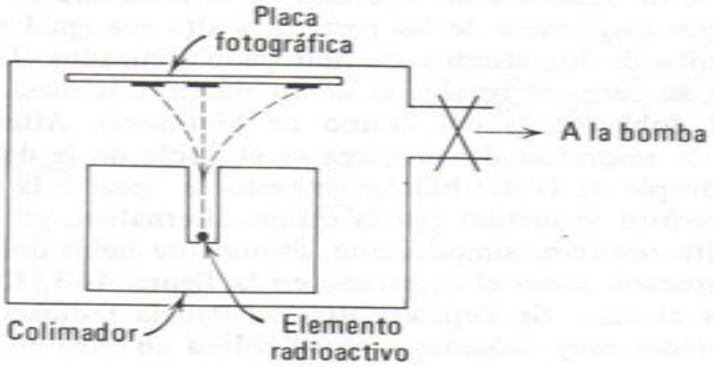

Figura 4-2. Un dispositivo empleado en el estudio de los tipos de radiación emitida por elementos radioactivos.

orificio en un haz bien definido. En ausencia de un campo magnético, la placa fotográfica que ha sido expuesta a la radiación muestra, después del revelado, una mancha obscura en un punto alineado con el orificio de colimación. Al aplicar un campo magnético entre el colimador y la placa, perpendicularmente al plano de la figura, se observan tres manchas obscuras al revelar la placa. Las dos manchas que se apartan de la obtenida en ausencia de campo magnético deben ser producidas por las partículas cargadas que han sido desviadas por el campo magnético en una dirección que depende del signo de su carga. Probablemente, la mancha que no se desvía sea producida por radiación sin carga eléctrica, sobre la que el campo magnético no tiene influencia. A las partículas que forman la componente cargada positivamente se les denomina *partículas alfa*, a las cargadas negativamente *partículas beta*, y a la componente sin carga *radiación gamma*.

En los experimentos descritos anteriormente, tanto el colimador como la placa están al vacío. Si el experimento se repite cuando hay aire dentro de la cámara a presión atmosférica, no aparece la mancha producida por las partículas alfa. Claramente sólo unos cuantos centímetros de aire bastan para detener las partículas alfa. Experimentos análogos muestran que una lámina de algún material denso, de algunos milímetros de espesor, son suficientes para impedir la llegada de las partículas beta a la placa; pero la intensidad de la mancha producida por la radiación gamma disminuye apreciablemente sólo cuando se coloca un bloque de plomo de varios centímetros de espesor entre el colimador y la placa fotográfica. Actualmente sabemos que las partículas beta son electrones de gran energía, y que la radiación gamma es de una naturaleza igual a la de la luz, aunque de una frecuencia mucho mayor.

En una serie de medidas realizadas por Rutherford, la naturaleza de las partículas alfa quedó claramente establecida. Con un aparato básicamente similar al empleado por Thomson, Rutherford midió tanto la relación carga-masa como la velocidad de las partículas alfa. Estas medidas mostraron que las partículas alfa eran emitidas con una velocidad bien definida, dentro del intervalo de 1.4×10^9 a 2.2×10^9 cm/seg, dependiendo su valor exacto del elemento radioactivo que las emite. Obsérvese que estas velocidades son

www.FreeLibros.me

aproximadamente iguales a un vigésimo de la velocidad de la luz. Se encontró que la relación carga-masa de las partículas alfa era igual a la mitad del valor correspondiente de los átomos de hidrógeno ionizados. En esta forma, si la magnitud de su carga es igual a la de un electrón, la masa de la partícula alfa resultaría el doble de la del átomo de hidrógeno. Alternativamente, si se supone que la magnitud de su carga es el doble de la del electrón, su masa sería el cuádruple de la del hidrógeno (esto es, igual a la masa del átomo de helio). Rutherford se inclinó por la última alternativa, ya que en tal caso las partículas alfa resultan, simplemente, átomos de helio doblemente ionizados.

Con un aparato como el mostrado en la figura 4–3, Rutherford confirmó que éste era el caso. Se deposita una substancia radioactiva en un tubo de vidrio de paredes muy delgadas, que se coloca en otro recipiente de vidrio; a continuación se hace el vacío. Algunas de las partículas alfa, emitidas por la substancia radioactiva, atraviesan el tubo de paredes delgadas y llegan al recipiente externo. Después de un cierto lapso, una prueba muy sensible del contenido de este recipiente mostró la presencia de una cantidad apreciable de gas helio ordinario. Se confirma, en esta forma, que las partículas alfa son átomos de helio doblemente ionizados, que, durante su paso a través del tubo, o después, han capturado dos electrones, convirtiéndose así en átomos neutros de helio.

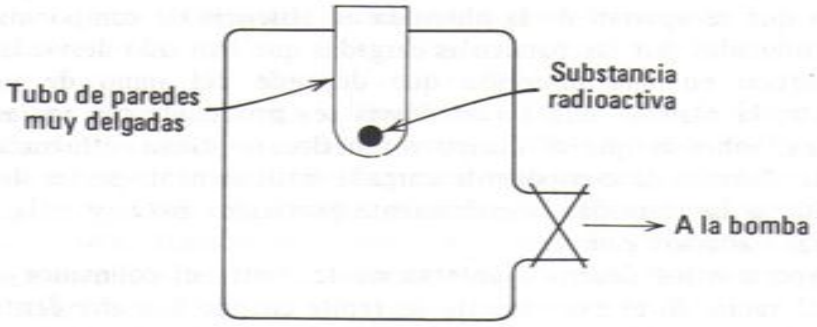

Figura 4-3. Un dispositivo empleado para mostrar que las partículas alfa son átomos de helio doblemente ionizados.

3. La dispersión de partículas alfa

Rutherford y sus colaboradores realizaron varios experimentos en el curso de un programa diseñado para determinar las propiedades de las partículas alfa y de su interacción con la materia. Con mucho, los experimentos más interesantes se refirieron a la dispersión de partículas alfa al pasar a través de láminas metálicas delgadas de diferentes substancias. En la figura 4–4 se muestra un dispositivo experimental típico. La fuente radioactiva emite partículas alfa que son colimadas por dos diafragmas en un haz angosto que incide sobre una lámina de alguna substancia, usualmente metálica. La lámina es tan delgada, que las partículas alfa pierden sólo una fracción despreciable

www.FreeLibros.me

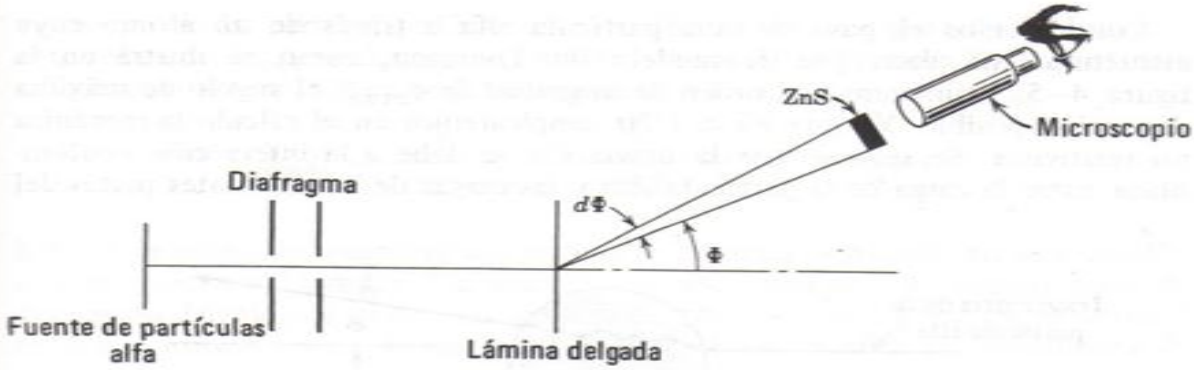

Figura 4-4. Un experimento de dispersión de partículas alfa. La región que atraviesa la partícula alfa está al vacío.

de su velocidad al atravesarla. Sin embargo, cada partícula alfa experimenta muchas desviaciones pequeñas, que son debidas a la interacción de Coulomb entre su carga y las cargas positivas y negativas de los átomos de la lámina. Por otra parte, ya que la desviación que sufre una partícula alfa al pasar cerca de un átomo, depende de los detalles de su trayectoria, la desviación total al atravesar la lámina es distinta para cada partícula del haz. De este modo, el haz que emerge del otro lado de la lámina es divergente. Para obtener una medida cuantitativa de este carácter divergente, con un contador de partículas alfa se registra el número de partículas dispersadas dentro de cada intervalo angular entre Φ y $\Phi + d\Phi$. Este contador consiste de una capa de sulfuro de cinc (ZnS), en forma cristalina, y un microscopio. Cuando aquél es golpeado por una partícula alfa se produce un pequeño destello el cual es observado con la ayuda del microscopio, pudiéndose distinguir los destellos asociados con la incidencia de *cada* partícula.* En este experimento, el observador cuenta el número de destellos luminosos por unidad de tiempo en función de la posición angular del detector.

4. Predicciones basadas en el modelo de Thomson

Suponiendo una distribución para las cargas en el átomo, puede calcularse a partir de las leyes de Coulomb y de la mecánica la desviación que sufre una partícula alfa al seguir una trayectoria determinada en el átomo. De este modo, con la distribución de carga supuesta en el modelo atómico de Thomson, pueden determinarse los resultados que se esperan para el experimento descrito anteriormente. De la discusión anterior se desprende que el cálculo no podrá describir el comportamiento de una sola partícula alfa, sino solamente el comportamiento promedio de un gran número de partículas alfa, que es precisamente lo medido experimentalmente.

* Este efecto se emplea en las carátulas de radio de los relojes de pulso. Con la ayuda de un lente, un ojo acostumbrado a la obscuridad podrá percibir los destellos luminosos individuales.

www.FreeLibros.me

Consideremos el paso de una partícula alfa a través de un átomo cuya estructura está dada por el modelo de Thomson, como se ilustra en la figura 4–5. Estimaremos el orden de magnitud de $\phi_{\text{máx}}$, el ángulo de máxima desviación posible. Ya que $v/c \simeq 1/20$, emplearemos en el cálculo la mecánica no relativista. Se supone que la desviación se debe a la interacción coulombiana entre la carga de la partícula alfa y las cargas de las diferentes partes del

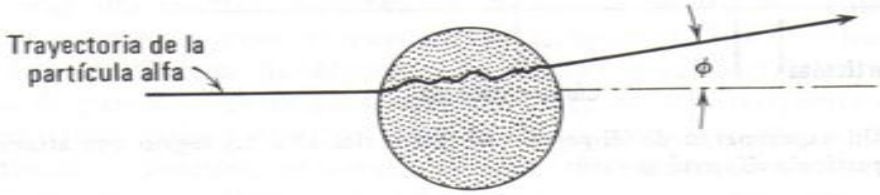

Figura 4-5. Una partícula alfa pasa a través del átomo propuesto por Thomson.

átomo. De acuerdo con la ley de Coulomb, la fuerza debida a la carga dq contenida en una región del átomo situada a una distancia r de la posición instantánea de la partícula alfa es

$$d\mathbf{F} = \frac{2e\,dq}{r^2}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) \tag{4–1}$$

donde $(\mathbf{r}/r)$ es un vector unitario dirigido de la posición de la carga dq a la posición de la partícula alfa, y $2e$ es la carga de la partícula alfa.

Calculemos, en primer lugar, el ángulo de máxima desviación producido por la interacción con los electrones del átomo. A primera vista, parecería que la ecuación (4–1) implica que los electrones darían lugar a una desviación muy grande al pasar muy cerca de alguno de ellos, ya que $d\mathbf{F} \to \infty$ cuando $r \to 0$, de modo que la partícula alfa experimentaría una fuerza muy intensa. Este no es el caso, ya que la masa de un electrón es muy pequeña en comparación con la masa de la partícula alfa. Dejamos al lector como ejercicio el demostrar que, en una colisión de un cuerpo con una masa muy grande que se mueve con velocidad v con otro de masa pequeña y en reposo, la velocidad del cuerpo ligero, después del choque, no puede ser mayor que $2v$.* Este resultado proviene sólo de la conservación del impulso y de la energía, y es independiente de la naturaleza de la fuerza entre los dos cuerpos. En consecuencia, el máximo impulso que se transfiere a un electrón de masa m es $p = m(2v)$, que debe ser igual al impulso que la partícula alfa pierde en la colisión. Entonces Δp_x, el cambio máximo en el impulso de la partícula alfa es igual a $2mv$. Para calcular el *orden de magnitud* del ángulo de máxima desviación $\phi_{\text{máx}}$, supongamos que la dirección del cambio en el impulso es perpendicular al momento

* Suponemos que la energía de amarre del electrón en el átomo es pequeña en comparación con la energía de la partícula alfa. Puede considerarse que en una colisión el electrón se encuentra esencialmente libre.

www.FreeLibros.me

inicial p de la partícula alfa, como se ilustra en la figura 4–6. Tenemos entonces que $\phi_{\text{máx}} \sim \Delta p_\alpha / p_\alpha \sim 2mv/Mv$, donde M es la masa de la partícula alfa, e igual a 4×1836 m. En consecuencia

$$\phi_{\text{máx}} \sim \frac{2m}{4(1836)m} = \frac{2}{4(1836)} \sim 10^{-4} \text{ radianes}$$

Este es el orden de magnitud del ángulo de máxima desviación en una colisión con un electrón atómico. Claramente, el valor máximo del ángulo total de desviación (debido a todas las colisiones con los electrones en el átomo) tendrá el mismo orden de magnitud, ya que es despreciable la probabilidad de que se tengan colisiones cercanas con más de uno o dos electrones.

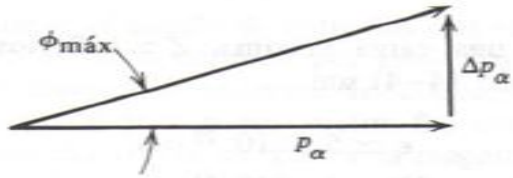

Figura 4-6. Ilustración del cálculo del ángulo de máxima desviación cuando el impulso p_α de la partícula alfa varía en Δp_α.

Para estimar $\phi_{\text{máx}}$ debida a las fuerzas producidas por la carga positiva, integramos (4–1) sobre la distribución de carga positiva para obtener la fuerza total ejercida sobre la partícula alfa en algún instante cuando se encuentra dentro del átomo. Esta es

$$\mathbf{F} = \int \frac{2e\, dq}{r^2} \left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) \tag{4–2}$$

donde r es la distancia de la partícula alfa en ese instante a la posición del elemento de volumen que contiene la carga positiva dq y $(\mathbf{r}/r)$ es un vector unitario dirigido del elemento de volumen a la posición de la partícula alfa. Es claro que en esta integral se cancelarán las contribuciones de los elementos que están colocados simétricamente respecto a la posición de la partícula alfa. Sin embargo, para calcular el orden de magnitud de la fuerza total máxima podemos ignorar esta cancelación y tomaremos

$$F_{\text{máx}} \sim \int \frac{2e}{r^2}\, dq$$

Para el orden de magnitud de esta cantidad escribimos

$$F_{\text{máx}} \sim 2e\overline{\left(\frac{1}{r^2}\right)} \int dq = 2eq\overline{\left(\frac{1}{r^2}\right)}$$

www.FreeLibros.me

donde $\overline{(1/r^2)}$ es el promedio de $1/r^2$ sobre un espacio de las dimensiones atómicas y $q = Ze$ es la carga total positiva del átomo. Ahora bien, $\overline{(1/r^2)}$ debe ser del orden de $1/R^2$, donde R es el radio del átomo. Así

$$F_{\text{máx}} \sim 2Ze^2/R^2 \tag{4–3}$$

Para estimar el ángulo de máxima desviación $\phi_{\text{máx}}$, calculamos Δp_α, el impulso impartido a la partícula alfa por la fuerza $F_{\text{máx}}$, que actúa durante el tiempo Δt de tránsito a través del átomo. Este tiempo es aproximadamente igual a R/v, donde v es la velocidad de la partícula alfa. De este modo

$$\Delta p_\alpha \sim F_{\text{máx}}\,\Delta t \sim 2Ze^2/Rv$$

y

$$\phi_{\text{máx}} \sim \Delta p_\alpha/p_\alpha \sim 2Ze^2/RMv^2 \tag{4–4}$$

Para los átomos con una carga máxima, $Z \simeq 100$; los valores de las otras cantidades de la ecuación (4–4) son

$$e \simeq 5 \times 10^{-10} \text{ ues}$$
$$M \simeq 8 \times 10^{-24} \text{ gm}$$
$$v \simeq 2 \times 10^{-9} \text{ cm/seg}$$
$$R \simeq 10^{-8} \text{ cm}$$

En consecuencia

$$\phi_{\text{máx}} \sim \frac{2 \times 10^2 \times 2 \times 10^{-19}}{10^{-8} \times 8 \times 10^{-24} \times 4 \times 10^{18}} \sim 10^{-4} \text{ radianes}$$

Observamos que la fuerza producida por la carga positiva sólo origina una desviación muy pequeña, puesto que la carga $+Ze$ está distribuida uniformemente sobre una esfera de radio $\sim 10^{-8}$ cm. Y una partícula alfa de gran velocidad nunca estará lo suficientemente cerca de una cantidad grande de carga de modo que experimente una fuerza de Coulomb de la intensidad requerida para producir una desviación grande.

Ahora que conocemos el ángulo por el que se desvía una partícula alfa al atravesar un solo átomo, veamos ahora cuál es el ángulo de desviación cuando pasa a través de un gran número de átomos que se encuentra en su paso por la lámina. Para esto hay que sumar el efecto de las desviaciones individuales; reconoceremos aquí el carácter tridimensional de cada una de ellas. En la figura 4–7 se considera un ejemplo, donde se indican las orientaciones $\mathbf{v}_j$ y $\mathbf{v}'_j$ de los vectores velocidad antes y después de haber atravesado el j-ésimo átomo, y un sistema de coordenadas en el que se describen estos vectores; la dirección del eje x de este sistema coincide con la dirección de incidencia de las partículas alfa. Puesto que en una colisión particular, el cambio en el impulso es sumamente pequeño, el ángulo que forman los vectores velocidad con el vector velocidad inicial es también pequeño y, para toda j, tanto $\mathbf{v}_j$ como $\mathbf{v}'_j$ son casi perpendiculares al plano yz. En consecuencia, la desviación se

www.FreeLibros.me

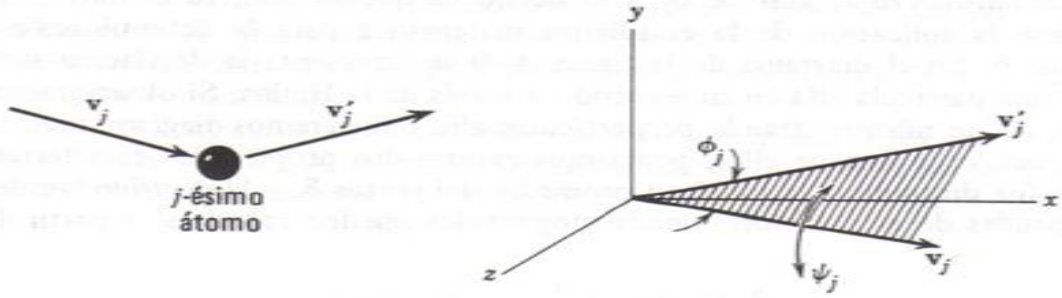

Figura 4-7. Los vectores velocidad antes y después que la partícula alfa ha atravesado el j-ésimo átomo.

puede especificar mediante el ángulo ϕ_j entre los dos vectores, y el ángulo ψ_j que forma con el eje z el plano definido por estos dos vectores. Lo anterior permite representar la desviación mediante un diagrama de dos dimensiones que consiste de los ejes y y z y un vector $\boldsymbol{\delta}_j$, como se muestra en la figura 4–8. La longitud del vector es igual a la magnitud del ángulo ϕ_j y el ángulo que forma con el eje z es igual a ψ_j. No es difícil mostrar que la orientación relativa entre el vector velocidad después de la N-ésima colisión y el vector de velocidad inicial se puede describir por el vector $\boldsymbol{\delta}$ donde

$$\boldsymbol{\delta} = \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{\delta}_j$$

Es posible presentar el proceso completo de desviación en un diagrama de dos dimensiones; en la figura 4–9 se muestra un ejemplo. El ángulo de desviación total que resulta de las N desviaciones individuales es igual a la longitud del vector $\boldsymbol{\delta}$. Salvo por las restricciones, $\phi_j < 10^{-4}$ radianes, la magnitud de los ángulos de desviación individual ϕ_j, así como la orientación de los planos de desviación especificados por ψ_j, dependen de un modo esencialmente fortuito tanto de la trayectoria exacta de la partícula a través del átomo como de la ubicación precisa de las cargas dentro del átomo cuando la partícula pasa por él. De este modo, los vectores $\boldsymbol{\delta}_j$ tendrán una distribución al azar tanto en sus direcciones como en sus longitudes, lo cual se indica en la figura.

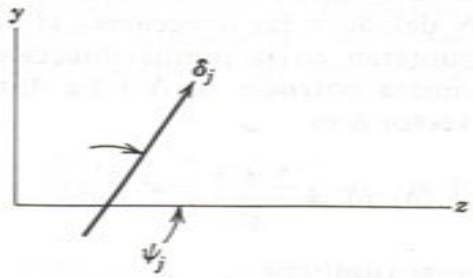

Figura 4-8. Un diagrama de dos dimensiones que representa la j-ésima desviación de una partícula alfa.

www.FreeLibros.me

La naturaleza al azar de $\boldsymbol{\delta}_j$, y el hecho de que su número es muy grande, sugiere la aplicación de la estadística matemática para la determinación del vector $\boldsymbol{\delta}$. En el diagrama de la figura 4–9 se representa la desviación sufrida por una partícula alfa en su recorrido a través de la lámina. Si observáramos el paso de un número grande de partículas alfa e hiciéramos diagramas semejantes para cada una de ellas, podríamos evaluar dos propiedades características de estos diagramas: la longitud promedio del vector $\boldsymbol{\delta}$, y la *distribución* de las longitudes de este vector. Ambas propiedades pueden calcularse a partir de la

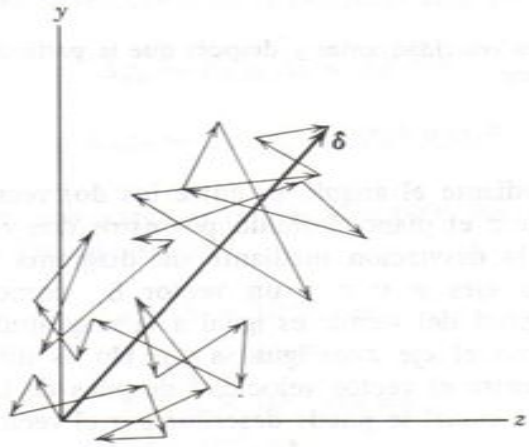

Figura 4-9. Un diagrama de dos dimensiones que representa el proceso completo de las desviaciones experimentadas por una partícula alfa al pasar a través de la lámina.

teoría estadística, lo que puede obtenerse fácilmente ya que hemos formulado el problema de tal manera que es idéntico al bien conocido problema del "camino aleatorio".*† De acuerdo con la teoría, la raíz del promedio del cuadrado de la longitud del vector de desviación neta $(\overline{\delta^2})^{1/2}$, está relacionada con el número total N de desviaciones individuales y con $(\overline{\delta_j^2})^{1/2}$, la raíz del promedio del cuadrado de la longitud del vector correspondiente a la j-ésima desviación individual, del modo siguiente:

$$(\overline{\delta^2})^{1/2} = \sqrt{N}(\overline{\delta_j^2})^{1/2}$$

Es interesante observar que la longitud media del vector $\boldsymbol{\delta}$ aumenta solamente con la raíz cuadrada de N debido a las direcciones al azar de $\boldsymbol{\delta}_j$. (Si, por el contrario, todos los $\boldsymbol{\delta}_j$ apuntaran en la misma dirección, la longitud media sería proporcional a la primera potencia de N.) La distribución teórica predicha para la longitud del vector $\boldsymbol{\delta}$ es

$$\mathcal{N}(\delta)\, d\delta = \frac{2\mathcal{N}\delta}{\overline{\delta^2}}\, e^{-\delta^2/\overline{\delta^2}}\, d\delta$$

* Consulte cualquier libro sobre estadística.

† También se le llama "caminata al azar".

www.FreeLibros.me

donde $\mathcal{N}(\delta)\,d\delta$ es el número de casos en los que la longitud del vector de desviación neta se encuentra comprendido entre δ y $\delta + d\delta$; $\overline{\delta^2}$ es el valor promedio del cuadrado de la longitud del vector de desviación y $\mathcal{N}$ el número total de casos considerados.

Ya que las longitudes de los vectores $\boldsymbol{\delta}$ y $\boldsymbol{\delta}_j$ son iguales a los ángulos de desviación neta Φ y a los de desviación individual ϕ_j, respectivamente, podemos escribir inmediatamente las ecuaciones anteriores en términos de los ángulos:

$$\mathcal{N}(\Phi)\,d\Phi = \frac{2\mathcal{N}\Phi}{\overline{\Phi^2}}\,e^{-\Phi^2/\overline{\Phi^2}}\,d\Phi \tag{4–5}$$

$$(\overline{\Phi^2})^{1/2} = \sqrt{N}(\overline{\phi_j^2})^{1/2} \tag{4–6}$$

$\mathcal{N}(\Phi)\,d\Phi$ es entonces el número de partículas alfa para las que el valor del ángulo de dispersión se encuentra entre Φ y $\Phi + d\Phi$; $\overline{\Phi^2}$ es el promedio del cuadrado del ángulo de dispersión neta; $\overline{\phi_j^2}$ es el promedio del cuadrado del ángulo en la desviación por un solo átomo; $\mathcal{N}$ el número de partículas alfa que han pasado por la lámina y N el número de átomos involucrados en la trayectoria de la partícula al atravesar la lámina. Estas ecuaciones, junto a la restricción

$$\phi_j \simeq 10^{-4} \text{ radianes} \tag{4–7}$$

de que es muy pequeño el ángulo de la desviación producida por un átomo, encierran las predicciones del modelo atómico de Thomson para la dispersión de partículas alfa al atravesar una lámina delgada.

5. Comparación con el experimento

Las predicciones anteriores fueron probadas experimentalmente por Rutherford y sus colaboradores. En un experimento clásico (Geiger y Marsden, 1909) se dispersaron partículas alfa por una lámina de Au de 10^{-4} cm de espesor. Se encontró que el promedio del ángulo de desviación era de $1° \simeq 2 \times 10^{-2}$ radianes, y que más del 99 % de las partículas alfa fueron dispersadas por ángulos menores que 3°, aproximadamente. Ahora bien, el número de átomos atravesados por la partícula alfa es aproximadamente igual al espesor de la lámina dividido entre el diámetro de un átomo, esto es, $N \simeq 10^{-4}\text{ cm}/10^{-8}\text{ cm} = 10^4$. Conociendo N y $(\overline{\Phi^2})^{1/2}$, mediante la ecuación (4–6) calcularemos el promedio del ángulo de desviación al pasar por un átomo:

$$(\overline{\phi_j^2})^{1/2} = \frac{(\overline{\Phi^2})^{1/2}}{\sqrt{N}} \simeq \frac{2 \times 10^{-2}}{10^2} = 2 \times 10^{-4} \text{ radianes}$$

lo que concuerda razonablemente con la restricción enunciada en la ecuación (4–7). Fue difícil obtener medidas precisas de $\mathcal{N}(\Phi)\,d\Phi$ a causa de lo

www.FreeLibros.me

pequeño de los ángulos involucrados. Sin embargo, los datos disponibles concordaron con la ecuación (4–5), con $\overline{(\Phi^2)}^{1/2} = 1°$, para ángulos menores que 2° ó 3°.

Por otro lado, se observó que la distribución angular del pequeño número de partículas dispersadas por ángulos mayores de 1° discordaba marcadamente con la ecuación (4–5), puesto que predice que $\mathcal{N}(\Phi)\,d\Phi$ decrecerá *muy* rápidamente al aumentar Φ. Por ejemplo, se predice que la fracción de partículas alfa dispersada por un ángulo mayor de 90° es

$$\frac{\mathcal{N}(\Phi > 90°)}{\mathcal{N}} = \frac{\int_{90°}^{180°} \mathcal{N}(\Phi)\,d\Phi}{\mathcal{N}}$$

Considerando el valor experimental de 1° para $\overline{(\Phi^2)}^{1/2}$, obtenemos un número sorprendentemente pequeño: $\mathcal{N}(\Phi > 90°)/\mathcal{N} = e^{-(90)^2} \simeq 10^{-3500}$, que contrasta con lo obtenido experimentalmente: $\mathcal{N}(\Phi > 90°)/\mathcal{N} \simeq 10^{-4}$. En general, se observó que el número de partículas alfa dispersadas por ángulos mayores que unos cuantos grados era mucho mayor que el número predicho. La existencia de una probabilidad pequeña, pero distinta de cero, para la dispersión en ángulos grandes, fue inexplicable en términos del modelo de Thomson para el átomo, que conduce solamente al proceso de *dispersión múltiple en ángulo pequeño* descrito en la sección 4.

6. El modelo atómico de Rutherford

Al variar el espesor de las láminas dispersoras se encuentra que el número de desviaciones para ángulos grandes es proporcional a N, el número de átomos atravesados por la partícula alfa. Esta dependencia sobre N es una consecuencia directa de lo pequeño de la probabilidad para que la partícula alfa sea dispersada por un ángulo grande al atravesar un átomo. Ya que no pudo ser explicado por el modelo de Thomson, Rutherford propuso otro modelo (1911).

Se propone en el modelo de Rutherford de la estructura del átomo, que toda su carga positiva, y en consecuencia, casi toda su masa, están concentradas en una pequeña región que es el núcleo.

Se supone, por razones de simetría, que el núcleo está ubicado en el centro del átomo, aunque su lugar exacto no fue de mayor importancia en el trabajo de Rutherford.

Los argumentos de la sección 4 indican la posibilidad de que un átomo de esta naturaleza produjera una dispersión por un ángulo grande cuando la partícula alfa pasara muy cerca del núcleo, siempre que las dimensiones de éste fueran suficientemente pequeñas. De la ecuación (4–4) podemos obtener una primera idea de estas dimensiones ya que, como se observa de la forma cómo se derivó, se puede emplear para estimar el ángulo de dispersión de una partícula alfa que pasa cerca (o a través) del núcleo de radio R. En el cálculo

www.FreeLibros.me

que sigue a la ecuación (4–4) obtuvimos $\phi \sim 10^{-4}$ radianes con $R \sim 10^{-8}$ cm; para obtener un ángulo mayor, $\phi \sim 1$ radián, el valor de R debe ser $\sim 10^4$ veces menor, esto es, $R \sim 10^{-12}$ cm. Como se indicará posteriormente en este capítulo, y se discutirá detalladamente en el capítulo 16, 10^{-12} cm representa una buena estimación para el radio del núcleo atómico.

7. Predicciones basadas en el modelo de Rutherford

Rutherford calculó detalladamente la distribución angular de la dispersión de partículas alfa por un átomo cuyo modelo había propuesto. El cálculo se refirió a dispersiones por ángulos mayores de varios grados. En consecuencia, se puede ignorar la dispersión producida por los electrones, como se ha discutido anteriormente; la dispersión es, entonces, ocasionada por la fuerza de Coulomb entre la partícula alfa y el núcleo, ambos cargados positivamente. En el cálculo se consideraron átomos pesados, con una masa muy superior a la de la partícula alfa, de modo que se podía despreciar el retroceso del núcleo durante la colisión. Además, la partícula alfa no penetraba en el núcleo, de modo que ambas actuaban como cargas puntuales en lo que se refiere a la fuerza de Coulomb. Veremos que todas estas hipótesis son suficientemente válidas, salvo para la dispersión de partículas alfa por los núcleos más ligeros. En el cálculo se emplea la mecánica clásica ya que $v/c \sim 1/20$.

La figura 4–10 ilustra la dispersión de una partícula de carga $+ze$ y masa M al pasar cerca de un núcleo de carga $+Ze$. El núcleo está fijo en el origen del sistema de coordenadas. Cuando la partícula se encuentra lejos del núcleo, la fuerza de Coulomb sobre ella es despreciable, y se acercará al núcleo con velocidad constante v a lo largo de una línea recta. Después de la dispersión, la partícula se alejará con velocidad constante v', también a lo largo de una línea recta. La posición de la partícula se especifica mediante la coordenada radial r y el ángulo polar θ, medido a partir de un eje paralelo a la dirección inicial del movimiento. La distancia perpendicular entre este eje y la línea sobre la que se movía inicialmente es el parámetro de impacto b. El ángulo de dispersión ϕ es igual al ángulo formado por este eje y una línea que pasa por

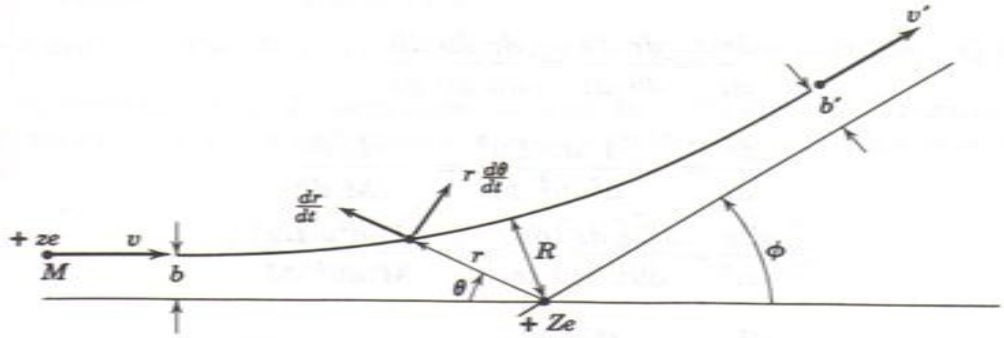

Figura 4-10. La dispersión de una partícula con carga positiva al pasar cerca de un núcleo.

www.FreeLibros.me

el origen paralela a la línea del movimiento final; la distancia entre estas dos líneas es b'. Descompondremos el vector velocidad de la partícula en cualquier punto a lo largo de su trayectoria en una componente radial dr/dt y en otra tangencial $r\,(d\theta/dt)$.

La fuerza que actúa sobre la partícula se encuentra siempre en la dirección radial. En consecuencia, su impulso angular $Mr^2(d\theta/dt)$ tiene el valor constante L, esto es

$$Mr^2\frac{d\theta}{dt} = L \tag{4–8}$$

En particular, el impulso inicial es igual al impulso final, o sea

$$Mvb = Mv'b' = L \tag{4–8'}$$

Por supuesto, la energía cinética de la partícula no permanece constante durante la dispersión. Sin embargo, ya que se ha supuesto que el núcleo permanece en reposo, la energía cinética inicial deberá ser igual a la final. De este modo,

$$\tfrac{1}{2}Mv^2 = \tfrac{1}{2}Mv'^2$$

De las dos últimas ecuaciones observamos que $v = v'$ y $b = b'$, como se ilustra en la figura 4–10.

Al aplicar la ley de Newton a la componente radial del movimiento, tenemos

$$\frac{zZe^2}{r^2} = M\left[\frac{d^2r}{dt^2} - r\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2\right] \tag{4–9}$$

El miembro izquierdo es la fuerza de Coulomb. El primer término dentro del paréntesis es la aceleración radial debida al cambio en r, y el segundo es la aceleración centrífuga. Para resolver esta ecuación, transformaremos de las coordenadas r y θ a las coordenadas u y θ, donde

$$r = 1/u \tag{4–10}$$

Entonces

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\theta}\frac{d\theta}{dt} = \frac{dr}{du}\frac{du}{d\theta}\frac{d\theta}{dt}$$

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{1}{u^2}\frac{du}{d\theta}\frac{Lu^2}{M} = -\frac{L}{M}\frac{du}{d\theta}$$

$$\frac{d^2r}{dt^2} = \frac{d}{d\theta}\left[\frac{dr}{dt}\right]\frac{d\theta}{dt} = -\frac{L}{M}\frac{d^2u}{d\theta^2}\frac{Lu^2}{M}$$

$$\frac{d^2r}{dt^2} = -\frac{L^2u^2}{M^2}\frac{d^2u}{d\theta^2}$$

www.FreeLibros.me

Substituyendo en la ecuación (4–9) tenemos

$$-\frac{L^2u^2}{M^2}\frac{d^2u}{d\theta^2}-\frac{1}{u}\left(\frac{Lu^2}{M}\right)^2=\frac{zZe^2u^2}{M}$$

$$\frac{d^2u}{d\theta^2}+u=-\frac{zZe^2M}{L^2}=-\frac{zZe^2M}{M^2v^2b^2} \tag{4–11}$$

donde la constante D, definida por

$$D\equiv\frac{zZe^2}{\frac{1}{2}Mv^2} \tag{4–12}$$

es un parámetro adecuado, igual a la distancia de máximo acercamiento al núcleo en una *colisión frontal* ($b=0$), ya que D es la distancia a la que la energía potencial zZe^2/D es igual a la energía cinética $(1/2)Mv^2$; en este punto la partícula se detendrá e invertirá el sentido de su movimiento. En términos de este parámetro podemos escribir la ecuación (4–11) como

$$d^2u/d\theta^2+u=-D/2b^2 \tag{4–13}$$

Esta es una ecuación diferencial de segundo orden (esto es, que contiene una derivada de segundo orden y ninguna otra de orden superior) de u en función de θ. La *solución general* a esta ecuación es

$$u=A\cos\theta+B\,\mathrm{sen}\,\theta-D/2b^2 \tag{4–14}$$

donde A y B son dos constantes arbitrarias. Mostraremos que la ecuación (4–14) es, ciertamente, la solución de (4–13). Tenemos

$$du/d\theta=-A\,\mathrm{sen}\,\theta+B\cos\theta$$

y

$$d^2u/d\theta^2=-A\cos\theta-B\,\mathrm{sen}\,\theta$$

Substituyendo en (4–13) se obtiene

$$-A\cos\theta-B\,\mathrm{sen}\,\theta+A\cos\theta+B\,\mathrm{sen}\,\theta-D/2b^2\equiv-D/2b^2,\quad \text{Q.E.D.}$$

Para determinar A y B demandamos que la solución (4–14) satisfaga las *condiciones iniciales:* $\theta\to 0$ cuando $r\to\infty$, y $dr/dt\to -v$ cuando $r\to\infty$. De este modo

$$u=\frac{1}{r}=0=A\cos 0+B\,\mathrm{sen}\,0-\frac{D}{2b^2}$$

ó

$$A=\frac{D}{2b^2}$$

www.FreeLibros.me

y

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{L}{M}\frac{du}{d\theta} = -v = -\frac{L}{M}(-A \operatorname{sen} 0 + B \cos 0)$$

ó

$$B = \frac{Mv}{L} = \frac{Mv}{Mvb} = \frac{1}{b}$$

En consecuencia, la *solución particular* de la ecuación diferencial para el problema presente es

$$u = \frac{D}{2b^2}\cos\theta + \frac{1}{b}\operatorname{sen}\theta - \frac{D}{2b^2}$$

ó

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{b}\operatorname{sen}\theta + \frac{D}{2b^2}(\cos\theta - 1) \tag{4–15}$$

Esta es la ecuación de una hipérbola en coordenadas polares. Observamos que la trayectoria de una partícula que se encuentra bajo la acción de una fuerza repulsiva de cuadrado inverso (fuerza de Coulomb) es una de las secciones cónicas. La trayectoria de una partícula que se mueve bajo la acción de una fuerza atractiva de este tipo (por ejemplo, un satélite en el campo gravitacional de la tierra) puede derivarse de lo dicho anteriormente invirtiendo simplemente el signo del miembro izquierdo de la ecuación (4–9); la trayectoria resultante es otra sección cónica, cuya naturaleza dependerá del valor de los parámetros.

De la ecuación (4–15) para la trayectoria de la partícula podemos evaluar el ángulo de dispersión ϕ al hacer $r \to \infty$. Entonces

$$0 = \frac{1}{b}\operatorname{sen}\theta' + \frac{D}{2b^2}(\cos\theta' - 1)$$

Una solución de esta ecuación es $\theta' = 0$: éste es el ángulo polar para r grande antes de la dispersión. La solución interesante es

$$\frac{2b}{D} = \frac{1 - \cos\theta'}{\operatorname{sen}\theta'} = \tan\frac{\theta'}{2}$$

que da el ángulo polar para r grande después de la dispersión. De la figura 4–10 se puede ver que para esta solución $\phi = \pi - \theta'$. En consecuencia

$$\tan\left(\frac{\pi - \phi}{2}\right) = \frac{2b}{D}$$

www.FreeLibros.me

lo que es equivalente a

$$\cot \frac{\phi}{2} = \frac{2b}{D} \tag{4–16}$$

Es útil calcular R, la distancia de acercamiento máximo de la partícula al centro del núcleo. De la figura 4–10 es claro que la coordenada radial tomará este valor cuando el ángulo polar es $\theta'/2 = (\pi - \phi)/2$ evaluando (4–15) para este ángulo, y empleando (4–16), obtenemos

$$R = \frac{D}{2}\left[1 + \frac{1}{\operatorname{sen}(\phi/2)}\right] \tag{4–17}$$

Puede verificarse fácilmente que $R \to D$ cuando $\phi \to \pi$, y $R \to b$ cuando $\phi \to 0$, como es de esperarse.

Cuando una partícula alfa es dispersada por un núcleo, de la ecuación (4–16) observamos que si el parámetro de impacto se encuentra entre b y $b + db$, el valor del ángulo de dispersión se encuentra entre ϕ y $\phi + d\phi$, donde la relación entre b y ϕ está dada por la ecuación (4–16). De este modo, el problema de calcular el número de partículas alfa dispersadas en el intervalo angular de ϕ a $\phi + d\phi$ al pasar por la lámina, se reduce al de calcular el número de las que inciden sobre los núcleos de la lámina con un parámetro de impacto comprendido entre b y $b + db$. El número de núcleos (esto es, el número de átomos) por cm^3 es ρ, y el espesor de la lámina es t cm; consideremos una porción de la lámina con una sección de 1 cm^2, como se muestra en la figura 4–11. Este diagrama indica un anillo con radio interno b y radio externo $b + db$, dibujado alrededor de un eje que pasa a través de cada núcleo. El área de cada anillo es $2\pi b\, db$. El número de éstos en la porción de la lámina considerada es ρt, donde t es numéricamente igual al volumen de la porción de la lámina. La probabilidad $P(b)\, db$ de que una partícula alfa pase a través de alguno de los anillos es igual al área total cubierta

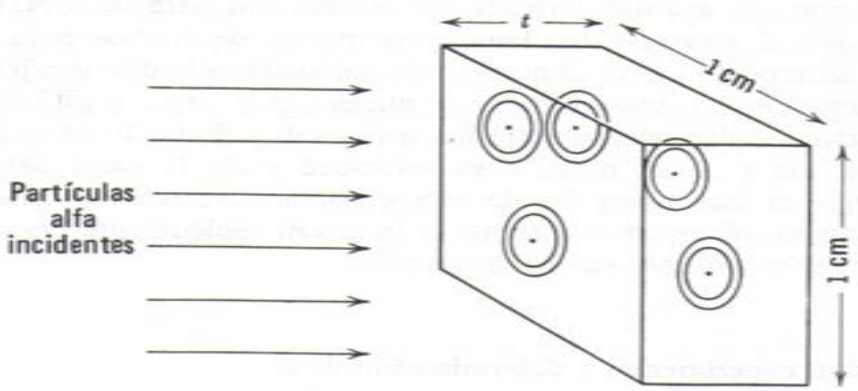

Figura 4-11. Un haz de partículas alfa que incide sobre una lámina cuya área es de 1 cm^2. En la realidad, los anillos son mucho más pequeños y mucho más numerosos.

www.FreeLibros.me

por los anillos, vista por la partícula alfa, y dividida entre el área total del segmento. Esto es

$$P(b)\,db = \rho t 2\pi b\,db$$

Ahora bien

$$b = \frac{D}{2}\cot\frac{\phi}{2}$$

de modo que

$$db = -\frac{D}{2}\frac{\frac{1}{2}d\phi}{\operatorname{sen}^2(\phi/2)}$$

y

$$b\,db = -\frac{D^2}{8}\frac{\cos(\phi/2)\,d\phi}{\operatorname{sen}^3(\phi/2)} = -\frac{D^2}{16}\frac{\operatorname{sen}\phi\,d\phi}{\operatorname{sen}^4(\phi/2)}$$

En esta forma

$$P(b)\,db = -\frac{\pi}{8}\rho t D^2 \operatorname{sen}\phi\frac{d\phi}{\operatorname{sen}^4(\phi/2)}$$

Pero $-P(b)\,db$ es igual a la probabilidad de que las partículas incidentes sean dispersadas entre los ángulos ϕ y $\phi + d\phi$. (El signo menos compensa el hecho de que db y $d\phi$ son de signo opuesto.) Empleando la notación usada en la ecuación (4–5), tenemos

$$\frac{\mathcal{N}(\Phi)\,d\Phi}{\mathcal{N}} = -P(b)\,db = \frac{\pi}{8}\rho t D^2\frac{\operatorname{sen}\Phi\,d\Phi}{\operatorname{sen}^4(\Phi/2)}$$

Substituyendo el valor de D se obtiene

$$\mathcal{N}(\Phi)\,d\Phi = \mathcal{N}\frac{\pi}{8}\rho t\left(\frac{zZe^2}{\frac{1}{2}Mv^2}\right)^2\frac{\operatorname{sen}\Phi\,d\Phi}{\operatorname{sen}^4(\Phi/2)} \qquad (4\text{–}18)$$

Esta es la distribución angular derivada por Rutherford para la dispersión de una partícula alfa al atravesar una lámina compuesta de átomos cuya estructura proponía su modelo. $\mathcal{N}$ es el número de partículas alfa que inciden sobre la lámina de espesor t y que contiene ρ núcleos por cm^3; $\mathcal{N}(\Phi)\,d\Phi$ es el número de partículas dispersadas entre los ángulos Φ y $\Phi + d\Phi$; ze es la carga de la partícula alfa y M su masa, v su velocidad y Ze la carga del núcleo puntual. Aunque el factor angular de esta ecuación decrece rápidamente al aumentar el ángulo, observamos que no lo hace tan rápidamente como en el caso de la dispersión múltiple en ángulo pequeño.

8. Comprobación experimental y determinación de Z

Algunos meses (1911) después de la derivación de la ecuación (4–18), Geiger y Marsden la sujetaron a pruebas experimentales detalladas. Investigaron los siguientes aspectos:

www.FreeLibros.me

1. Mediante el empleo de láminas de Ag y Au se probó la dependencia angular en el intervalo de 5° a 150°. Aunque $\mathcal{N}(\Phi)\,d\Phi$ varía en este intervalo por un factor de alrededor de 10^5, los datos experimentales fueron proporcionales, dentro de un porcentaje pequeño, a la distribución angular teórica.

2. Se encontró que $\mathcal{N}(\Phi)\,d\Phi$ es proporcional al espesor t, dentro de un intervalo de espesores del orden de 10, para todos los elementos que se investigaron.

3. La ecuación (4–18) predice que el número de partículas alfa dispersadas es inversamente proporcional al cuadrado de su energía cinética. Para probarlo se emplearon partículas alfa provenientes de elementos radioactivos distintos y se encontró que esta dependencia es válida para una variación en la energía por un factor de 3.

4. Finalmente, la ecuación predice que $\mathcal{N}(\Phi)\,d\Phi$ es proporcional a $(Ze)^2$, al cuadrado de la carga nuclear. En aquel entonces se desconocía el valor de Z para algunos elementos, salvo que, como se mencionó en la sección 1, a partir de experimentos de dispersión de rayos X, se había mostrado que Z era aproximadamente igual a $A/2$, donde A es el peso atómico químico del átomo. Aceptando la validez de la ecuación (4–18), podrían emplearse los datos experimentales para determinar Z, ya que se conocían las demás cantidades. Los resultados confirmaron la ley $Z \sim A/2$. Se observó que, dentro de la precisión experimental, los valores de Z eran iguales al número atómico químico de los átomos en cuestión, esto es, igual a su número de orden en la tabla periódica. Esto implica que el primer átomo, H, en la tabla periódica contiene un electrón; el segundo átomo, He, dos electrones y el tercero, Li, 3 electrones, etc, ya que Z es el número de electrones en un átomo. Esto fue confirmado poco después por la técnica de rayos X, que permiten una determinación muy precisa de Z, como se establecerá en el capítulo 14.

9. El tamaño del núcleo

Al calcular R, la distancia de máximo acercamiento, Rutherford impuso un límite al tamaño del núcleo. En la dispersión de partículas alfa del Ra ($v = 1.6 \times 10^9$ cm/seg) por Cu ($A = 63$, $Z = 29$), se observó que se cumplía la ley de dispersión de Rutherford para el máximo ángulo investigado, $\Phi = 180°$. De la ecuación (4–17) observamos que para este ángulo R toma su mínimo valor. Así

$$R_{180°} = D = \frac{zZe^2}{\frac{1}{2}Mv^2}$$

$$R_{180°} = \frac{2 \times 29 \times (4.8 \times 10^{-10})^2}{\frac{1}{2}(4 \times 1.67 \times 10^{-24}) \times (1.6 \times 10^9)^2}$$

$$R_{180°} \simeq 1.7 \times 10^{-12}\ \text{cm}$$

La derivación de Rutherford depende de la hipótesis de que la fuerza sobre la partícula alfa sea una fuerza de Coulomb entre dos cargas puntuales, lo que

www.FreeLibros.me

no sería cierto si la partícula penetrase el núcleo en su punto de máximo acercamiento. Lo anterior implica obviamente, que el radio del núcleo del Cu es $\leqslant 1.7 \times 10^{-12}$ cm.*

La ecuación anterior muestra que R disminuye al decrecer Z. Surge la pregunta: ¿cuánto decrecerá R antes de que $R <$ radio nuclear? Se observaron desviaciones para la dispersión por núcleos muy ligeros (Z pequeña). Esto se debía, en parte, a que para los núcleos ligeros no se cumplía la hipótesis de que su masa fuera grande respecto a la masa de la partícula alfa. Sin embargo, esta discrepancia persistía aún después de tomar en cuenta la masa nuclear finita.

La figura 4–12 muestra algunos datos para la dispersión de partículas alfa, con velocidades diferentes, para un ángulo fijo respecto a la lámina de Al. La ordenada es el cociente del número observado de partículas alfa dispersadas al número predicho por la teoría de Rutherford (tomando en cuenta la masa nuclear finita); la abscisa es la distancia de máximo acercamiento, calculada a partir de la ecuación (4–17). Estos datos implican que el radio del núcleo de Al es de 10^{-12} cm aproximadamente.

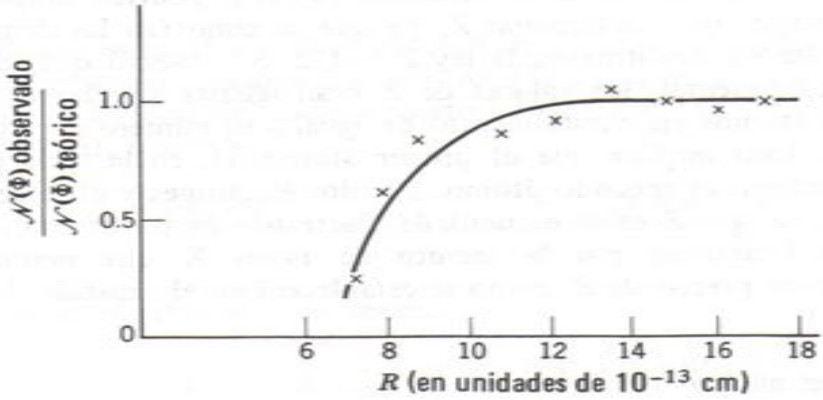

Figura 4-12. Algunos datos obtenidos en la dispersión de partículas alfa por aluminio.

10. Un problema

La verificación experimental detallada de las predicciones del modelo del núcleo atómico permiten apenas dudar de su validez. Sin embargo, presentaba un serio problema la *estabilidad* de este átomo.

Aceptando que los electrones en el átomo se encontraran en reposo, nos convencemos rápidamente de que no existe una disposición estable para los electrones que rodean al núcleo que les impida caer a éste bajo la acción de la fuerza

* Podemos concluir que es válido el empleo de la mecánica clásica en el cálculo de la distribución angular por un campo de Coulomb aun para colisiones en las que el orden de magnitud de R es 10^{-12} cm. En el capítulo 15 encontraremos que la mecánica cuántica confirma lo anterior para el caso de la fuerza de Coulomb; en otros casos, el empleo de la mecánica clásica sólo conduce a resultados aproximados para la distribución angular.

www.FreeLibros.me

de atracción de Coulomb. No podemos aceptar que el átomo sufra un colapso, puesto que entonces su radio sería del mismo orden de magnitud que el radio del núcleo, es decir, cuatro órdenes de magnitud menor que el radio del átomo.

Sin embargo, podríamos aceptar, a primera vista, que los electrones circulan simplemente alrededor del núcleo, en órbitas semejantes a la de los planetas en su movimiento alrededor del Sol. Este sistema es mecánicamente estable, ya que la fuerza centrífuga compensa la atracción de Coulomb del mismo modo que se compensa la atracción gravitacional en el sistema planetario. Surge inmediatamente una dificultad: los electrones cargados sufrirían una aceleración constante en su movimiento alrededor del núcleo y, conforme a la teoría electromagnética, radiarían energía en forma de radiación electromagnética. Esta se emitiría a expensas de la energía mecánica del electrón, que se movería en una trayectoria espiral hacia el núcleo: el átomo sufriría un colapso rápido a una región de dimensiones nucleares. Además, el espectro continuo de la radiación emitida discreparía del espectro discreto que, según sabemos, es emitido por los átomos.

BIBLIOGRAFIA

Evans, R. D., *The Atomic Nucleus*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

Rutherford, E., J. Chadwick y C. D. Ellis, *Radiations from Radioactive Substances*, Cambridge University Press, Cambridge, Inglaterra, 1930.

EJERCICIOS

1. Mediante la mecánica clásica demuestre la afirmación hecha en la sección 4, de que en una colisión de un cuerpo pesado, que se mueve inicialmente con velocidad v, con un cuerpo ligero en reposo, la velocidad de éste después de la colisión no puede ser mayor de $2v$. *Nota:* transforme al sistema CM por una transformación de Galileo, trate la colisión, y transforme nuevamente al sistema LAB.

2. Derive la ecuación (4–8) a partir de la ley de Newton.

3. Adapte los cálculos de la sección 7 al caso de una partícula que se mueve bajo la acción de una fuerza de atracción de cuadrado inverso. Discuta, entonces, el movimiento de un satélite.

4. A partir de la ecuación (4–17) verifique que $R \to D$ cuando $\phi \to \pi$, y que $R \to b$ cuando $\phi \to 0$. Explique estos resultados mediante argumentos físicos.

5. Adapte los cálculos de la sección 7 al caso de un electrón que se mueve en un átomo de hidrógeno, aceptando que irradia energía con la rapidez indicada en la ecuación (2–7), ya que se encuentra acelerado. Si inicialmente el radio de su órbita es de 10^{-8} cm, ¿cuánto tardaría con un movimiento espiral en llegar al núcleo, cuyo radio es de 10^{-12} cm?

www.FreeLibros.me

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 5

La teoría de Bohr de la estructura atómica

1. El espectro atómico

El arduo problema que ofreció la explicación de la estabilidad atómica condujo, de hecho, a la formulación de una teoría simple de la estructura del átomo. Una característica clave de esta acertada teoría, propuesta por Bohr en 1913, es la explicación del espectro de la radiación electromagnética emitida por ciertos átomos. Por este motivo y porque hemos mencionado al espectro atómico en dos ocasiones anteriormente, es necesario describir ahora algunos de los rasgos menos complejos de este espectro. Sin embargo, diferimos la discusión detallada del espectro atómico, hasta que hayamos desarrollado la teoría de la mecánica cuántica.

En la figura 5–1 se indica un dispositivo que se emplea en la medida del espectro atómico. La fuente consiste de una descarga eléctrica que atraviesa una región que contiene un gas monoatómico. En virtud de las colisiones con los electrones y de los átomos entre sí, algunos de ellos adquieren energía total que es mayor que la del átomo en su estado normal. Al regresar a ese estado normal, los átomos ceden el exceso de energía emitiendo radiación electromagnética, la cual se colima en la rendija, pasa por un prisma (o red de difracción) separándose en sus componentes espectrales y se registra en una placa fotográfica.

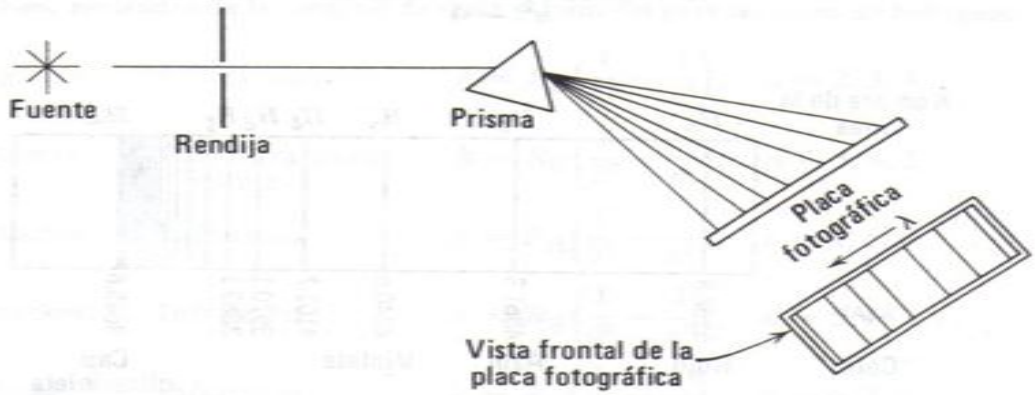

Figura 5-1. Aparato empleado en la medida del espectro atómico.

www.FreeLibros.me

En la vista frontal de la placa fotográfica se indica el espectro de la radiación electromagnética. En contraste con el espectro continuo de radiación electromagnética emitido por la superficie de los sólidos que se encuentran a una temperatura elevada, por ejemplo, *la radiación electromagnética emitida por un átomo libre consiste sólo de ciertas longitudes de onda.* Cada una de estas componentes recibe el nombre de línea, debido a la línea que produce en la placa fotográfica. Al investigar el espectro emitido por diferentes tipos de átomos, se observa que cada uno de ellos tiene su propio espectro, esto es, un conjunto característico de longitudes de onda en las que se encuentran las líneas del espectro. Este es un hecho de gran importancia práctica, porque hace de la *espectroscopia* un complemento útil a las técnicas usuales del análisis químico. Este fue el motivo principal para que se dedicara un gran esfuerzo, durante el siglo XIX, a medir con precisión el espectro atómico; esfuerzo considerable, ya que el espectro consiste de varios cientos de líneas y es, en general, sumamente complicado.

Sin embargo, el espectro del átomo de hidrógeno es relativamente sencillo. Quizás esto no es sorprendente, ya que este átomo, que contiene sólo un electrón, es el más simple. El espectro del H presenta un gran interés, no sólo porque es simple, sino por razones históricas y teóricas que exhibiremos posteriormente. En la figura 5–2 se ilustra aquella parte del espectro H que se encuentra, aproximadamente, dentro del intervalo de longitud de onda de la luz visible. La longitud de onda λ de las líneas se mide en unidades de 1 Angstrom = 1 A = 10^{-8} cm; la unidad tiene el nombre del físico que efectuó algunas de las primeras mediciones espectroscópicas precisas. Vemos que la distancia, en longitudes de onda, entre dos líneas contiguas decrece al disminuir la longitud de onda de las líneas, de modo que la *serie de líneas* converge al *límite de la serie,* que se encuentra en 3645.6 A. Difícilmente pueden observarse experimentalmente las líneas en la región de pequeñas longitudes de onda, incluyendo el límite de la serie, debido a que su separación es pequeña y se encuentran en la región ultravioleta.

La regularidad patente que ofrece el espectro del hidrógeno incitó a varias personas a buscar una fórmula empírica que representase la longitud de onda de las líneas. Balmer halló esta fórmula en 1885. La ecuación simple

$$\lambda = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad (\text{en } 10^{-8} \text{ cm}) \tag{5–1}$$

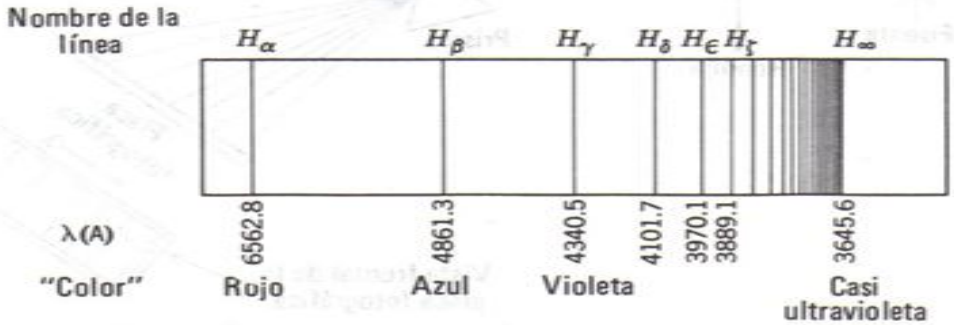

Figura 5-2. La parte visible del espectro de hidrógeno.

www.FreeLibros.me

donde $n = 3$ para H_α, $n = 4$ para H_β, $n = 5$ para H_γ, etc. predecía las longitudes de onda de las primeras nueve líneas de la serie, que ya se conocían en esa época, con una precisión mayor de 1 parte en 1000. Este descubrimiento inició la búsqueda de fórmulas empíricas semejantes aplicables a series de líneas qué a veces eran identificadas en el complicado espectro de otros elementos. Gran parte de esta tarea la hizo Rydberg (1890), quien encontró adecuado manejar el *número de onda,*

$$k \equiv 1/\lambda \tag{5–2}$$

de la línea, en lugar de su longitud de onda. En función de esta cantidad, la fórmula de Balmer queda

$$k = R_{\mathrm{H}}(1/2^2 - 1/n^2), \qquad n = 3, 4, 5, \ldots \tag{5–3}$$

donde R_{H} es la *constante de Rydberg* para el hidrógeno. A partir de datos espectroscópicos recientes, su valor está dado por

$$R_{\mathrm{H}} = 109677.576 \pm 0.012 \text{ cm}^{-1} \tag{5–4}$$

lo cual indica la precisión que se puede alcanzar en las mediciones espectroscópicas.

Se encontraron fórmulas de este tipo para diferentes series. Por ejemplo, sabemos que existen cinco series de líneas en el espectro del átomo de hidrógeno, como se muestra en la tabla 5–1. Las fórmulas para las series en los espectros de los elementos alcalinos poseen la misma estructura general:

$$k = R\left(\frac{1}{(m-a)^2} - \frac{1}{(n-b)^2}\right) \tag{5–5}$$

donde R es la constante de Rydberg para el elemento, a y b son constantes para la serie correspondiente, m es un entero que depende de la serie y n es un entero variable. El valor de la constante de Rydberg es el mismo para

TABLA 5–1

Nombres, recorridos de la longitud de onda y fórmulas para las series de hidrógeno

Lyman	Ultravioleta	$k = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 2, 3, 4, \ldots$
Balmer	Casi ultravioleta y visible	$k = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 3, 4, 5, \ldots$
Paschen	Infrarrojo	$k = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 4, 5, 6, \ldots$
Brackett	Infrarrojo	$k = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 5, 6, 7, \ldots$
Pfund	Infrarrojo	$k = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 6, 7, 8, \ldots$

www.FreeLibros.me

todos los elementos dentro de un 0.05 por ciento, y muestra un pequeño aumento sistemático al aumentar el peso atómico.

Hemos discutido el *espectro de emisión* de un átomo. Intimamente relacionado con él se encuentra el *espectro de absorción*. Puede observarse con un dispositivo semejante al que se muestra en la figura 5–1, salvo el empleo de una fuente que emite un espectro continuo y que, en algún lugar entre la fuente y el prisma, se coloca un recipiente de vidrio que contiene el gas monoatómico que se desea investigar. Se encuentra que, después de haber sido expuesta y revelada, la placa fotográfica muestra que está velada dondequiera salvo en algunas líneas: éstas corresponden a aquellas componentes de longitud de onda que han sido suprimidas del espectro continuo emitido por la fuente y que debieron absorberse en los átomos del gas en el recipiente. Se observa que a cada línea del espectro de absorción le corresponde una en el espectro de emisión del mismo elemento. La inversa no es correcta: sólo ciertas líneas de emisión se manifiestan en el espectro de absorción. En el espectro de absorción del hidrógeno aparecen normalmente sólo las líneas correspondientes a las series de Lyman; cuando el gas se encuentra a temperaturas elevadas, sobre la superficie de una estrella, por ejemplo, se observan las líneas de la serie de Balmer.

2. Los postulados de Bohr

Estas características del espectro atómico, y muchas otras más que no hemos discutido, deben ser explicadas por toda teoría de la estructura atómica. Además, la gran precisión que caracteriza las medidas espectroscópicas impone serios requerimientos sobre la precisión con la cual debe predecir el aspecto cuantitativo del espectro.

A pesar de esto, en 1913, Bohr propuso una teoría que concordaba cuantitativamente con algunos datos espectroscópicos (esto es, con el espectro del hidrógeno). Esta poseía el atractivo adicional de su simplicidad matemática, aunque no lo eran los postulados en los que se basaba. Estos fueron:

1. *En el átomo, un electrón se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo bajo la influencia de la atracción de Coulomb entre el electrón y el núcleo, y obedece las leyes de la mecánica clásica.*

2. *Pero, de la infinidad de órbitas que permite la mecánica clásica, el electrón puede moverse sólo en las que el impulso angular orbital L es un múltiplo entero de la constante de Planck, h, dividida entre 2π.*

3. *A pesar de que el electrón se encuentra constantemente sujeto a una aceleración, se mueve en una órbita permitida sin radiar energía electromagnética. Así, su energía total E permanece constante.*

4. *Un electrón emite radiación electromagnética cuando al moverse inicialmente en una órbita con energía total E_i, cambia discontinuamente su movimiento, y se mueve en una órbita de energía total E_f. La frecuencia de la radiación emitida es igual a la diferencia de energías $(E_i - E_f)$ dividida entre la constante de Planck, h.*

www.FreeLibros.me

El primer postulado de la teoría de Bohr se basa en la existencia del núcleo atómico e incorpora algunas de las ideas respecto a la estabilidad del núcleo discutidas al final del capítulo anterior. El segundo postulado introduce la cuantización. El lector observará la diferencia entre esta cuantización del *impulso angular orbital* de un electrón que se mueve bajo la influencia de una fuerza de *cuadrado inverso* (*Coulomb*),

$$L = nh/2\pi, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{5–6}$$

y la cuantización de Planck, de la *energía total* de una partícula, por ejemplo, de un electrón que efectúa un movimiento armónico simple bajo el efecto de una *fuerza de restitución armónica:* $E = nh\nu$, $n = 0, 1, 2, \ldots$. En la próxima sección veremos que la cuantización del impulso orbital angular de un electrón atómico implica la cuantización de su energía total, aunque la ecuación de cuantización difiere de la de Planck. El tercer postulado elimina el problema de la estabilidad de un electrón que se mueve en una órbita circular, debido a la radiación de energía electromagnética, como lo exige la teoría clásica, postulando simplemente que esta característica de la teoría clásica no es válida en el caso de un electrón. El postulado se basa en la *observación experimental* de que los átomos son estables, aun cuando no puede *predecirlo* la teoría clásica. El cuarto postulado,

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} \tag{5–7}$$

está íntimamente relacionado con el postulado de Einstein, ecuación (3–7), la frecuencia de un cuanto de radiación electromagnética es igual a la energía transportada por el cuanto dividida entre la constante de Planck.

Estos postulados se encargan de mezclar la física clásica con la no-clásica. Se supone que un electrón que se mueve en una órbita circular obedece la mecánica clásica y, simultáneamente, se introduce la idea no-clásica de la cuantización del impulso angular orbital; se supone que el electrón obedece una característica de la teoría electromagnética (la ley de Coulomb) y viola otra característica (la emisión de radiación por una carga acelerada). Sin embargo, no debe sorprendernos si las leyes de la física clásica, basadas en nuestra experiencia con sistemas macroscópicos, no sean completamente válidas cuando tratamos sistemas microscópicos, como es el caso del átomo.

3. La teoría de Bohr del átomo con un electrón

La justificación del postulado de Bohr, o de cualquier postulado, solamente se puede encontrar comparando las predicciones que se derivan de ellos con los resultados experimentales. En esta sección deduciremos algunas de estas predicciones y las compararemos con los datos de la sección 1.

Consideremos un átomo que conste de un núcleo de carga $+Ze$ y masa M y un electrón, de carga $-e$ y masa m. Ejemplos: un átomo de hidrógeno neutro ($Z = 1$), un átomo de helio ionizado una vez ($Z = 2$), un átomo de

www.FreeLibros.me

litio doblemente ionizado ($Z = 3$), etc. Supongamos que el electrón gira alrededor del núcleo en una órbita circular. Admitamos tentativamente que la masa del electrón es despreciable en comparación con la masa del núcleo y, en consecuencia, que el núcleo permanece fijo en el espacio. Consideremos la situación ilustrada en la figura 5–3. La condición para que el electrón sea mecánicamente estable es

$$\frac{Ze^2}{r^2} = m\frac{v^2}{r} \tag{5–8}$$

donde v es la rapidez con la que se mueve el electrón y r es el radio de la órbita circular. El miembro izquierdo de la ecuación (5–8) es la fuerza de Coulomb ejercida sobre el electrón; el miembro derecho, la centrífuga nece-

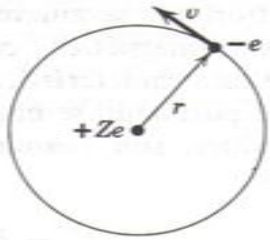

Figura 5-3. Un electrón que se mueve en una órbita circular alrededor de un núcleo fijo.

saria para mantenerlo en su órbita circular. Puesto que la fuerza sobre el electrón es central, su impulso angular debe ser una constante de movimiento. Su valor es

$$L = mvr \tag{5–9}$$

Aplicándole la condición de cuantización (5–6) tenemos

$$mvr = nh/2\pi, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

o, en términos de la cantidad

$$\hbar \equiv h/2\pi \tag{5–10}$$

$$mvr = n\hbar, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{5–11}$$

Despejando v y substituyendo en la ecuación (5–8), tenemos

$$Ze^2 = mrv^2 = mrn^2\hbar^2/m^2r^2 = n^2\hbar^2/mr$$

de manera que

$$r = n^2\hbar^2/mZe^2, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{5–12}$$

y

$$v = n\hbar mZe^2/mn^2\hbar^2 = Ze^2/n\hbar, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{5–13}$$

www.FreeLibros.me

Al aplicar la condición de cuantización del impulso angular se han restringido las posibles órbitas circulares a aquellas cuyo radio está dado por la ecuación (5–12). Observe que estos radios son proporcionales al cuadrado del número cuántico n. Calculemos el radio de la órbita menor ($n = 1$) que corresponde al átomo de hidrógeno ($Z = 1$). Insertando los valores conocidos para $\hbar$, m y e, observemos que r es $= 5.3 \times 19^{-9}$ cm. A continuación mostraremos que cuando el electrón se encuentra en la órbita $n = 1$ su energía total es mínima. En consecuencia, podemos interpretar el radio de esta órbita como una medida del radio del átomo de hidrógeno en su estado normal. Su valor concuerda razonablemente con la estimación, hecha anteriormente, de que su orden de magnitud es 10^{-8} cm. Al calcular de la ecuación (5–13) la velocidad orbital de un electrón en la órbita más pequeña, encontramos que $v = 2.2 \times 10^8$ cm/seg.* A partir de esta ecuación se ve claramente que ésta es la máxima velocidad que puede tener un electrón en el átomo de hidrógeno. En virtud de que esta velocidad es menor que el 1 por ciento de la velocidad de la luz, podemos emplear en la teoría de Bohr la mecánica clásica en lugar de la relativista. Por otra parte, la ecuación (5–13) nos indica que, para valores grandes de Z, la velocidad del electrón se aproxima a la de la luz; la teoría es inaplicable en estos casos.

Calculemos ahora la energía total de un electrón atómico que se encuentra en una de las órbitas permitidas. Si aceptamos que la energía potencial de un electrón es igual a 0 cuando el electrón se encuentra infinitamente distante del núcleo; la energía potencial para cualquier distancia finita r se puede obtener integrando la energía comunicada al electrón por la fuerza de Coulomb desde ∞ a r. De este modo

$$V = \int_{\infty}^{r} \frac{Ze^2}{r^2}\, dr = -\frac{Ze^2}{r}$$

El signo menos se debe a que la fuerza de Coulomb es atractiva. Por la ecuación (5–8) puede calcularse la energía cinética del electrón,

$$T = \tfrac{1}{2}mv^2 = Ze^2/2r$$

De este modo, su energía total es

$$E = T + V = -Ze^2/2r = -T$$

Por la ecuación (5-12), tenemos,

$$E = -Ze^2 mZe^2/2n^2\hbar^2 = -mZ^2e^4/2n^2\hbar^2, \qquad n = 1, 2, 3, 4, \ldots \qquad (5\text{-}14)$$

Entonces, la cuantización del impulso angular orbital del electrón lleva a la cuantización de la energía total. La información contenida en la ecuación (5–14) se presenta como un diagrama de niveles de energía en la figura 5–4. La energía de cada nivel, calculada a partir de (5–14), se indica a la izquierda en términos de erg y también en electrón volt (ev), unidad de

* La ecuación (5–13) explica el porqué Bohr no podía aceptar que n tomara el valor cero cosa posible en la ecuación de cuantización de Planck.

www.FreeLibros.me

energía que explicaremos en la sección 5; a la derecha de la figura se indica el número cuántico del nivel. El diagrama se construyó de modo que la distancia de un nivel al nivel de energía cero es proporcional a la energía de ese nivel. El nivel que corresponde a la energía total más baja (más negativa) corresponde al número cuántico más pequeño, $n = 1$. A medida que n aumenta, la energía total se torna menos negativa, y se aproxima a cero cuando n tiende a infinito. Ya que el estado de energía total mínima es, naturalmente, el más estable para el electrón, su estado normal en un átomo con un electrón, corresponde a $n = 1$.

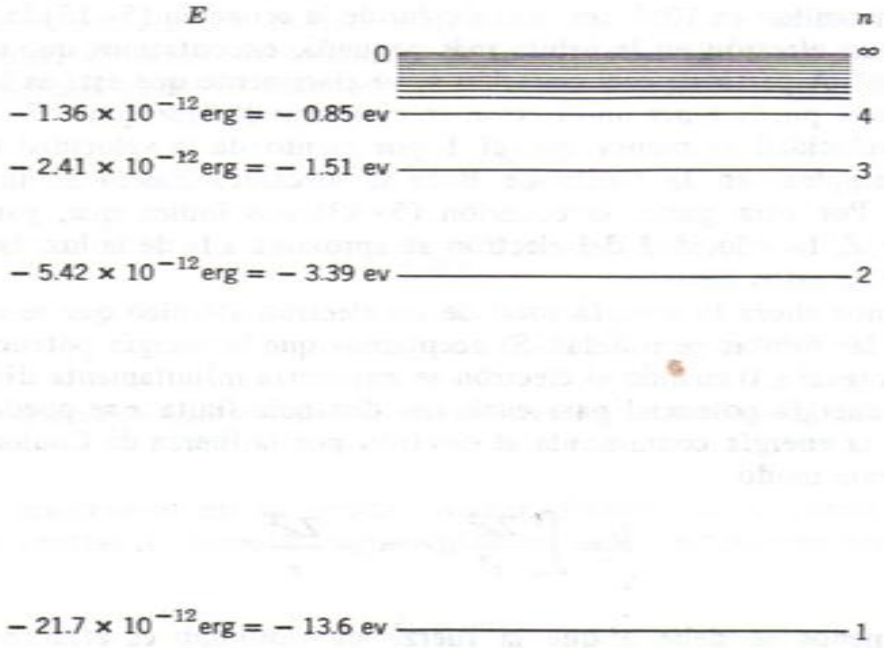

Figura 5-4. Un diagrama de niveles de energía para el átomo de hidrógeno.

Calculemos la frecuencia ν de la radiación electromagnética emitida por el electrón al pasar del estado cuántico n_i al estado cuántico n_f; esto es, cuando un electrón que se mueve en una órbita caracterizada por el número cuántico n_i cambia discontinuamente su movimiento y se empieza a mover en una órbita caracterizada por el número cuántico n_f. Por el cuarto postulado de Bohr ecuación (5–7) y la ecuación (5–14), tenemos

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} = + \frac{mZ^2e^4}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

En términos del número de onda $k = 1/\lambda = \nu/c$

$$k = \frac{me^4}{4\pi c\hbar^3} Z^2\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

www.FreeLibros.me

o sea,

$$k = R_\infty Z^2\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right), \qquad R_\infty \equiv \frac{me^4}{4\pi c\hbar^3} \tag{5–15}$$

donde n_i y n_f son números enteros.

Las ecuaciones (5–14) y (5–15) encierran las predicciones esenciales de la teoría de Bohr. Discutamos, en primer lugar, la emisión de la radiación electromagnética, por un átomo de Bohr con un electrón, en términos de estas ecuaciones.

1. El estado normal del átomo será aquél en que el electrón tiene la energía mínima, esto es, el estado $n = 1$. A éste se le da el nombre de *estado base*.

2. En una descarga eléctrica el átomo absorbe energía mediante colisiones, etcétera. Esto implica que el electrón debe efectuar una transición a un estado de energía mayor, o *estado excitado*, para el cual $n > 1$.

3. El átomo emitirá este exceso de energía, obedeciendo una tendencia común a todos los sistemas físicos, y regresará al estado base. Esto se logra mediante una serie de transiciones en las que el electrón pasa sucesivamente a estados de energía más baja y llega, finalmente, al estado base. En cada transición se emite radiación electromagnética cuyo número de onda depende de la energía perdida por el electrón, esto es, de los números cuánticos inicial y final. En un caso típico el electrón pudo haber sido excitado al estado $n = 7$ y pasó sucesivamente por los estados $n = 4$ y $n = 3$, para llegar finalmente al estado $n = 1$. En este proceso se han emitido tres líneas del espectro atómico cuyos números de onda están dados por la ecuación (5–15) para $n_i = 7$ y $n_f = 4$, $n_i = 4$ y $n_f = 3$, y $n_i = 3$ y $n_f = 1$.

4. En la infinidad de procesos de excitación y desexcitación que se efectúan durante la medida del espectro atómico, se presentan todas las transiciones posibles y se emite, en consecuencia, el espectro completo. La ecuación (5–15) da el valor de los números de onda del conjunto de líneas que forma el espectro; n_i y n_f pueden tomar cualquier valor entero siempre que $n_i > n_f$.

Consideremos, para el hidrógeno ($Z = 1$), el grupo de líneas espectrales originadas en las transiciones al estado $n_f = 2$. Los números de onda para estas líneas están dadas por la ecuación (5–15)

$$k = R_\infty(1/n_f^2 - 1/n_i^2), \qquad n_f = 2,\ n_i > n_f$$

o sea

$$k = R_\infty(1/2^2 - 1/n^2), \qquad n = 3, 4, 5, 6, \ldots$$

Esta expresión es idéntica a la fórmula para la serie de Balmer del espectro del hidrógeno (ecuación 5–3) si R_∞ es igual al R_H. Conforme con la teoría de Bohr, $R_\infty = me^4/4\pi c\hbar^3$. Aunque en aquel tiempo no se conocían exactamente el valor de algunas de las cantidades que entran en esta expresión, Bohr evaluó R_∞ en términos de ellas, encontrando una concordancia razonable con el valor

www.FreeLibros.me

experimental de R_H. En la próxima sección compararemos detalladamente, empleando valores recientes, el valor experimental de R_H con la predicción de la teoría de Bohr, y mostraremos que ambos valores concuerdan casi perfectamente.

De acuerdo con la teoría de Bohr, cada una de las cinco series entonces conocidas del espectro del hidrógeno surge de un subconjunto de transiciones en las que el electrón llega a un cierto estado final n_f: para la serie de Lyman, $n_f = 1$; para la de Balmer, $n_f = 2$; para la de Paschen, $n_f = 3$; para la de Brackett, $n_f = 4$; y para la de Pfund, $n_f = 5$. Estas series se ilustran convenientemente en el diagrama de niveles de energía de la figura 5–5. Mediante una flecha que va del estado cuántico inicial n_i al estado final n_f se indica la transición que produce una línea determinada de la serie. Sólo se han dibujado las flechas que corresponden a las primeras líneas de cada serie. Puesto que en este diagrama la distancia entre dos niveles de energía es proporcional a la diferencia entre sus energías, y debido a que la frecuencia ν o el número de onda k es proporcional a esta diferencia (ecuación 5–7), la longitud de una flecha cualquiera es proporcional a la frecuencia o al número de onda de la línea espectral correspondiente.

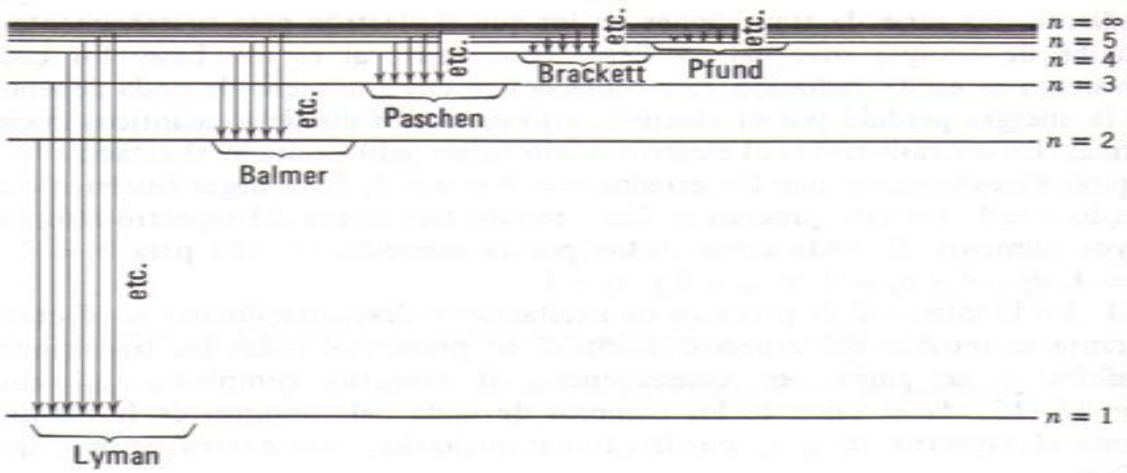

Figura 5-5. Ilustración sobre el origen de las cinco series conocidas para el espectro de hidrógeno.

Con el valor apropiado para n_f, mediante la ecuación (5–15) es posible ajustar el valor de los números de onda de las líneas de las series. En esto consistió el gran triunfo de Bohr. El éxito de la teoría fue particularmente espectacular, ya que cuando se formuló, no habían sido descubiertas todavía las series de Lyman, Brackett y Pfund; la teoría las predijo y, posteriormente, fueron observadas por los investigadores que llevan su nombre.

La teoría acertó igualmente en el caso de átomos con un electrón y $Z = 2$; por ejemplo, átomos de helio ionizados sólo una vez, He^+. Estos pueden producirse al hacer pasar una descarga eléctrica particularmente violenta (una chispa), a través de gas helio normal. Se los identifica por el espectro que

www.FreeLibros.me

emiten, que es más simple que el emitido por el átomo de helio normal. Se encuentra, en efecto, que el espectro atómico de He^+ es el mismo que el del H, salvo que los números de onda de las líneas espectrales son mayores por un factor de cuatro aproximadamente. Lo anterior se explica en términos de la teoría de Bohr, poniendo $Z^2 = 4$ en la ecuación (5–15).

Asimismo, las propiedades del espectro de absorción de los átomos con un electrón pueden entenderse en términos de la teoría de Bohr. Ya que el electrón atómico sólo puede tener una energía igual a la energía de alguno de los estados permitidos, absorberá solamente cantidades discretas de energía de la radiación electromagnética incidente. Podemos considerar a la radiación incidente como un haz de cuantos y que se absorben solamente aquellos cuya frecuencia satisface la relación $E = h\nu$, donde E es alguna de las cantidades discretas de energía que puede absorber el átomo. El proceso de la absorción de la radiación electromagnética es el inverso del de emisión; los números de onda de las líneas del espectro de absorción serán iguales a los de las líneas del espectro de emisión. En general, el átomo se encuentra inicialmente en su estado base, $n = 1$, de manera que sólo pueden presentarse procesos de absorción de $n = 1$ a $n > 1$. De este modo, se observarán normalmente sólo las líneas correspondientes a las series de Lymann (para el hidrógeno). Sin embargo, cuando el gas está a una temperatura elevada, las colisiones entre los átomos hacen que algunos de ellos se encuentren inicialmente en el primer estado excitado, $n = 2$, de modo que podrán observarse las líneas de absorción correspondiente a la serie de Balmer. La temperatura necesaria se puede estimar a partir de la distribución de probabilidad de Boltzmann (ecuación 2–23), que expresa la relación de la probabilidad de encontrar un átomo en el estado $n = 2$ a la probabilidad de encontrarlo en el estado $n = 1$:

$$\frac{P_{n=2}}{P_{n=1}} = \frac{e^{-E_{n=2}/kT}}{e^{-E_{n=1}/kT}}$$

donde k es la constante de Boltzmann $= 1.38 \times 10^{-16}$ ergs/°K. Las energías de estos dos estados están dadas, para el hidrógeno, por el diagrama de niveles de energía (figura 5–4): $E_{n=1} = -21.7 \times 10^{-12}$ ergs, $E_{n=2} = -5.42 \times 10^{-12}$ ergs. De este modo

$$\frac{P_{n=2}}{P_{n=1}} = e^{\frac{-(-5.42+21.7)\times 10^{-12}\,\text{ergs}}{(1.38\times 10^{-16}\,\text{ergs}/^\circ\text{K})T}} = e^{\frac{-1.18\times 10^5\,^\circ\text{K}}{T}}$$

Es claro que una fracción apreciable de los átomos de hidrógeno se encontrará inicialmente en el estado $n = 2$ si la temperatura T es, por lo menos, del orden de 10^5 °K. Como ya se ha mencionado, las líneas de absorción de Balmer se observan en el espectro del hidrógeno en algunas atmósferas estelares. De este modo se tiene una forma de estimar la temperatura de la superficie de la estrella.

4. Corrección para masa nuclear finita

Hemos supuesto que la masa del núcleo atómico es sumamente grande respecto a la del electrón, de manera que el núcleo permanece fijo en el

www.FreeLibros.me

espacio. Esta es una buena aproximación aun para el hidrógeno, que tiene el núcleo más ligero, ya que su masa es aproximadamente 2000 veces mayor que la masa electrónica. Sin embargo, los datos espectroscópicos son tan precisos, que se debe tomar en cuenta el valor finito de la masa nuclear antes de efectuar una comparación numérica detallada de la teoría de Bohr con los datos espectroscópicos.

Considere el sistema electrón-núcleo que se muestra en la figura 5-6. El electrón de masa m y el núcleo de masa M se deben mover de manera que el centro de masa (CM) permanezca fijo en el espacio. Sea r la distancia que

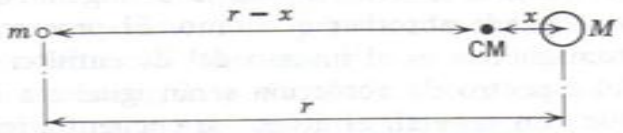

Figura 5-6. El centro de masa de un sistema electrón-núcleo.

separa al núcleo del electrón. La distancia x del núcleo al CM satisface la condición $m(r - x) = Mx$, de modo que

$$x = \frac{mr}{m + M} \quad \text{y} \quad r - x = \frac{Mr}{m + M} \tag{5–16}$$

Si el electrón gira alrededor del CM con velocidad angular ω, el núcleo debe también hacerlo con la misma velocidad angular. Calculemos el impulso angular orbital total L del sistema. Tenemos

$$L = m(r - x)^2\omega + Mx^2\omega = \frac{mM^2r^2\omega}{(m + M)^2} + \frac{Mm^2r^2\omega}{(m + M)^2}$$

de manera que

$$L = \frac{mM(m + M)}{(m + M)^2}\, r^2\omega = \frac{mM}{m + M}\, r^2\omega \tag{5–17}$$

Cuando $M/m \to \infty$, $L \to (mM/M)r^2\omega$ y $x \to 0$. De este modo, para un núcleo infinitamente pesado, el electrón gira alrededor de un núcleo estacionario con un impulso angular $L = mr^2\omega$. Precisamente esto es lo que teníamos en la ecuación (5–9), puesto que $r\omega$ es igual a la velocidad orbital v.

Para incluir este caso, Bohr modificó su segundo postulado en la forma siguiente:

De la infinidad de órbitas que son posibles en la mecánica clásica, el electrón sólo se moverá en aquéllas cuyo impulso angular total, L, es un múltiplo entero de la constante de Planck h, dividida entre 2π.

www.FreeLibros.me

Lo anterior se reduce, obviamente, al enunciado original del postulado cuando la masa nuclear es infinita, caso discutido en la sección anterior. Aplicando este postulado a la ecuación (5-17), tenemos:

$$\frac{mM}{m+M} r^2\omega = \frac{mM}{m+M} vr = n\hbar, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Al comparar esta expresión con la ecuación (5–11), observamos que el efecto neto es el de reemplazar la masa del electrón, m, por la conocida con el nombre de *masa reducida* del sistema,

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \tag{5–18}$$

que es menor que m por el factor $1/(1 + m/M)$.

No es difícil continuar con la derivación de Bohr para el caso de masa nuclear finita; todas las ecuaciones son iguales a las deducidas anteriormente, salvo que la masa del electrón es substituida por la masa reducida del sistema. En especial, la fórmula para los números de onda de las líneas espectrales toma la forma:

$$k = R_M Z^2\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right), \qquad R_M \equiv \frac{mM}{m+M}\frac{e^4}{4\pi c\hbar^3} \tag{5–19}$$

donde R_M es la *constante de Rydberg para un núcleo de masa M*. Es claro que, cuando $M/m \to \infty$, $R_M \to R_\infty$, la constante de Rydberg para un núcleo infinitamente pesado, la cual aparece en la ecuación (5–15). En general, R_M es menor que R_∞ por el factor $1/(1 + m/M)$. Para el caso extremo del hidrógeno, $M/m = 1836$ (vea el capítulo 3), y R_H es menor que R_∞ en 1 parte en 2000, aproximadamente.

Si calculamos R_H a partir de la ecuación (5–19) empleando los valores para m, M, e, c, y $\hbar$, comúnmente aceptados, encontramos que $R_H = 109681\ \text{cm}^{-1}$. Comparando este valor con el obtenido experimentalmente, dado en la ecuación (5–4), observamos que la teoría de Bohr, corregida por el efecto de masa finita, concuerda con el dato espectroscópico dentro de 3 partes en 100,000.

Antes de concluir esta sección, vale la pena presentar otra prueba de la precisión numérica, tanto de los datos experimentales como de la teoría de Bohr. Para esto comparemos el espectro del hidrógeno, H, con el del átomo de helio ionizado una vez, He^+. Como se mencionó anteriormente, se observa que las líneas de estos dos espectros difieren en número de onda por un factor F cuyo valor es aproximadamente 4. Conforme a la ecuación (5–19), este factor debe ser

$$F = Z^2 \frac{\dfrac{mM_{He^+}}{m + M_{He^+}}}{\dfrac{mM_H}{m + M_H}} = 4\frac{M_{He^+}}{M_H}\frac{(m + M_H)}{(m + M_{He^+})}$$

www.FreeLibros.me

La masa de núcleo de helio es la masa del átomo de helio menos dos masas electrónicas*, esto es,

$$M_{He^+} = M_{\text{átomo He}} - 2m$$

y la masa del núcleo de hidrógeno es igual a la masa del átomo de hidrógeno disminuida en una masa electrónica*, de modo que

$$M_H = M_{\text{átomo H}} - m$$

Químicamente se puede encontrar un valor preciso para la relación

$$\frac{M_{\text{átomo He}}}{M_{\text{átomo H}}} = \frac{4.004}{1.0081}$$

Las cuatro ecuaciones anteriores, sumadas al valor experimental del factor F, conducen a un cálculo de M_H/m. El resultado es $M_H/m = 1837$, en concordancia excelente con el valor obtenido experimentalmente en 1836, como se indicó en el capítulo 3.

5. Estados de energía atómica

La teoría de Bohr predice que la energía total de un electrón atómico está cuantizada. Por ejemplo, la ecuación (5–14) da los valores de la energía permitidos para un electrón en un átomo con un electrón. Aunque no hemos intentado deducir expresiones semejantes para electrones en un átomo con varios electrones, es claro que la energía de cada uno de los electrones estará cuantizada y, en consecuencia, el contenido energético total del átomo se debe restringir a ciertos valores discretos. La teoría predice, por consiguiente, que los estados de energía atómicos están cuantizados. La exactitud de esta predicción fue confirmada mediante un simple experimento llevado a cabo por Franck y Hertz en 1914, poco menos de un año después que Bohr había dado a conocer su teoría.

En la figura 5–7 se ilustra un aparato del tipo empleado por estos investigadores. Del cátodo caliente C se emiten electrones térmicos, es decir, de baja energía.** Son acelerados al ánodo A por un potencial V aplicado entre los electrodos. Algunos electrones pasan a través de los orificios de A y llegan a la placa P, siempre que su energía cinética, al abandonar a A, sea suficiente para superar un pequeño potencial retardador V_r aplicado entre P y A. El tubo está lleno de un gas o vapor, a baja presión, de los átomos que se desean investigar. El experimento consiste en medir la corriente electrónica que llega a P

* Despreciamos la contribución relativista a la masa atómica debido a que los electrones tienen una energía negativa total del orden de 10^{-11} ergs, su equivalente en masa es $M = E/c^2 \simeq 10^{-11}/10^{21} = 10^{-32}$ gm, masa pequeña comparada con la electrónica.

** Al aumentar la temperatura del cátodo, éste puede emitir electrones espontáneamente. Esto acontece cuando la agitación térmica de los electrones es comparable con la energía W necesaria para superar las fuerzas atractivas en la superficie del cátodo.

www.FreeLibros.me

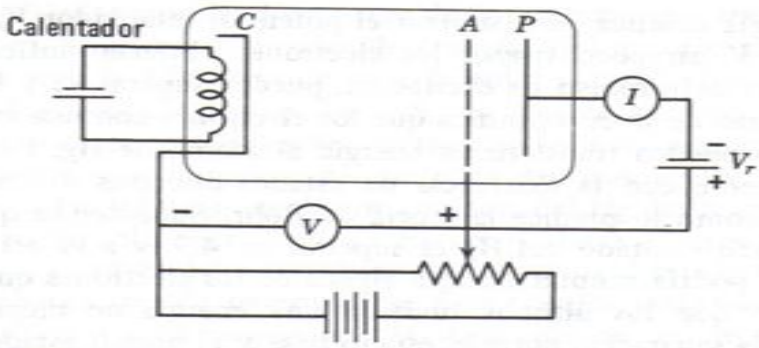

Figura 5-7. Un aparato empleado para mostrar que los estados de energía atómicos están cuantizados.

(mediante la corriente I que fluye por el amperímetro) en función del voltaje V.

El primer experimento se llevó a cabo con el tubo lleno de vapor de Hg. En la figura 5–8 se indican los resultados obtenidos. Para un voltaje de aceleración bajo, se observa que la corriente I aumenta al incrementar el voltaje V. La corriente disminuye abruptamente cuando la diferencia de potencial alcanza los 4.9 volts. Eso se puede interpretar pensando que ha comenzado abruptamente alguna interacción entre los electrones y los átomos de Hg cuando los primeros adquieren una energía cinética de 4.9 ev $= 7.85 \times 10^{-12}$ ergs, energía que resulta al pasar por una diferencia de potencial de 4.9 volts.* Claramente, una fracción apreciable de los electrones con esta energía excitan los átomos de Hg, perdiendo totalmente su energía cinética. Si V sobrepasara ligeramente los 4.9 volts, el proceso de excitación ocurriría precisamente enfrente del ánodo A; después de esto, el electrón no podría adquirir

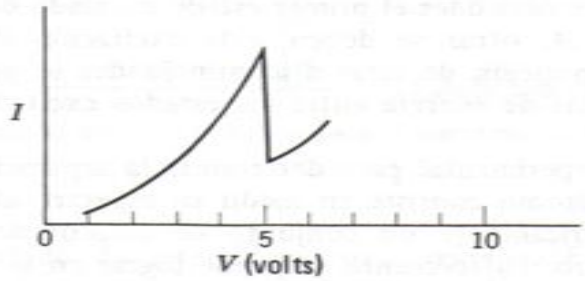

Figura 5-8. Corriente medida contra voltaje en el experimento de Franck y Hertz.

* Si el trabajo efectuado por una fuerza sobre un electrón es de 1 volt, la energía cinética de éste será $E = eV = 1.60 \times 10^{-19}$ coulombs $\times$ 1 volt $= 1.60 \times 10^{-19}$ joules $= 1.60 \times 10^{-12}$ ergs. En nuestro caso, la energía del electrón es $4.9 \times 1.60 \times 10^{-12}$ ergs $= 7.85 \times 10^{-12}$ ergs. Como unidad útil para la energía, definimos el *electrón volt*, (*ev*), de modo que 1 ev $= 1.60 \times 10^{-12}$ ergs. Muy frecuentemente se emplea esta unidad en la física atómica y nuclear. La energía cinética del electrón, objeto de discusión, se puede expresar como 4.9 ev o bien como 7.85×10^{-12} ergs.

www.FreeLibros.me

suficiente energía cinética para superar el potencial retardador V_r y llegar a la placa P. Para V un poco mayor los electrones obtienen suficiente energía cinética después del proceso de excitación, pueden superar V_r y llegar a P. Lo abrupto del corte de la curva indica que los electrones con una energía menor de 4.9 volt no pueden transferir su energía al átomo de Hg. Esta interpretación es consistente con la existencia de estados discretos de energía para el átomo de Hg, como lo predice la teoría de Bohr. Suponiendo que la energía del primer estado excitado del Hg es superior en 4.9 ev a la del estado base, este átomo no podría aceptar energía alguna de los electrones que lo bombardean, a menos que los últimos tuvieran una energía no menor de 4.9 ev. Ahora bien, si la separación entre el estado base y el primer estado excitado es de 4.9 ev $= 7.85 \times 10^{-12}$ ergs, debe existir una línea en el espectro del Hg cuyo número de onda es*

$$k = \frac{\nu}{c} = \frac{E}{ch} = \frac{7.85 \times 10^{-12}}{3.00 \times 10^{10} \times 6.62 \times 10^{-27}} = 3.95 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$$

la cual corresponde a una transición del primer estado excitado al estado base. Franck y Hertz encontraron una línea en el espectro cuyo número de onda casi coincidía con la cantidad indicada arriba. Encontraron también que cuando la energía de los electrones era menor que 4.9 ev el vapor de Hg no emitía líneas espectrales; cuando su energía apenas superaba esta cantidad, su espectro consistía de una sola línea con número de onda $k = 3.95 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$. Eran de esperarse estos resultados experimentales si la energía del átomo de Hg estuviera cuantizada. El experimento de Franck y Hertz ofrece una confirmación sorprendente a las predicciones de la teoría de Bohr. Proporciona también un método para medir las diferencias de energía entre los estados cuánticos de un átomo —la respuesta aparece en el cuadrante del voltímetro—. Si la curva de I en función de V se extiende a voltajes mayores, se encuentran en ella discontinuidades adicionales: algunas se deben a los electrones que excitan en múltiples ocasiones el primer estado excitado de diversos átomos en su paso de C a A; otras se deben a la excitación de estados excitados superiores. De la posición de estas discontinuidades se pueden medir directamente las diferencias de energía entre los estados excitados y el estado base.

Otro método experimental para determinar la separación entre los estados de energía de un átomo consiste en medir su espectro atómico y, a partir de él, construir empíricamente un conjunto de estados de energía que diesen lugar a este espectro. Difícilmente se puede lograr en la práctica, puesto que, frecuentemente, el conjunto de líneas del espectro es muy complicado y, por esto, el conjunto de estados de energía. Pero el método es muy exacto —propiedad que comparte con todas las técnicas espectroscópicas—. Se observa en todos los casos en que se ha determinado la separación entre los estados de energía mediante la técnica espectroscópica y la de Franck y Hertz, que los resultados obtenidos concuerdan excelentemente.

* En el cálculo empleamos $E = 7.85 \times 10^{-12}$ ergs, ya que hemos expresado todas las otras cantidades en el sistema cgs y deseamos obtener la respuesta en este sistema.

www.FreeLibros.me

Como ilustración de lo anterior, mostramos en la figura 5–9 una representación, simplificada considerablemente, de los estados de energía del Hg en términos de un diagrama de niveles de energía. Del experimento de Franck y Hertz se sabe que la diferencia de energía entre el estado base y el primero y segundo estados excitados es de 4.9 y 6.7 ev, respectivamente. Pueden corroborarse estos valores y, de hecho, determinarse con una precisión mucho mayor, midiendo los números de onda de las dos líneas espectrales que corresponden a las transiciones de un electrón del Hg desde estos dos estados al estado base. Por el experimento de Franck y Hertz es imposible determinar la energía $\epsilon = -10.4$ ev del estado base con respecto al estado de energía total cero. Sin embargo, puede determinarse esta energía midiendo el número de onda de la línea que corresponde a la transición de un electrón atómico al pasar del estado de energía total cero al estado base. Esa es el límite de aquella serie compuesta por las líneas correspondientes a las transiciones al estado base. También se puede medir la energía ϵ encontrando experimentalmente la energía que hay que suministrar a un átomo de Hg para que un electrón pase del estado base al estado de energía total cero. Puesto que un electrón de energía total cero ya no se encuentra ligado al átomo, ϵ es la energía necesaria para ionizarlo. Por consiguiente, recibe el nombre de *energía de ionización.*

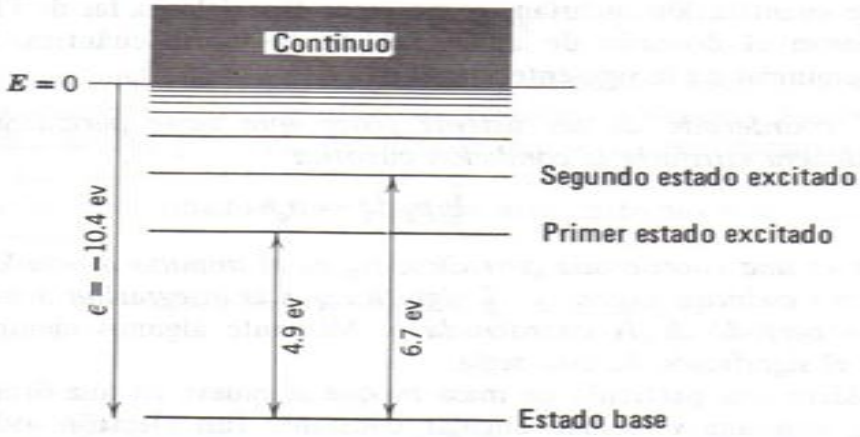

Figura 5-9. Un diagrama de niveles de energía para el mercurio (considerablemente simplificado).

Por arriba del estado discreto de mayor energía en $E = 0$, se encuentran estados del sistema formados por un electrón no ligado y un átomo de Hg ionizado. *La energía total de un electrón no ligado (un electrón libre con* $E > 0$*) no se encuentra cuantizada.* De esta forma, es posible que el electrón tenga cualquier energía $E > 0$, y los estados de energía forman un continuo. Puede excitarse un electrón de su estado base a un estado del continuo si el átomo de Hg recibe una energía mayor que 10.4 ev. Recíprocamente, es posible que un ion de Hg capture un electrón libre en uno de los estados discretos de energía del átomo neutro. En este proceso se emitirá una radia-

www.FreeLibros.me

ción cuyo número de onda es mayor que el límite de la serie que corresponde a este estado. El valor exacto del número de onda dependerá de la energía inicial E del electrón libre. Puesto que E puede tomar cualquier valor, el espectro de Hg tendrá un continuo que se extiende más allá del límite de toda serie en la dirección que aumenta el número de onda. Aunque con dificultad, lo anterior se puede observar experimentalmente. Las observaciones sobre el continuo de estados de energía, y sus consecuencias, hechas para el átomo de Hg, son igualmente válidas para todos los átomos.

6. Las reglas de cuantización de Wilson y Sommerfeld

Fue realmente notable el acierto de la teoría de Bohr por la concordancia de sus predicciones con el experimento. Esto acentuó el carácter misterioso de los postulados que la sustentaban. El mayor de ellos se refería a la relación entre la cuantización de Bohr del impulso angular de un electrón que se mueve en una órbita circular y la cuantización de Planck de la energía total de una entidad —un electrón, por ejemplo— que efectúa un movimiento armónico simple. En 1916, Wilson y Sommerfeld arrojaron cierta luz sobre este problema: enunciaron un conjunto de reglas de cuantización para cualquier sistema físico cuyas coordenadas varían periódicamente en el tiempo. Estas reglas de cuantización incluían, como casos especiales, a las de Planck y Bohr, y ampliaron el dominio de aplicación de la teoría cuántica. Sus reglas se pueden enunciar de la siguiente manera:

Toda coordenada de un sistema físico que varíe periódicamente en el tiempo deberá satisfacer la condición cuántica

$$\oint p_q \, dq = n_q h \tag{5–20}$$

donde q es una coordenada periódica, p_q es el impulso asociado con ella, n_q un número cuántico entero y $\oint$ significa que la integración deberá efectuarse sobre un período de la coordenada q. Mediante algunos ejemplos se puede explicar el significado de esta regla.

Considere una partícula de masa m que se mueve en una órbita circular de radio r_0 con una velocidad angular constante (un electrón atómico en una órbita de Bohr); su posición se especificará por las coordenadas polares r y θ. En la figura 5–10 se muestra el comportamiento de estas coordenadas en función del tiempo; ambas son funciones periódicas de éste si aceptamos que

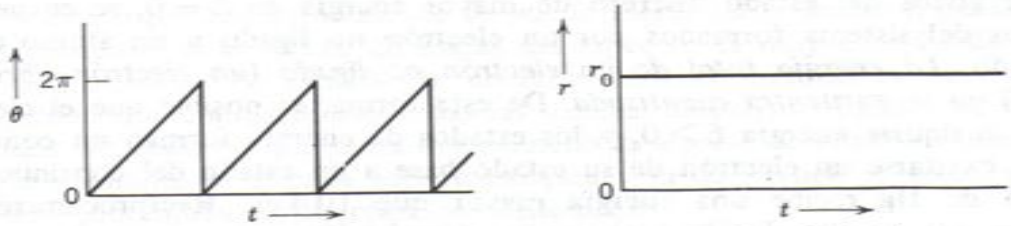

Figura 5-10. Dependencia con el tiempo de las coordenadas de un electrón en una órbita de Bohr.

www.FreeLibros.me

$r = r_0$ es un caso límite de este comportamiento. El impulso que corresponde a la coordenada angular θ, es el impulso angular $L = mr^2 d\theta/dt$; el que corresponde a la coordenada radial es el impulso radial $p_r = m\, dr/dt$. Puesto que $r = r_0$, $dr/dt = 0$ y $d\theta/dt = \omega =$ constante, debe tenerse $L = mr_0^2\omega =$ constante y $p_r = 0$. No es necesario aplicar la condición (5–20) a la coordenada radial r, puesto que el impulso radial es igual a cero; es fácil, en nuestro ejemplo, aplicar la condición a la coordenada angular. Tenemos $q = \theta$ y $p_q = L =$ constante; escribamos $n_q = n$ y obtenemos

$$\oint p_q\, dq = \oint L\, d\theta = L \oint d\theta = L \int_0^{2\pi} d\theta = 2\pi L$$

De esta suerte, la condición

$$\oint p_q\, dq = n_q h$$

toma la forma

$$2\pi L = nh$$

o sea

$$L = nh/2\pi \equiv n\hbar$$

Esta condición es igual a la impuesta por la ley de cuantización de Bohr.

En seguida aplicaremos las reglas de cuantización de Wilson y Sommerfeld a las coordenadas de una partícula de masa m que oscila armónicamente con la frecuencia ν. La posición de la partícula puede especificarse por la coordenada lineal x, cuyo comportamiento en el tiempo está ilustrado en la figura 5–11. Matemáticamente,

$$x = x_0 \operatorname{sen} 2\pi\nu t = x_0 \operatorname{sen} \omega t, \qquad \omega \equiv 2\pi\nu$$

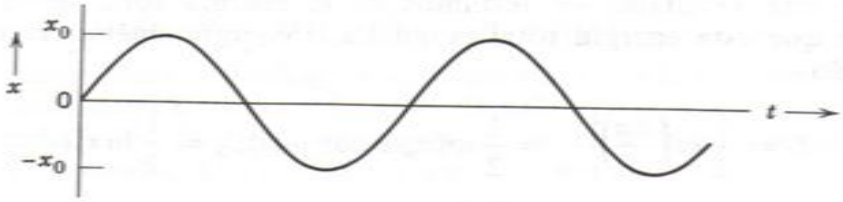

Figura 5-11. La dependencia en el tiempo de la coordenada de un oscilador armónico simple.

donde x_0 es la amplitud de la oscilación. El impulso, p, de la partícula es

$$p = m\frac{dx}{dt} = mx_0\omega \cos \omega t$$

www.FreeLibros.me

En este caso

$$\oint p_q\, dq = \oint p\, dx = \oint m x_0 \omega \cos \omega t\, dx$$

Para evaluar esta integral conviene expresar $\cos \omega t$ en función de x:

$$x^2 = x_0^2 \operatorname{sen}^2 \omega t = x_0^2(1 - \cos^2 \omega t)$$

De este modo

$$\cos^2 \omega t = \frac{x_0^2 - x^2}{x_0^2}, \qquad \cos \omega t = \frac{\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x_0}$$

y

$$\oint p\, dx = m x_0 \omega \oint \frac{\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x_0}\, dx = m\omega\, 4 \int_0^{x_0} \sqrt{x_0^2 - x^2}\, dx$$

Para justificar el último paso observemos que

$$\oint = \int_0^{x_0} + \int_{x_0}^0 + \int_0^{-x_0} + \int_{-x_0}^0 = 4 \int_0^{x_0}$$

puesto que el integrando es una función par de x. Así,

$$\oint p\, dx = m\omega\, 4 \left[\frac{x\sqrt{x_0^2 - x^2}}{2} + \frac{x_0^2}{2} \operatorname{sen}^{-1} \frac{x}{x_0} \right]_0^{x_0}$$

$$\oint p\, dx = m\omega\, 2(x_0^2 \operatorname{sen}^{-1} 1 - x_0^2 \operatorname{sen}^{-1} 0)$$

$$\oint p\, dx = m x_0^2\, \omega\pi$$

Expresemos este resultado en términos de la energía total de la partícula. Recordemos que esta energía total es igual a la energía cinética cuando $x = 0$. De este modo

$$E = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt}\right)^2_{t=0} = \frac{1}{2} m(x_0 \omega \cos \omega t)^2_{t=0} = \frac{1}{2} m x_0^2 \omega^2$$

puesto que $x = 0$ cuando $t = 0$. De esta forma tenemos

$$\oint p\, dx = \frac{1}{2} m x_0^2 \omega^2 \frac{2\pi}{\omega} = \frac{E}{\nu}$$

y

$$E/\nu = n_q h \equiv nh, \qquad E = nh\nu$$

condición idéntica a la ley de cuantización de Planck.

www.FreeLibros.me

7. La teoría relativista de Sommerfeld

Una aplicación importante de las reglas de cuantización de Sommerfeld y Wilson fue realizada por el primero de ellos al caso del átomo de hidrógeno, al suponer que el electrón se mueve en órbitas elípticas. Tuvo por objeto la explicación de la *estructura fina* en el espectro del hidrógeno. Esta consiste de la separación en diferentes componentes de las líneas espectrales y se presenta en todos los espectros atómicos. Puede observarse sólo mediante el empleo de un equipo de gran resolución, ya que la separación entre las componentes de una sola línea espectral en términos del número de onda es alrededor de 10^{-4} veces la separación entre dos líneas adyacentes. Este hecho puede interpretarse conforme a la teoría de Bohr en la forma siguiente: lo que se suponía que era un solo estado del átomo de hidrógeno, consta en realidad, de varios estados con energías aproximadamente iguales.

En primer lugar, Sommerfeld evaluó, en términos de la *mecánica clásica*, tanto el tamaño y la forma de las órbitas elípticas permitidas como la energía total de un electrón moviéndose en algunas de ellas. Si r y θ son las coordenadas polares que describen el movimiento del electrón, aplicó las dos condiciones cuánticas:

$$\oint L\, d\theta = n_\theta h$$

$$\oint p_r\, dr = n_r h$$

La primera condición proporciona la misma restricción sobre el impulso angular,

$$L = n_\theta \hbar, \qquad n_\theta = 1, 2, 3, \ldots$$

que la que se tiene en la teoría de órbitas circulares. La segunda condición (que no es aplicable en el caso límite de órbitas circulares), nos conduce a la siguiente relación entre L y a/b, la razón entre los semiejes mayor y menor de la elipse:

$$L(a/b - 1) = n_r \hbar, \qquad n_r = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Aplicando una relación análoga a la ecuación (5–8), relación de estabilidad mecánica, Sommerfeld encontró tanto el valor de a y b, que determinan la forma y tamaño de las órbitas elípticas, como el de la energía total, E, de un electrón en esa órbita. Los resultados son

$$a = \frac{n^2\hbar^2}{\mu Z e^2}$$

$$b = a\frac{n_\theta}{n} \tag{5–21}$$

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2n^2\hbar^2}$$

www.FreeLibros.me

donde μ es la masa reducida del electrón, y n es un número cuántico definido por

$$n \equiv n_\theta + n_r$$

Puesto que $n_\theta = 1, 2, 3, \ldots$ y $n_r = 0, 1, 2, 3, \ldots$, los valores que puede tomar n son

$$n = 1, 2, 3, 4, \ldots$$

Para un valor dado de n, n_θ puede tomar solamente los valores

$$n_\theta = 1, 2, 3, \ldots, n$$

El entero n recibe el nombre de *número cuántico principal* y n_θ el de *número cuántico azimutal.*

La segunda de las ecuaciones (5–21) muestra que la forma de la órbita (la razón del semieje mayor al menor), está determinada por la razón entre n_θ y n, cuando $n_\theta = n$, las órbitas son círculos de radio a. Observe que la ecuación que expresa a en términos de n es idéntica a la (5–12), la ecuación que da el radio de las órbitas circulares de Bohr.* La figura 5–12 muestra, a escala, las órbitas posibles que corresponden a los primeros valores del número cuántico principal. Para cada valor del número cuántico principal n se tienen n diferentes órbitas permitidas. Una de ellas, la circular, es la órbita descrita en la teoría original de Bohr; las otras son elípticas. A pesar de que para un valor dado de n, el electrón tenga la posibilidad de moverse en diferentes órbitas, la ecuación (5–21) establece que la energía del electrón es independiente de la órbita en que se mueva: la energía total del electrón depende solamente de n. Las órbitas posibles que corresponden a un mismo valor de n reciben el nombre de *degeneradas.*

Esta degeneración en la energía total del electrón, que para un valor de n puede moverse en órbitas diferentes, resulta del balance delicado entre las energías cinética y potencial, al suponer una fuerza que depende del cuadrado inverso, y de tratar el problema con los métodos de la mecánica no relativista. Sommerfeld logró eliminar esta degeneración empleando la *mecánica relativista.* En la discusión que sigue a la ecuación (5–13) se muestra que, para un electrón en un átomo de hidrógeno, la magnitud de v/c no puede ser mayor

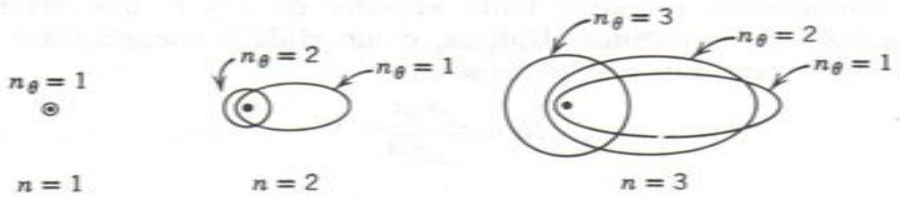

Figura 5-12. Algunas órbitas elípticas de Bohr y Sommerfeld.

* Recuerde que en la ecuación (5–12) se reemplazará m por μ para tomar en cuenta lo finito de la masa nuclear.

www.FreeLibros.me

que 10^{-2}. Esperaríamos que la corrección relativista a la energía total, debida a la variación relativista de la masa electrónica, que es el orden de $(v/c)^2$, tenga una magnitud aproximada de 10^{-4}. Sin embargo, éste es el orden de magnitud de la energía de separación necesaria para explicar la estructura fina en el espectro de hidrógeno. La magnitud real de la corrección depende de la velocidad promedio del electrón que, a su vez, es función de la elipticidad de la órbita. Después de un cálculo, que es demasiado tedioso para reproducirlo aquí, Sommerfeld encontró que la energía total de un electrón que se mueve en una órbita caracterizada por los números cuánticos n y n_θ está dada por

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2n^2\hbar^2}\left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n}\left(\frac{1}{n_\theta} - \frac{3}{4n}\right)\right] \tag{5–22}$$

La cantidad $\alpha \equiv e^2/\hbar c$, un número sin dimensiones, recibe el nombre de *constante de la estructura fina* y su valor es

$$\alpha \equiv e^2/\hbar c = 7.297 \times 10^{-3} \simeq 1/137 \tag{5–23}$$

En la figura 5–13 representamos los primeros estados de energía del átomo de hidrógeno mediante un diagrama de niveles de energía. En favor de la claridad, se ha exagerado la separación entre los diferentes niveles que corresponden a un valor dado de n. Las flechas indican las transiciones entre los diferentes estados de energía que producen las líneas en el espectro atómico. Las líneas que se observan en el espectro corresponden a las flechas continuas;

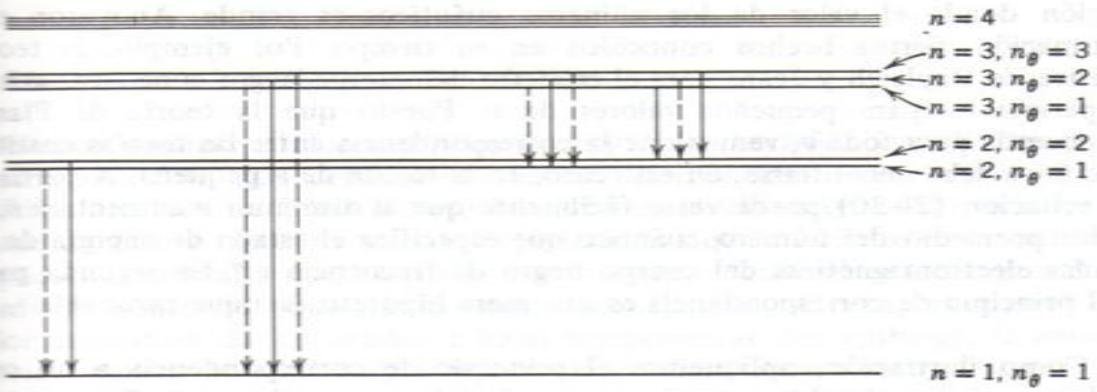

Figura 5-13. La separación de estructura fina de algunos niveles del átomo de hidrógeno. La separación se ha exagerado notablemente. Las flechas sólidas indican las posibles transiciones entre niveles.

las líneas que corresponderían a las flechas discontinuas no se observan experimentalmente. Los números de onda para estas líneas, calculados a partir de (5–22), concuerdan excelentemente con los experimentales. Sin embargo, están ausentes del espectro las líneas que corresponden a transiciones repre-

www.FreeLibros.me

sentadas por flechas discontinuas: estas transiciones no se realizan. Un examen detenido de la figura mostrará que puede realizarse una transición sólo si

$$n_{\theta_i} - n_{\theta_f} = \pm 1 \tag{5–24}$$

Esta ecuación recibe el nombre de *regla de selección.*

8. El principio de correspondencia

En la teoría que hemos decrito hasta ahora no se da el porqué de la existencia de las reglas de selección. Sin embargo, mediante un postulado adicional, conocido como *principio de correspondencia,* se puede encontrar una justificación teórica a estas reglas. Este principio, enunciado por Bohr en 1923, consta de dos partes:

1. *Las predicciones que hace la teoría cuántica para el comportamiento de cualquier sistema físico deben corresponder a las predicciones de la física clásica para valores grandes de los números cuánticos que especifican al sistema.*
2. *Una regla de selección es válida para cualquier valor del número cuántico correspondiente. De esta suerte, toda regla de selección que se aplique en el límite clásico (n grande) deberá aplicarse en el límite cuántico (n pequeña).*

Por lo que respecta a la primera parte, es obvio que la teoría cuántica corresponderá a la clásica en aquel límite donde el sistema se comporta clásicamente. Se presenta, naturalmente, la siguiente pregunta: ¿dónde se encuentra el límite clásico? Bohr afirma que el límite clásico se halla en la región donde el valor de los números cuánticos es grande. Apoyaron esta afirmación ciertos hechos conocidos en su tiempo. Por ejemplo, la teoría clásica de Rayleigh y Jeans para el espectro del cuerpo negro concuerda con el experimento para pequeños valores de ν. Puesto que la teoría de Planck concuerda para toda ν, vemos que la correspondencia entre las teorías cuántica y clásica debe encontrarse, en este caso, en la región de ν pequeña. A partir de la ecuación (2–30) puede verse fácilmente que al disminuir ν aumentará $\bar{n}$, el valor promedio del número cuántico que especifica el estado de energía de las ondas electromagnéticas del cuerpo negro de frecuencia ν.* La segunda parte del principio de correspondencia es una mera hipótesis, aunque razonable.

Como ilustración, apliquemos el principio de correspondencia a un oscilador armónico simple, como lo es un péndulo que oscila con la frecuencia ν. La teoría cuántica predice que la energía de los estados permitidos para este sistema están dados por la ecuación $E = nh\nu$. Hemos visto en la discusión de la sección 10 del capítulo 2, que esta predicción no se opone a lo que sabemos acerca de los estados de energía de un péndulo clásico. En este sentido, las teorías clásica y cuántica se corresponderían cuando $n \to \infty$ en lo concerniente

* $\epsilon = nh\nu$, así que $\bar{\epsilon} = \bar{n}h\nu$. La ecuación (2–30) muestra que $\bar{\epsilon} \to kT$ cuando $\nu \to 0$, así que en este límite $\bar{n}h\nu = kT$, la cual es una constante. Por lo tanto, $\bar{n} \to \infty$ cuando $\nu \to 0$.

www.FreeLibros.me

a los estados de energía de un péndulo. Supongamos ahora que la lenteja del péndulo está cargada eléctricamente, con lo que el sistema podría absorber o emitir radiación electromagnética y, de este modo, podrían compararse las predicciones de las dos teorías sobre este fenómeno. Clásicamente, el sistema emitiría radiación de frecuencia ν debido al movimiento acelerado de la carga. Conforme a la teoría cuántica, esta radiación es emitida cuando el sistema pasa del estado cuántico n_i al estado n_f. La energía liberada en esa transición es $E_i - E_f = (n_i - n_f)h\nu$, y es transportada por un cuanto de frecuencia $\nu = (E_i - E_f)/h(n_i - n_f)$. De este modo, para obtener una correspondencia entre las predicciones de las teorías clásica y cuántica sobre la frecuencia de la radiación emitida debe requerirse que, en el límite clásico, sea válida la regla de selección $n_i - n_f = +1$. Un argumento similar, aplicado a la absorción de la radiación por el péndulo cargado, lleva a la conclusión de que en el límite clásico existe la posibilidad de una transición en la cual $n_i - n_f = -1$. Puede probarse la validez de estas reglas de selección en el límite cuántico, investigando el espectro de la radiación emitida por una molécula diatómica en vibración. La energía de los estados vibracionales de este sistema son precisamente los de un oscilador armónico —la fuerza que actúa sobre los dos átomos en la vecindad de su posición de equilibrio es una fuerza armónica de restitución. A partir del espectro vibracional se verifica que en el límite de números cuánticos pequeños es válida la regla de selección $n_i - n_f = \pm 1$.

A partir del espectro atómico y molecular se han encontrado, empíricamente, numerosas reglas de selección. Muchas de ellas se pudieron entender por el principio de correspondencia, aunque a veces surgieron algunas ambigüedades.

9. Una crítica a la antigua teoría cuántica

Hemos descrito en los capítulos 2, 3 y 5 los hechos sobresalientes en el desarrollo de lo que actualmente llamaríamos *antigua teoría cuántica*. En muchos aspectos, esta teoría tuvo buen éxito, mucho mayor del que el lector puede apreciar a través de nuestra exposición, ya que no hemos mencionado la explicación acertada que hace esta teoría a otros fenómenos incomprensibles desde el punto de vista clásico como, por ejemplo, el comportamiento del calor específico de los sólidos a bajas temperaturas. Sin embargo, la antigua teoría cuántica no estaba libre de objeciones. Para cerrar nuestra discusión de esta teoría, indicaremos algunos de sus aspectos indeseables.

1. La teoría sólo nos enseña a tratar sistemas que se comportan periódicamente en el transcurso del tiempo; hay sistemas físicos que no se comportan así.
2. La teoría nos dice cómo calcular la energía de los estados permitidos del sistema y las frecuencias de los cuantos emitidos o absorbidos cuando el sistema efectúa transiciones entre estos estados permitidos, sin especificar cómo puede calcularse la *rapidez* con la que se efectúan dichas transiciones.
3. La teoría sólo es aplicable a átomos con un electrón. Ciertamente que los elementos alcalinos (Li, Na, K, Rb, Cs) se pueden tratar aproximadamente,

www.FreeLibros.me

ya que tienen muchos aspectos comunes con el átomo con un solo electrón. La teoría fracasa cuando se la aplica al átomo de helio, que contiene dos electrones.

4. Finalmente, debemos mencionar una censura de carácter subjetivo: la teoría se muestra incoherente; desde el punto de vista intelectual es insatisfactoria.

Los físicos de entonces observaron que algunas de estas objeciones eran de carácter fundamental, y se llevó a cabo un gran esfuerzo para desarrollar una teoría cuántica que estuviera libre de estas y otras objeciones. Este esfuerzo tuvo su premio: en 1925, apoyándose en una idea propuesta el año precedente por De Broglie, Schrödinger desarrolló su teoría de la *mecánica cuántica*, la que, casi universalmente, se considera aceptable.

Como veremos, la teoría de Schrödinger es, en muchos aspectos, muy distinta a la antigua teoría cuántica. Por ejemplo, la imagen que ofrece de la estructura atómica es la antítesis de la imagen empleada en la antigua teoría de electrones que se mueven en órbitas bien definidas. Sin embargo, aún se emplea frecuentemente la antigua teoría cuántica para obtener una primera idea de la predicción de la mecánica cuántica. Existen razones para ello: la antigua teoría cuántica proporciona resultados numéricos correctos usando técnicas matemáticas mucho menos complicadas que las de la mecánica cuántica y, además, es útil para visualizar algunos procesos que, por su lenguaje abstracto, es difícil hacerlo en términos de la mecánica cuántica. Es recomendable que el lector se familiarice bastante con la antigua teoría cuántica, especialmente con la de Bohr.

BIBLIOGRAFIA

Born, M., *Atomic Physics*, Blackie and Son, Londres, 1957.

Ruark, A. E. y H. C. Urey, *Atoms, Molecules, and Quanta*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1930.

Richtmyer, F. K., E. H. Kennard y T. Lauritsen, *Introduction to Modern Physics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

EJERCICIOS

1. Lleve a cabo los detalles del cálculo de Bohr para el caso de un núcleo de masa finita y obtenga la ecuación (5–19).

2. Una partícula de masa m se mueve a lo largo del eje x entre puntos $x = 0$ y $x = a$, donde rebota elásticamente. Mediante las reglas de cuantización de Sommerfeld y Wilson, encuentre los valores posibles de la energía total de la partícula.

3. Aplique las reglas de cuantización de Sommerfeld y Wilson a las coordenadas de un cuerpo que gira alrededor de un eje para mostrar que los valores que puede tomar su energía total son

$$E = \hbar^2 n^2 / 2I, \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

donde I es el momento de inercia de cuerpo respecto al eje.

www.FreeLibros.me

4. Aplique las reglas de cuantización de Sommerfeld y Wilson a los resultados del ejercicio 3 del capítulo 4 y obtenga las ecuaciones (5–21).

5. Muestre que para v/c pequeña, el error que se comete en la expresión clásica $E = p^2/2m + V$ es menor que E por un factor del orden de $(v/c)^2$, como se afirmó en la sección 7.

6. Derive una expresión que relacione la frecuencia de la radiación electromagnética emitida en una transición entre dos estados de un átomo de Bohr y las frecuencias orbitales del electrón en estos estados. Estúdiela en el límite de números cuánticos grandes y comente su correspondencia con las predicciones de la física clásica.

www.FreeLibros.me

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 6

Partículas y ondas

1. El postulado de De Broglie

El desarrollo de la teoría de la mecánica cuántica se inició con una idea que, aunque simple, es de una extrema importancia— expuesta por De Broglie en su tesis doctoral (1924). Su línea de pensamiento fue aproximadamente la siguiente: en la física clásica se considera que la radiación electromagnética es un fenómeno netamente de propagación ondulatoria. Por otra parte, las investigaciones de Einstein y Compton han mostrado que en ciertas circunstancias manifiesta una naturaleza característica de las partículas (cuantos). Al ser éste el caso, ¿no será cierto que entidades físicas que consideramos como partículas (electrones, partículas alfas, bolas de billar, etc.), bajo ciertas condiciones manifestarán una naturaleza característica de las ondas?

Cuando se investiga la interacción de la radiación con la materia se pone de manifiesto la naturaleza corpuscular de la radiación electromagnética, mientras que su naturaleza ondulatoria se revela cuando se considera la forma en que se propaga. La situación puede describirse indistintamente diciendo que la radiación electromagnética es una onda que al interaccionar con la materia manifiesta un comportamiento corpuscular, o bien, que consta de partículas cuyo movimiento está determinado por las propiedades de propagación de ciertas ondas que le están asociadas. En cierta medida sería ingenuo sugerir que deba hacerse una elección. Sin embargo, aceptando tentativamente la segunda alternativa y guiado por la analogía, De Broglie examinó las características ondulatorias de las partículas en términos de algún aspecto de propagación ondulatoria en su movimiento. Examinó, entonces, la idea de que el movimiento de una partícula está gobernado por la propagación ondulatoria de ciertas *ondas piloto* (según su terminología) asociadas con la partícula.

Cuando De Broglie publicó su trabajo aún no se había observado el comportamiento ondulatorio en el movimiento de una partícula, aunque éste había sido investigado en múltiples ocasiones. Esto no aportaba prueba alguna: quizá la longitud de onda de las ondas piloto fuera muy pequeña comparada con las dimensiones lineales del sistema empleado para investigar el movimiento de la partícula, de modo que no es posible observar los aspectos ondulatorios. El significado de lo anterior puede ilustrarse mediante un experimento de difracción por una sola rendija, realizado para demostrar la natura-

www.FreeLibros.me

leza ondulatoria de la radiación electromagnética. La figura 6–1 describe el dispositivo experimental. Los resultados del experimento dependen en forma terminante de la relación entre la longitud de onda λ de la radiación electromagnética y la anchura d de la rendija. Cuando $\lambda \gg d$, se registra en la placa fotográfica un patrón de difracción característico del fenómeno ondulatorio; cuando $\lambda \ll d$, se observa una imagen perfectamente definida de la rendija. En este caso, la radiación no acusa rasgos de su carácter ondulatorio, y su propagación puede describirse adecuadamente en términos de la óptica geométrica, una teoría corpuscular.

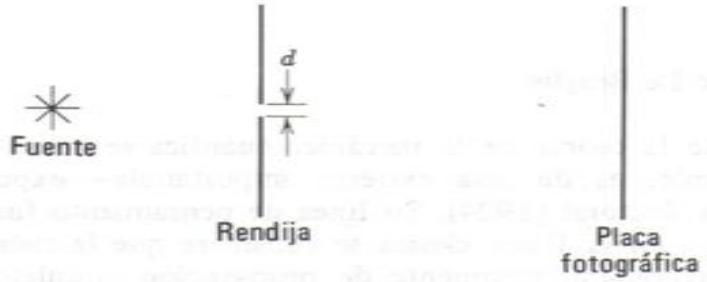

Figura 6-1. Un dispositivo para demostrar la naturaleza ondulatoria de la radiación electromagnética.

La primera tarea de De Broglie consistió, claramente, en establecer el procedimiento para determinar la longitud de onda de las ondas piloto. Supuso, razonablemente, que tanto su longitud de onda como su frecuencia podían evaluarse a partir de las mismas ecuaciones que se emplean para calcular estos parámetros de la radiación electromagnética. Considere un haz de radiación electromagnética que conste de cuantos con energía relativista total E. Conforme a la ecuación de Einstein (3–7), la frecuencia ν de la radiación es

$$\nu = E/h \tag{6–1}$$

y su longitud de onda puede calcularse mediante la relación usual entre λ, ν y w, la velocidad de propagación de la onda. Esta es

$$\lambda = w/\nu \tag{6–2}$$

Para la radiación electromagnética $w = c$, de manera que

$$\lambda = c/\nu = hc/E \tag{6–3}$$

Conforme a la ecuación (3–10), el impulso del cuanto es $p = E/c$. Así, λ puede calcularse por la ecuación

$$\lambda = h/p \tag{6–4}$$

www.FreeLibros.me

De Broglie postuló que la longitud de onda λ y la frecuencia ν de las ondas piloto asociadas con una partícula de impulso p y energía relativista total E, están dadas por

$$\lambda = h/p \qquad \nu = E/h \tag{6–5}$$

y que el movimiento de la partícula está regido por la propagación ondulatoria de las ondas piloto.

De ahí su razón para seleccionar ecuaciones análogas como (6–4) y (6–1), en vez de (6–3) y (6–1) que vendrían a ser aparentemente cortas.

2. Algunas propiedades de las ondas piloto

A partir de la ecuación (6–2) y la relación entre λ y ν dada en (6–5), calculemos la velocidad de propagación w de las ondas piloto asociadas con la partícula:

$$w = \nu\lambda = \frac{E}{h}\frac{h}{p} = \frac{E}{p} \tag{6–6}$$

Mediante la ecuación (1–25) puede evaluarse la energía relativista total de la partícula, con lo que se obtiene

$$w = \frac{\sqrt{c^2p^2 + (m_0c^2)^2}}{p} = \frac{c\sqrt{p^2 + (m_0c)^2}}{p}$$

o sea

$$w = c\sqrt{1 + (m_0c/p)^2} \tag{6–7}$$

Observe que w es mayor que c. A primera vista, esto es incongruente, puesto que la velocidad v de la partícula debe ser menor que c, de modo que la partícula no podría acompañar a sus ondas piloto.

Por el siguiente argumento nos convencemos de que no surge dificultad alguna: imagine que una partícula libre (ausencia de fuerzas) y sus ondas piloto asociadas se mueven de modo que puedan ser descritas por sólo una *coordenada espacial x, y que sobre un gran número de puntos del eje x se ha* distribuido un conjunto de instrumentos hipotéticos para medir la intensidad de las ondas piloto. Al tiempo t_0 se registran las lecturas en estos instrumentos. Los resultados de este experimento pueden presentarse como una gráfica de los valores instantáneos, $\Psi(x, t)_{t=t_0}$, de las ondas piloto al tiempo t_0 como función de x. A pesar de que actualmente sabemos poco sobre las ondas piloto, es indudable que, *cualitativamente*, la gráfica tendrá el aspecto indicado en la figura 6–2: la amplitud de las ondas piloto debe estar modula-

www.FreeLibros.me

da de manera que tengan un valor distinto de cero sólo en la vecindad de la partícula, ya que las ondas piloto deben estar, en alguna forma, asociadas espacialmente con la partícula cuyo movimiento controlan. Las ondas piloto forman un grupo de ondas que debe moverse, al transcurrir el tiempo, a lo largo del eje x con la misma velocidad que la partícula. Recordemos que, en un *grupo* de ondas, es necesario distinguir entre la velocidad g de grupo y la velocidad w de fase de las ondas que lo componen. Se tiene, además, que g es, en general, menor que w. Esto es alentador, puesto que g podría ser igual a la velocidad de la partícula.

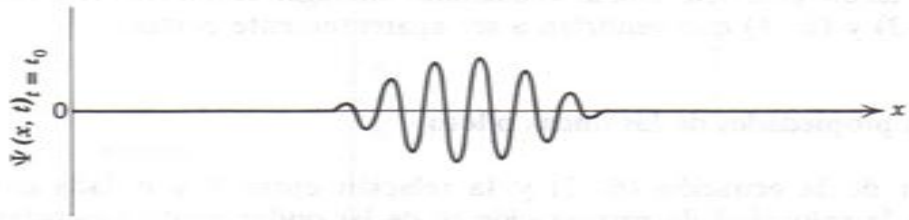

Figura 6-2. Un grupo de ondas piloto.

Veamos la relación que existe entre g y las cantidades ν y λ (relación que equivalga a la existente entre w y estas cantidades). Consideremos, en primer lugar, el tipo más simple de movimiento ondulatorio: una onda sinusoidal con frecuencia ν, longitud de onda λ, amplitud constante desde $-\infty$ hasta $+\infty$ y que se mueve con velocidad constante en la dirección positiva del eje x. Esta onda puede representarse por la función

$$\Psi(x, t) = \operatorname{sen} 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)$$

o bien

$$\Psi(x, t) = \operatorname{sen} 2\pi(kx - \nu t), \qquad \text{donde } k \equiv 1/\lambda \tag{6-8}$$

Esta función representa efectivamente una onda:

1. Para x fija, la función varía sinusoidalmente con frecuencia ν.
2. Para t fijo, la función depende sinusoidalmente de x, con longitud de onda λ o número de onda k.
3. Los ceros de la función, que corresponden a los nodos de la onda que representan, se encuentran en los valores x_n tales que

$$2\pi(kx_n - \nu t) = \pi n, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

ó

$$x_n = \frac{n}{2k} + \frac{\nu}{k} t$$

www.FreeLibros.me

Estos nodos, así como todos los puntos sobre la onda, se mueven en la dirección positiva del eje x con la velocidad

$$w = dx_n/dt$$

que es igual a

$$w = \nu/k$$

Observe que esta expresión es idéntica a la (6–2), ya que $k = 1/\lambda$.

Examinemos ahora la situación que se presenta cuando las ondas están moduladas de manera que forman un solo grupo. Puede obtenerse matemáticamente un grupo de ondas que se mueven en la dirección positiva del eje x –algo semejante al grupo de ondas piloto representadas en la figura 6–2–, sumando un número *infinitamente grande* de ondas de la forma (6–8), de modo que, para dos ondas consecutivas, la diferencia en sus frecuencias ν, o números de onda k, es muy pequeña. En virtud de que las técnicas matemáticas correspondientes son complejas, es suficiente, por ahora, considerar lo que pasa cuando sólo se suman dos ondas. Tomemos

$$\Psi(x, t) = \Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t) \tag{6–9}$$

donde

$$\Psi_1(x, t) = \operatorname{sen} 2\pi[kx - \nu t]$$
$$\Psi_2(x, t) = \operatorname{sen} 2\pi[(k + dk)x - (\nu + d\nu)t]$$

Ahora bien

$$\operatorname{sen} A + \operatorname{sen} B = 2 \cos \tfrac{1}{2}(A - B) \operatorname{sen} \tfrac{1}{2}(A + B)$$

En nuestro caso tenemos

$$\Psi(x, t) = 2 \cos 2\pi\left[\frac{dk}{2} x - \frac{d\nu}{2} t\right] \operatorname{sen} 2\pi\left[\frac{(2k + dk)}{2} x - \frac{(2\nu + d\nu)}{2} t\right]$$

Puesto que $d\nu \ll 2\nu$ y $dk \ll 2k$,

$$\Psi(x, t) \cong 2 \cos 2\pi\left(\frac{dk}{2} x - \frac{d\nu}{2} t\right) \operatorname{sen} 2\pi(kx - \nu t) \tag{6–10}$$

En la figura 6–3 se ve la gráfica de $\Psi(x, t)$ como función de x para un valor fijo de $t = t_0$. El segundo factor de $\Psi(x, t)$ es una onda que tiene la misma forma que la indicada en la ecuación (6–8); el primer factor la modula de manera que la amplitud de las oscilaciones de $\Psi(x, t)$ varían periódicamente. Al superponer *dos* ondas cuya frecuencia y numero de onda difieren ligeramente, se produce una sucesión *infinita* de grupos. Estos grupos, y las ondas individuales que contienen, se mueven en la dirección positiva del eje x. Para calcular la velocidad w de fase, consideremos el segundo factor de $\Psi(x,$

www.FreeLibros.me

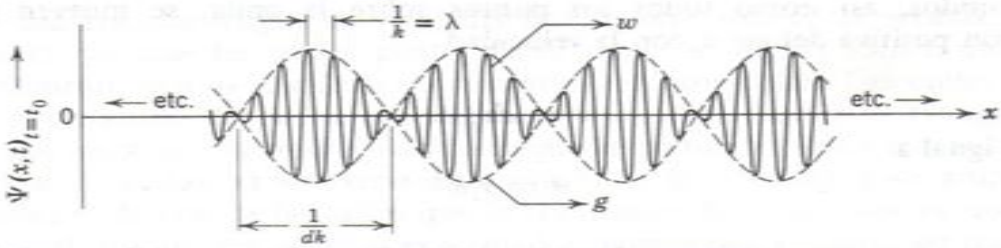

Figura 6-3. La suma de dos ondas sinusoidales cuyas frecuencias difieren en una cantidad pequeña.

t), y para la velocidad g de grupo consideramos el primer factor. Procediendo como se hizo en 3, encontramos

$$w = \nu/k$$
$$g = \frac{d\nu/2}{dk/2} = \frac{d\nu}{dk} \tag{6–11}$$

Es posible demostrar que al combinar un *número infinito* de ondas para formar *un* solo grupo, la relación entre la velocidad de fase w y la velocidad de grupo g también están dadas por (6–11), de manera que estas ecuaciones tienen validez general.

Ahora podemos calcular la velocidad de grupo g de las ondas piloto asociadas con la partícula en movimiento. De las ecuaciones (6–5),

$$\nu = E/h \quad \text{y} \quad k \equiv 1/\lambda = p/h$$

de manera que

$$d\nu = dE/h \quad \text{y} \quad dk = dp/h$$

Así, la velocidad de grupo es

$$g = d\nu/dk = dE/dp$$

Conforme a la ecuación (1–25),

$$E^2 = c^2p^2 + (m_0c^2)^2$$

o sea

$$2E\,dE = c^2 2p\,dp$$

$$\frac{dE}{dp} = c^2\frac{p}{E}$$

Por consiguiente

$$g = c^2\frac{p}{E} \tag{6–12}$$

www.FreeLibros.me

Por las ecuaciones (1–24) y (1–17)

$$E = mc^2 \quad \text{y} \quad p = mv$$

donde $m = m_0/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ y v son, respectivamente, la masa relativista y la velocidad de la partícula. Hemos llegado, entonces, al resultado que deseábamos:

$$g = c^2 \frac{mv}{mc^2} = v \tag{6–13}$$

La velocidad de grupo de las ondas piloto es igual a la velocidad de la partícula cuyo movimiento gobierna. Entonces, el postulado de De Broglie es internamente consistente.

Ahora vemos por qué De Broglie no eligió la pareja de ecuaciones

$$k \equiv 1/\lambda = E/hc$$

$$\nu = E/h$$

análoga a las ecuaciones (6–3) y (6–1) para especificar la frecuencia y el número de onda de las ondas piloto asociadas con una partícula. Al aplicar (6–11), obtenemos para la velocidad de fase,

$$w = \nu/k = c$$

y para la velocidad de grupo,

$$g = \frac{d\nu}{dk} = \frac{dE/h}{dE/hc} = c$$

Estas ecuaciones serán aplicables sólo para los cuantos que se mueven con una velocidad igual a c; no así para una partícula de velocidad v, que es necesariamente menor que c.

A partir de las ecuaciones (6–6) y (6–12), encontramos que la relación entre la velocidad de fase w y la de grupo g es:

$$w = c^2/g$$

Por la ecuación (6–13), la expresaremos en términos de la velocidad v de la partícula:

$$w = c^2/v \tag{6–14}$$

Puesto que w es mayor que g, las ondas individuales rebasan al grupo de ondas, lo que se observa también en un grupo de ondas de agua.

3. Confirmación experimental del postulado de De Broglie

Como se mencionó en la sección 1, comparando con las características de la propagación de las ondas electromagnéticas, se encuentra que el comporta-

www.FreeLibros.me

miento ondulatorio en el movimiento de una partícula sólo podrá manifestarse si el orden de magnitud de la longitud de onda de De Broglie $\lambda = h/p$ no es menor que el de las dimensiones características del sistema empleado para investigar el movimiento. Puesto que el valor de la constante de Planck, $h = 6.62 \times 10^{-27}$ erg-seg, es muy pequeño, a menos que el valor de p también lo sea, el de λ será tan pequeño que elimine toda esperanza de observar los efectos postulados. Calculemos p y λ en algunos casos específicos.

Considere una pequeña partícula de polvo, de $r = 10^{-4}$ cm y densidad $\rho = 10\ \text{gm/cm}^3$, que se mueve con una velocidad $v = 1\ \text{cm-seg}^{-1}$. Ya que $v \ll c$, es posible calcular p a partir de la fórmula clásica

$$p = mv = \tfrac{4}{3}\pi r^3 \rho v \simeq 4 \times 10^{-11}\ \text{gm-cm-seg}^{-1}$$

La longitud de onda de De Broglie de la partícula es

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.6 \times 10^{-27}}{4 \times 10^{-11}} \simeq 1.6 \times 10^{-16}\ \text{cm}$$

que es sumamente pequeña comparada con las dimensiones de *cualquier* sistema físico, aunque hemos considerado un impulso para la partícula mucho menor que el usual para las partículas consideradas en la mecánica clásica. Así, no estamos en la posibilidad de aducir en favor o en contra del postulado de De Broglie al considerar el movimiento de las partículas macroscópicas.

Considere, a continuación, un electrón de energía relativamente baja, por ejemplo, $T = 10\ \text{ev} = 1.6 \times 10^{-11}$ ergs. Esta es aproximadamente igual a la energía cinética del electrón en el átomo de hidrógeno. Puesto que su velocidad es pequeña comparada con c, su impulso puede evaluarse mediante la expresión clásica

$$p = \sqrt{2mT} = \sqrt{2 \times 9.1 \times 10^{-28} \times 1.6 \times 10^{-11}}$$
$$p \simeq 1.7 \times 10^{-19}\ \text{gm-cm-seg}^{-1}$$

La longitud de onda de De Broglie será

$$\lambda = \frac{6.6 \times 10^{-27}}{1.7 \times 10^{-19}} \simeq 3.9 \times 10^{-8}\ \text{cm}$$

Aunque pequeña, esta longitud de onda es del orden del tamaño de un átomo y, en consecuencia, de la distancia interatómica en un cristal. Esto sugiere, entonces, que cuando un cristal refleje o transmita un haz de electrones podrán observarse efectos de difracción. Davisson y Germer fueron los primeros en constatar estos efectos.

En el experimento que Davisson y Germer efectuaron en 1927, cuyo dispositivo se muestra en la figura 6–4, se produce un haz de electrones con una energía baja y bien definida, al pasar los electrones emitidos por el cátodo c a través de la diferencia de potencial V. El haz incide normalmente sobre la superficie de un cristal de níquel. Algunos de los electrones son retrodisper-

www.FreeLibros.me

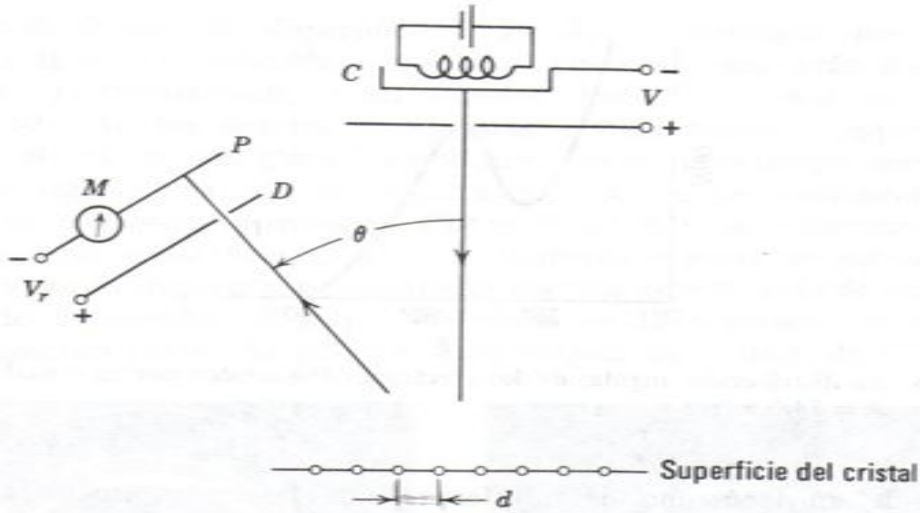

Figura 6-4. Un dispositivo empleado para verificar el postulado de De Broglie. La región por donde pasan los electrones se encuentra al vacío.

sados por la superficie del cristal; otros son dispersados formando un ángulo (como se indica en la figura). El número de éstos se mide con un detector que consiste de una placa P detrás del diafragma D. Mediante un voltaje V_r de retardo, ligeramente menor que V, permite llegar a P sólo aquellos electrones que prácticamente no han perdido energía, donde producen una corriente que registra el amperímetro M. Al atravesar un sólido, los electrones de baja energía la pierden rápidamente, de modo que los registrados por M fueron dispersados esencialmente, en la superficie del cristal. En la figura se indica también la distribución periódica de los átomos en esa superficie. Para el cristal de níquel, la distancia interatómica d (longitud de repetición de la estructura periódica) es de 2.15×10^{-8} cm,* comparable a la longitud de onda de De Broglie de los electrones incidentes. Puesto que la característica sobresaliente de una red de difracción es su periodicidad, si el postulado de De Broglie es correcto el patrón de los electrones dispersados por el cristal mostrará efectos de difracción. En la figura 6–5 se muestra la gráfica de los datos de Davisson y Germer para el número $N(\theta)$ de electrones dispersados en función de θ, para un potencial acelerador V de 54.0 volt. Para ángulos pequeños, la distribución angular $N(\theta)$ se torna grande: la mayor parte de los electrones dispersados son reflejados especularmente (ángulo de incidencia = ángulo de reflexión). Esto carece de importancia, ya que este comportamiento es común tanto al movimiento de corpúsculos como al de ondas. Sin embargo, $N(\theta)$ muestra un pico para un ángulo de 50°, lo que prueba cualitativamente el postulado de De Broglie, *ya que sólo puede explicarse como interferencia constructiva de las ondas dispersadas por los átomos colocados periódicamente en la superficie del cristal.* Es de observarse que no

* Esto se determina a través de medidas del patrón de difracción producido en la dispersión de rayos X, de longitud de onda conocida, por un cristal de Ni. En el capítulo 14 se describirán estas medidas.

www.FreeLibros.me

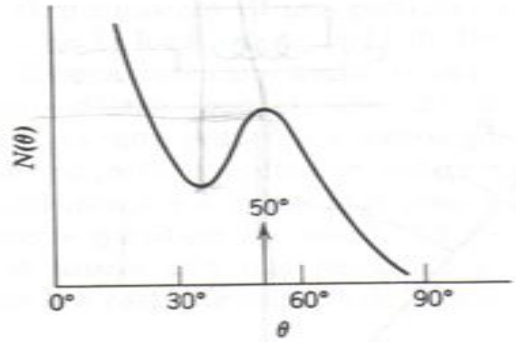

Figura 6-5. La distribución angular de los electrones dispersados por un cristal de níquel. $V = 54.0$ volts.

se trata de un fenómeno de interferencia de las ondas asociadas con dos electrones distintos, sino de las asociadas con un solo electrón y que provienen de varias partes del cristal. Esta conclusión puede demostrarse experimentalmente, empleando un haz de una intensidad tan pequeña que, para todo tiempo, sólo un electrón se encuentre en el aparato; se observa que no varía el patrón de los electrones dispersados.

Los datos de Davisson y Germer muestran que el postulado de De Broglie es también cualitativamente correcto. La longitud de onda de De Broglie para un electrón cuya energía es 54 ev, se obtiene de la ecuación $\lambda = h/p$

$$\lambda = 1.67 \times 10^{-8}\ \text{cm} \equiv 1.67\ \text{A}$$

La longitud de onda de las ondas que interfieren constructivamente se evalúan por la *ecuación de la malla,**

$$n\lambda = d \operatorname{sen} \theta, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{6–15}$$

Si aceptamos que el pico corresponde a una difracción de primer orden ($n = 1$), tenemos

$$\lambda = 2.15 \times 10^{-8}\ \text{cm} \times \operatorname{sen} 50^\circ = 1.65\ \text{A}$$

Los dos valores concuerdan dentro de la precisión, experimental. Se encuentra, asimismo, una concordancia semejante en los datos obtenidos para otros voltajes de aceleración. Se observa un segundo pico ($n = 2$) para voltajes mayores.

En 1928, G. P. Thomson observó efectos de difracción en la transmisión de electrones a través de cristales. Hizo pasar un haz colimado de electrones por una lámina policristalina. El espesor de la lámina era aproximadamente de 10^{-5} cm, y aun así fue necesario que la energía de los electrones fuera de 10^4 ev, de manera que no fuera muy grande la pérdida de energía al atravesar la lámina. Al pasar por los cristales, que se encuentran orientados al azar dentro de la lámina, los electrones encontrarán algunos para los que el

* Consulte cualquier texto elemental de física.

www.FreeLibros.me

conjunto de ángulos de dispersión $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \ldots$ satisfagan una ecuación análoga a la (6–15) aplicable a este caso. Los electrones serán dispersados formando, preferentemente, estos ángulos. Puesto que λ/d es pequeño ($\lambda \simeq 5 \times 10^{-2}$ A) los ángulos de dispersión serán también pequeños; sin embargo, al colocar una placa fotográfica a una cierta distancia detrás de la lámina, se registra una serie de círculos concéntricos correspondientes a los ángulos de dispersión permitidos. En la figura 6–6 se muestran algunos resultados típicos. La fotografía de la izquierda muestra un patrón anular producido por la dispersión de electrones por una capa delgada de cristales de Au; la de la derecha, el patrón observado en la dispersión de radiación electromagnética (rayos X) por una capa delgada de cristales de ZrO_2. Esta

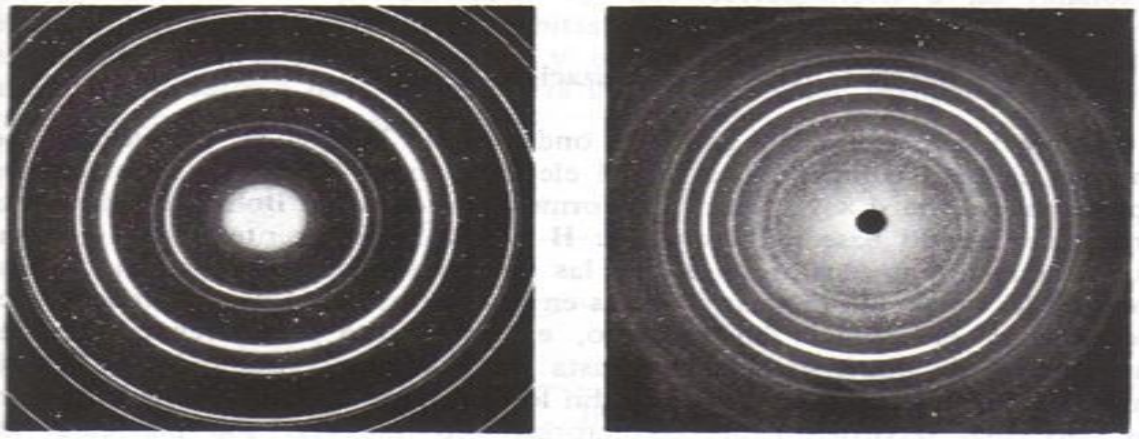

Figura 6-6. Izquierda: el patrón anular producido en la dispersión de los electrones por cristales de oro. Derecha: el patrón anular producido en la dispersión de rayos X por cristales de óxido de zirconio. De acuerdo con U. Fano y L. Fano, *Basic Physics of Atoms and Molecules*, John Wiley and Sons, Nueva York, 1959.

comparación proporciona otra prueba convincente del comportamiento ondulatorio del movimiento de los electrones. Además, los ángulos de dispersión medidos en el patrón anular para los electrones coincide con los calculados con base a la longitud de onda predicha por el postulado de De Broglie.

Varios años después de que se iniciaron los experimentos con electrones, Estermann, Frisch y Stern demostraron la aparición de efectos de difracción al dispersar un haz de átomos de He en la superficie de un cristal de LiF. De un recipiente a una temperatura de 400°K, y a través de un canal que parte del interior del mismo, sale un haz de electrones con una energía cinética promedio de $\overline{E} = \frac{3}{2}kT$, donde k es la constante de Boltzmann. La longitud de onda de De Broglie que corresponde a esta energía es

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2ME}} = \frac{h}{\sqrt{3MkT}}$$

$$= \frac{6.6 \times 10^{-27}}{\sqrt{3 \times 6.7 \times 10^{-24} \times 1.4 \times 10^{-16} \times 4 \times 10^{2}}} \simeq 0.62 \text{ A}$$

www.FreeLibros.me

En un manómetro de presión muy sensible se registraron los átomos dispersados. El patrón obtenido para los átomos de He fue semejante al observado por Davisson y Germer para la dispersión de electrones. Asimismo, la ubicación angular del pico de difracción concordó satisfactoriamente con el que debía esperarse para la longitud de onda predicha por el postulado de De Broglie.

Hemos descrito tres experimentos que verifican tanto la presencia de efectos ondulatorios en el movimiento de las partículas como la longitud de onda predicha por el postulado de De Broglie. Desde entonces numerosos ejemplos de estos efectos se han observado experimentalmente, de modo que la validez del postulado de De Broglie ha sido confirmada más allá de toda duda.

4. Interpretación de la regla de cuantización de Bohr

Hemos visto que la longitud de onda de De Broglie de un electrón de energía cinética comparable a la del electrón en el átomo de hidrógeno es aproximadamente 4×10^{-8} cm. Conforme a la teoría de Bohr, el radio de la órbita del estado base del átomo de H es aproximadamente 0.5×10^{-8} cm. Puesto que $\lambda \gg r$, esperaríamos que las propiedades de propagación ondulatoria de las ondas piloto sean decisivas en la determinación del movimiento del electrón en el átomo. Sin embargo, es importante la diferencia entre el movimiento de una partícula que hasta ahora hemos considerado y el movimiento de un electrón en el átomo. En los ejemplos discutidos anteriormente, las partículas recorrieron sus trayectorias sólo una vez: son partículas no ligadas, y las ondas piloto asociadas deben ser ondas viajeras (nodos en movimiento). Un electrón en un átomo está ligado al núcleo atómico, recorre su órbita repetidamente y, por consiguiente, es de esperarse que sus ondas piloto asociadas sean ondas *estacionarias* (nodos fijos).

La formación de ondas estacionarias es uno de los fenómenos más característicos de la propagación ondulatoria. En 1924, De Broglie mostró que estas propiedades conducían a una interpretación de la misteriosa regla de cuantización para el impulso angular de Bohr. Conforme a la ecuación (5–11), esta regla puede escribirse como

$$mvr = pr = nh/2\pi, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

donde p es el impulso lineal del electrón en una órbita permitida de radio r. Al substituir en esta ecuación a la expresión

$$p = h/\lambda$$

para p en función de la longitud de onda de De Broglie, la ecuación toma la forma

$$hr/\lambda = nh/2\pi$$

o sea

$$2\pi r = n\lambda, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{6–16}$$

www.FreeLibros.me

Entonces, la circunferencia de las órbitas permitidas contiene exactamente un número entero de longitudes de onda de De Broglie. Si pensamos que un electrón pasa repetidamente sobre su órbita, la ecuación (6–16) es precisamente la condición necesaria para que las ondas piloto asociadas con la partícula en un recorrido particular se combinen coherentemente con las ondas piloto asociadas con recorridos anteriores, de manera que se forme una onda estacionaria. Por otra parte, si se viola esta ecuación, en un número grande de recorridos, las ondas piloto interferirán y se cancelará su intensidad promedio. Ya que la intensidad de las ondas piloto es una cierta medida de donde la partícula está ubicada, lo anterior significaría que el electrón no podría encontrarse en esa órbita. En la figura 6–7 se intenta ilustrar las $\Psi_{t=t_0}$, para un tiempo particular t_0, que corresponden a las funciones estacionarias en las tres primeras órbitas de Bohr. Para algún tiempo posterior a t_0 habrá cambiado la magnitud y el signo de estos patrones oscilantes, aunque la ubicación de los nodos será la misma, ya que permanecen fijos los nodos de cualquier onda estacionaria.

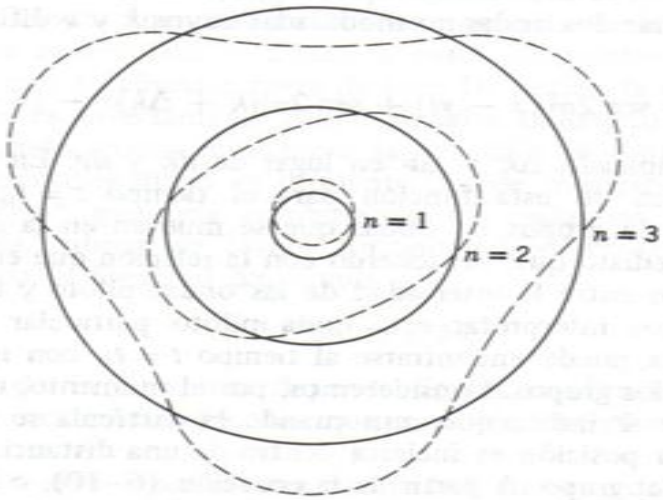

Figura 6-7. Representación esquemática de los patrones de ondas estacionarias que se forman para las tres primeras órbitas permitidas de Bohr.

Puede mostrarse sin dificultad que la necesidad de que *las ondas piloto asociadas con una partícula que efectúa un movimiento periódico sean un conjunto de ondas estacionarias, es equivalente a pedir que el movimiento de esa partícula satisfaga las reglas de cuantización de Wilson y Sommerfeld* (*5–20*). Posteriormente veremos que las propiedades de las ondas estacionarias tienen una importancia decisiva en la teoría de la mecánica cuántica de Schrödinger. Por ejemplo, puede entenderse por qué el movimiento descrito por una onda estacionaria no permite que el electrón emita radiación electromagnética con sólo tomar en cuenta las características, independientes del tiempo, de las ondas asociadas con un electrón en alguno de sus estados permitidos en el átomo.

www.FreeLibros.me

5. El principio de incertidumbre

Una consecuencia inevitable de la descripción de un electrón, que se mueve en una órbita de Bohr, introducida por De Broglie es la imposibilidad de especificar exactamente, y en forma simultánea, la posición del electrón y el vector de su impulso lineal. Esto se debe a que la simetría azimutal del patrón de ondas estacionarias, ilustrado en la figura 6–7 para $t = t_0$, indica que, para un tiempo dado, el electrón puede encontrarse en cualquier punto de la órbita. Esta situación contrasta con la que presenta la descripción corpuscular de Bohr para el movimiento de un electrón atómico, donde es posible una especificación exacta, a un tiempo dado, de la posición e impulso lineal, de la misma manera que es posible en la descripción de Newton del movimiento de un planeta. Esta incertidumbre, para un tiempo dado, en la posición y el impulso de una partícula es una característica general de la descripción de De Broglie para su movimiento en términos de la propagación de sus ondas piloto asociadas.

Considere una partícula libre y su grupo, o grupos, de ondas piloto asociado. Tomemos el caso más simple, descrito en la ecuación (6–9), que se obtiene al combinar dos ondas no moduladas cuyos k y ν difieren ligeramente. Esta es

$$\Psi = \operatorname{sen} 2\pi[kx - \nu t] + \operatorname{sen} 2\pi[(k + \Delta k)x - (\nu + \Delta\nu)t] \qquad (6\text{–}17)$$

donde hemos empleado Δk y $\Delta\nu$ en lugar de dk y $d\nu$. En la figura 6–3 se muestra la gráfica de esta función para el tiempo $t = t_0$. La forma una sucesión infinita de grupos de ondas que se mueven en la dirección positiva del eje x. Es inmediato que, de acuerdo con la relación que en varias ocasiones hemos establecido entre la intensidad de las ondas piloto y la ubicación de la partícula, debemos interpretar esta onda piloto particular diciendo que la partícula asociada puede encontrarse al tiempo $t = t_0$ con igual probabilidad en cualquiera de los grupos. Consideremos, por el momento, un solo grupo. La interpretación de Ψ indica que, aun cuando la partícula se encuentre dentro de este grupo, su posición es incierta dentro de una distancia comparable con la longitud Δx del grupo. A partir de la ecuación (6–10), o de la figura 6–3, obtenemos la siguiente relación entre Δx y la diferencia Δk entre los números de onda de las ondas que la componen:

$$\Delta x\, \Delta k = 1 \qquad (6\text{–}18)$$

Puede encontrarse una relación semejante para el caso considerado en la sección 2, donde un número infinitamente, grande de ondas no moduladas, cuyo número de onda y frecuencia cubren todo el intervalo, se combinan para formar un solo grupo viajero. En la figura 6–8 se representa este grupo para $t = t_0$. Las fases de las ondas no moduladas se ajustan de modo que se encuentran en fase en el centro del grupo, y el valor neto de $\Psi_{t=t_0}$ es grande. Al alejarse del centro, en cualquier sentido, las ondas no moduladas comienzan a estar fuera de fase, ya que sus números de onda son distintos. Más allá de algunos puntos se encuentran totalmente fuera de fase y permanecen así. En

www.FreeLibros.me

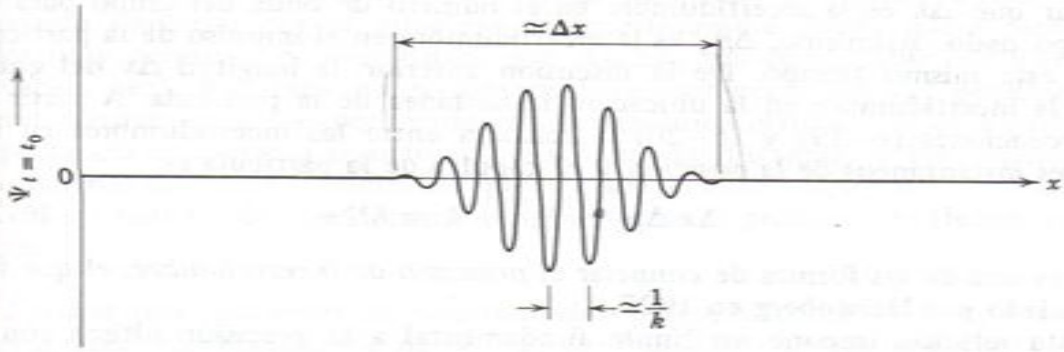

Figura 6-8. Un grupo de ondas piloto.

cualquier parte de estas regiones existen, en promedio, tantas ondas no moduladas con valores positivos como con valores negativos, que se combinan de manera que el valor de $\Psi_{t=t_0}$ es cero para toda x. Es claro que cuanto mayor sea el intervalo que cubran los números de onda de las ondas no moduladas, tanto menor será la distancia entre los puntos en los cuales las ondas se encuentren totalmente fuera de fase. De hecho, la distancia Δx entre estos dos puntos es inversamente proporcional a la longitud de intervalo Δk del número de onda, como lo expresa la ecuación (6–18). Sin embargo, la constante de proporcionalidad es diferente. Puede mostrarse, a partir de un análisis de Fourier,* que una combinación de ondas no moduladas cuyos números de onda cubren en forma continua el intervalo de longitud Δk, formarán un grupo de longitud Δx, donde

$$\Delta x \, \Delta k \simeq 1/2\pi \tag{6–19}$$

El valor exacto de la constante depende de las amplitudes relativas de las diferentes ondas no moduladas, las que también determinan la forma del grupo.

La ecuación (6–19) describe una propiedad que es común a todo movimiento ondulatorio. Consideremos ahora las ondas piloto que gobiernan el movimiento de una partícula a lo largo del eje x. Conforme al postulado de De Broglie.

$$k = 1/\lambda = p_x/h$$

donde p_x es el impulso de la partícula, que se encuentra en la dirección x. De este modo tenemos

$$\Delta k = \Delta p_x/h \tag{6–20}$$

donde Δk es el intervalo cubierto por los números de onda que intervienen en el grupo de ondas piloto cuya longitud, a un tiempo dado, es Δx. Podemos

* Se emplea la "integral de Fourier" para sumar las contribuciones de un número infinito de ondas no moduladas cuyos números de onda difieren infinitesimalmente.

www.FreeLibros.me

pensar que Δk es la incertidumbre en el número de onda del grupo para un tiempo dado. Asimismo, Δp_x es la incertidumbre en el impulso de la partícula para este mismo tiempo. De la discusión anterior, la longitud Δx del grupo dará la incertidumbre en la ubicación instantánea de la partícula. A partir de las ecuaciones (6–19) y (6–20) la relación entre las incertidumbres en los valores instantáneos de la posición y el impulso de la partícula es

$$\Delta x \, \Delta p_x \simeq \hbar, \qquad \hbar \equiv h/2\pi \tag{6–21}$$

Esta es una de las formas de enunciar el *principio de incertidumbre*, el que fue enunciado por Heisenberg en 1927.

Esta relación impone un límite fundamental a la precisión última con la que es posible medir *simultáneamente* la coordenada x de una partícula y su impulso en la dirección x. Puede disminuirse arbitrariamente la incertidumbre en una de estas cantidades sólo si aumenta la incertidumbre en la otra cantidad. Por ejemplo, considere una partícula cuyo grupo de ondas piloto tiene una longitud diez veces menor que el grupo representado en la figura 6–8. En consecuencia, la incertidumbre instantánea en la posición de la partícula es diez veces menor. Por otra parte, la ecuación (6–19) demanda que el intervalo del número de onda asociado con el nuevo grupo aumente por un factor 10. En consecuencia, la incertidumbre en el impulso de la partícula es diez veces mayor y el valor del producto $\Delta x \, \Delta p_x$ no varía. Si pedimos que, para algún instante se conozca la posición exacta, la ecuación (6–21) requiere que en ese tiempo la incertidumbre en el conocimiento del impulso sea infinita. Por otra parte, si para algún instante se conoce exactamente el impulso de la partícula ($\Delta p_x = 0$), en este instante se desconoce completamente la posición ($\Delta x \to \infty$). En la ecuación (6–8) se tiene un ejemplo de este último caso:

$$\Psi = \operatorname{sen} 2\pi(kx - \nu t) \tag{6–22}$$

p_x tiene siempre el valor preciso $p_x = hk$, y para cualquier instante se desconoce absolutamente la posición de la partícula, ya que $\Psi_{t=t_0}$ se extiende desde $-\infty$ hasta $+\infty$.

Debe observarse que el principio de incertidumbre impone un límite inferior al producto $\Delta x \, \Delta p_x$. Esto es, es posible encontrar un grupo de ondas para el cual la relación correspondiente a (6–19) sea $\Delta x \, \Delta k = \gamma$ donde $\gamma > 1/2\pi$. El producto de las incertidumbres instantáneas en la posición y el impulso de la partícula asociada a este grupo será mayor que $\hbar$. Como caso límite, consideremos una partícula cuya onda piloto está dada por la función

$$\Psi = \operatorname{sen} 2\pi[kx - \nu t] + \operatorname{sen} 2\pi[(k + \Delta k)x - (\nu + \Delta\nu)t] \tag{6–23}$$

ecuación (6–9), donde Δk es grande. Para esta partícula $\Delta x \to \infty$, y $\Delta p_x = h \, \Delta k$ también será grande.* Cuando $\Delta x \, \Delta p_x$ es apreciablemente mayor que $\hbar$,

* Aparentemente, el empleo de las funciones (6–22) y (6–23) en estos ejemplos debilita los argumentos del segundo párrafo de la sección 2. En realidad éste no es el caso: considere un haz de partículas alfa de 1 cm de longitud que se dispersa por un átomo. Desde el punto de vista de este átomo, y en términos de distancias del orden de su radio

www.FreeLibros.me

significa que en el experimento no se ha alcanzado el límite inferior en la precisión impuesta por el principio de incertidumbre. Dado que $\hbar$ tiene un valor muy pequeño, es muy difícil que $\Delta x\, \Delta p_x$ sea comparable con $\hbar$ en una medición real. Por esto no se observan las consecuencias del principio de incertidumbre en los experimentos de la mecánica clásica. Por otra parte, su importancia es extrema cuando se consideran las distancias y los impulsos en los sistemas atómicos y nucleares, que son sumamente pequeños.

En un sistema de tres dimensiones, conforme al principio de Heisenberg, se tiene:

Existen tres relaciones de incertidumbre independientes. Si x, y, z son las coordenadas rectangulares y p_x, p_y, p_z los impulsos correspondientes, se tiene

$$\begin{aligned} \Delta x\, \Delta p_x &\gtrsim \hbar \\ \Delta y\, \Delta p_y &\gtrsim \hbar \\ \Delta z\, \Delta p_z &\gtrsim \hbar \end{aligned} \tag{6–24}$$

En el caso de coordenadas angulares, para cada coordenada θ y el correspondiente impulso angular L_θ, la relación de incertidumbre es

$$\Delta\theta\, \Delta L_\theta \gtrsim \hbar \tag{6–25}$$

El símbolo $\gtrsim$ indica que el principio de incertidumbre establece solamente un límite inferior. Observemos, por otra parte, que no existe restricción alguna sobre los productos del tipo $\Delta x\, \Delta p_y$.

Puede entenderse fácilmente la "razón física" para la existencia de un límite en la precisión máxima con la que puede medirse simultáneamente la posición y el impulso de una partícula: la medición del valor de una de estas cantidades perturbará a la partícula de modo que deja incierto el valor de la otra cantidad. En 1928 Bohr imaginó un buen ejemplo de lo anterior. Mediante el dispositivo ilustrado en la figura 6–9 se desea determinar la ubicación instantánea de una partícula. La partícula puede verse por los cuantos de luz que dispersa al ser iluminada. El poder de resolución del microscopio determina la precisión máxima con la que puede ubicarse la partícula. Se sabe que este poder de resolución es aproximadamente $\lambda/\text{sen}\,\alpha$, si λ es la longitud de onda de la luz dispersada y α es el semiángulo subtendido por el objetivo del microscopio; si el poder de resolución es aproximadamente igual a $\lambda/\text{sen}\,\alpha$, se tiene que la precisión de la medida es igual a

$$\Delta x \simeq \frac{\lambda}{\text{sen}\,\alpha}$$

R, se desconocerá completamente la posición x de alguna partícula específica del haz, esto es, $\Delta x \gg R$. Siendo esto así, (6–22) o bien (6–23), dependiendo de la precisión con la que se conozca el impulso, puede ser una buena aproximación en la vecindad del átomo a las ondas piloto asociadas con una partícula del haz. Sin embargo, Δx es, en realidad, igual a 1 cm y no infinita, permaneciendo válidos los argumentos de la sección 2.

www.FreeLibros.me

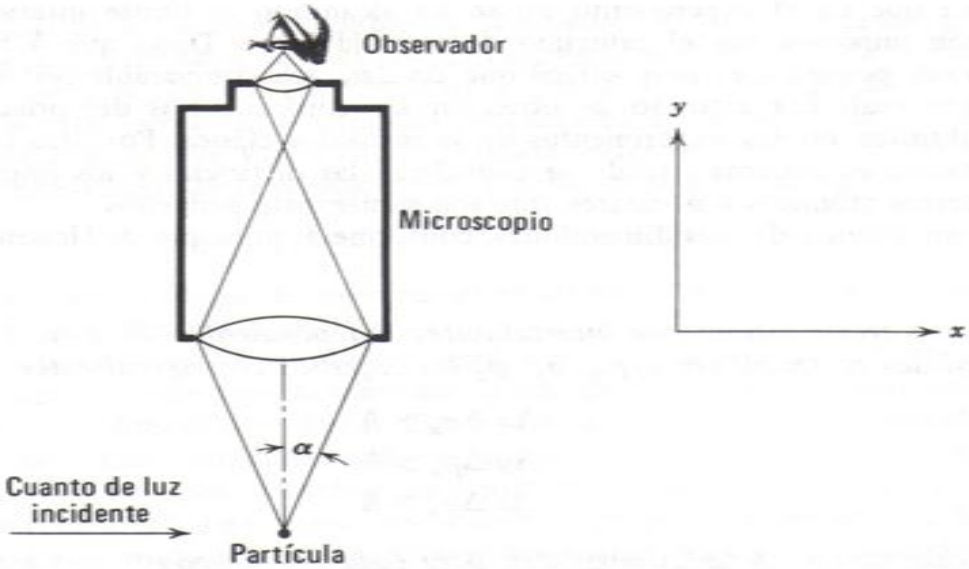

Figura 6-9. Experimento de Bohr con un microscopio.

Supongamos que el observador necesita ver solamente un cuanto para llevar a cabo su medida. El impulso de este cuanto es $p = h/\lambda$. Por otra parte, el cuanto pudo haber sido dispersado con cualquier ángulo comprendido entre $+\alpha$ y $-\alpha$. En consecuencia, la incertidumbre en la componente x del impulso del cuanto después de la dispersión es

$$2p \operatorname{sen} \alpha = \frac{2h \operatorname{sen} \alpha}{\lambda}$$

Puesto que la componente x del impulso del cuanto puede conocerse exactamente antes de la dispersión (no es preciso conocer su coordenada x), la conservación del impulso requiere que la partícula absorba un impulso cuya magnitud Δp_x es incierta en una cantidad igual a la incertidumbre del impulso del cuanto, esto es,

$$\Delta p_x \simeq \frac{2h \operatorname{sen} \alpha}{\lambda}$$

El producto de las incertidumbres en la posición x y en la componente x del impulso de la partícula, en el instante de la medición, es

$$\Delta x \, \Delta p_x \simeq 2h > h$$

Si emplea luz de longitud de onda menor, el observador aumentará la precisión en la medida de la posición. Pero esto aumentará la incertidumbre en el impulso de la partícula.

La situación descrita por el principio de incertidumbre es una consecuencia inmediata de la cuantización de la radiación electromagnética que precisa que

www.FreeLibros.me

por lo menos sea dispersado una "unidad" de luz (un cuanto de impulso $p = h/\lambda$) para poder ver la partícula. Si no existiera esta limitación no existiría, en principio, razón alguna para que el observador no fuera capaz de ver la partícula empleando una iluminación cuyo impulso fuera arbitrariamente pequeño. El cuanto de luz dispersada es el mensajero indispensable entre el instrumento de medida y la partícula. Pero este mensajero perturba la partícula en una forma incontrolable e impredecible. En consecuencia, es imposible, después de la medida, conocer exactamente las coordenadas e impulso de la partícula. La relación $\Delta x\, \Delta p_x \gtrsim \hbar$ afirma que la *constante de Planck es una medida de la magnitud (mínima) de esta perturbación incontrolable.*

A partir de las propiedades matemáticas de las ondas y del postulado de De Broglie, puede darse otra forma al principio de incertidumbre, de la misma manera como la ecuación (6–21) se sigue de (6–19) y (6–20). Mediante un análisis de Fourier puede mostrarse que si un intervalo $\Delta\nu$ de frecuencias intervienen en la composición de un grupo de ondas de longitud Δx y velocidad de grupo g, entonces

$$\Delta\tau\, \Delta\nu \gtrsim 1/2\pi \tag{6–26}$$

donde $\Delta\tau = \Delta x/g$ es el tiempo que el grupo necesita para recorrer la distancia Δx, esto es, $\Delta\tau$ es la duración del pulso de ondas.*

Considere un grupo de ondas piloto de duración $\Delta\tau$. Esta cantidad será una medida de la incertidumbre en el tiempo de paso de la partícula por un punto dado. Por otra parte, el postulado de De Broglie relaciona la frecuencia de las ondas piloto y la energía de la partícula:

$$\nu = E/h$$

En consecuencia

$$\Delta\nu = \Delta E/h \tag{6–27}$$

Una incertidumbre $\Delta\nu$ en la frecuencia de las ondas implica una incertidumbre ΔE en la energía de la partícula asociada, que está relacionada con la incertidumbre en el tiempo de paso de la partícula por un punto, de modo que

$$\Delta\tau\, \Delta E \gtrsim \hbar \tag{6–28}$$

La interpretación dada por Heisenberg a esta relación de incertidumbre es mucho más amplia que la dada anteriormente. Su enunciado es:

* La propiedad del movimiento ondulatorio descrita por la ecuación (6–26) hace necesario el empleo de altas frecuencias en la transmisión de programas de televisión. Las señales enviadas por la estación transmisora consiste de pulsos con una duración $\Delta\tau \sim 10^{-6}$ seg: el intervalo de frecuencias que intervendrían en la formación del pulso sería $\Delta\nu \sim 10^6$ seg^{-1} y sería necesaria toda la banda de radiodifusión ($\nu \simeq 0.5 \times 10^6$ seg^{-1} a $\nu \simeq 1.5 \times 10^6$ seg^{-1}) para acomodar un solo "canal" de televisión. Con las frecuencias empleadas en la transmisión de televisión ($\nu \sim 10^8$ seg^{-1}) es posible acomodar muchos canales en una porción razonable del espectro.

www.FreeLibros.me

Una medida de la energía de una partícula (o de cualquier sistema) efectuada durante el tiempo $\Delta\tau$ será incierta por la cantidad ΔE de modo que $\Delta\tau\ \Delta E \geqslant \hbar$.

En capítulos posteriores discutiremos varios ejemplos en los que se aplica esta relación de incertidumbre.

6. Algunas consecuencias del principio de incertidumbre

Una partícula se mueve libremente a lo largo del eje x; al tiempo $t = 0$ la incertidumbre en su posición es Δx_0. Calculemos cuál es la incertidumbre en la posición en un tiempo posterior t. En virtud de las ecuaciones (6–24), la incertidumbre del impulso de la partícula, en $t = 0$, es $\Delta p_x \sim \hbar/\Delta x_0$. En consecuencia, en este tiempo, la incertidumbre en la velocidad de la partícula es $\Delta v = \Delta p_x/m \sim \hbar/m\,\Delta x_0$ y, por lo tanto, la incertidumbre en la distancia recorrida por la partícula durante el tiempo t será

$$\Delta x = t\,\Delta v \sim \frac{\hbar t}{m\,\Delta x_0} \tag{6–29}$$

Si al tiempo $t = 0$ la partícula está ubicada en el intervalo Δx_0, al medir su coordenada al tiempo t se encontrará dentro del intervalo Δx. Puesto que Δx es inversamente proporcional a Δx_0, cuanto más precisa sea su ubicación inicial tanto menos sabremos de su ubicación final. Además, esta incertidumbre aumenta linealmente con el tiempo.* Cuando se consideran distancias e impulsos suficientemente pequeños de manera que el principio de incertidumbre es importante, el comportamiento del sistema contrasta con el comportamiento descrito por la mecánica clásica.

Si a un tiempo dado se conocen exactamente la posición y el impulso de la partícula, de acuerdo con la mecánica clásica, se sabe exactamente el omportamiento futuro de la partícula. El principio de incertidumbre nos muestra que es imposible lo anterior cuando se trata de distancias o impulsos pequeños en virtud de que es imposible conocer, con la precisión necesaria, las posiciones e impulsos instantáneos de las partículas que forman el sistema. En consecuencia, sólo es posible hacer predicciones sobre el comportamiento *probable* de la partícula, esta idea ya se ha infiltrado en nuestra discusión a través de la interpretación dada a la intensidad de las ondas piloto en un punto dado, como una medida de la probabilidad de encontrar la partícula en ese punto. En el capítulo siguiente formularemos cuantitativamente esta interpretación, donde desarrollaremos una ecuación diferencial (la ecuación de

* Esta afirmación implica que el grupo de ondas piloto asociado con la partícula se difunde al transcurrir el tiempo, de manera que su longitud al tiempo t está dada por la expresión (6–29). Lo anterior es una consecuencia de que las velocidades de fase de las ondas no moduladas están distribuidas dentro de un intervalo Δw, ya que el intervalo que cubren sus números de onda es Δk y sus frecuencias $\Delta \nu$. Puesto que las ondas se mueven con diferente velocidad, no son capaces de mantener las relaciones de fase requeridas para formar el grupo y, al transcurrir el tiempo, este grupo se difunde.

www.FreeLibros.me

Schrödinger) cuyas soluciones son las ondas piloto. Al discutir esta ecuación veremos que puede predecirse exactamente el comportamiento de las ondas piloto y que éstas proporcionan información sólo sobre el comportamiento probable de la partícula asociada.

El principio de incertidumbre nos permite tener una visión profunda en cuanto a la posibilidad de describir el comportamiento de entidades físicas en pequeña escala. También nos auxilia para resolver el conflicto que aparentemente surge de la naturaleza dual, corpúsculo-onda, de estas entidades. Por ejemplo, consideremos un experimento de difracción con dos rendijas; en el detector se empleará el efecto fotoeléctrico. El dispositivo se muestra en la figura 6–10. La fuente emite radiación electromagnética. Al estudiar las distribuciones de energía y tiempo de los electrones emitidos por el fotocátodo, se concluye que la radiación posee aspectos corpusculares. Sin embargo, al contar el número de fotoelectrones emitidos en función de la coordenada y, se observa un patrón periódico (característico al patrón de intensidad producido por las dos rendijas) que obliga a afirmar que la radiación también posee aspectos ondulatorios. Al imaginar que la radiación está compuesta de cuantos cuyo movimiento está gobernado por las propiedades de propagación de ciertas ondas asociadas, se presenta el siguiente problema: si cada cuanto debe pasar por alguna de las rendijas, ¿cómo puede ser influenciado su movimiento, en la región entre las rendijas y el fotocátodo, por la interacción de las ondas asociadas con la rendija por la que no pasó el cuanto?

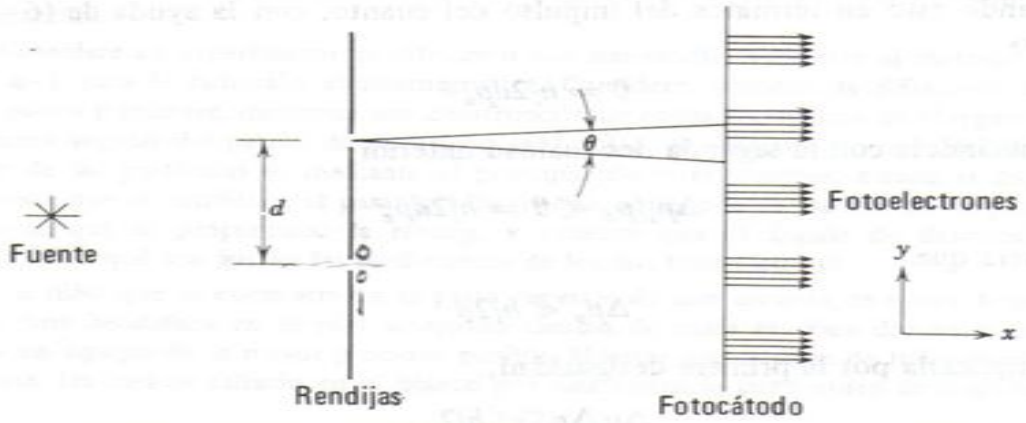

Figura 6-10. Un experimento que ilustra la dualidad partícula-onda.

Analicemos este problema en términos del análisis de Einstein de la transformación de Galileo. La afirmación "un cuanto debe pasar por alguna de las rendijas" sólo tendrá sentido si se toma alguna medida para saber por cuál de las rendijas pasó. Una forma de hacerlo sería colocando algunas partículas pequeñas en las inmediaciones de las rendijas. Al pasar un cuanto por alguna de ellas, golpearía alguna de las partículas y ésta retrocedería. Al observarla, podríamos saber por cuál rendija pasó, siempre que la incertidumbre en la

www.FreeLibros.me

coordenada y de la partícula después de la colisión sea pequeña, comparada con la distancia entre las rendijas, esto es, si

$$\Delta y \ll d$$

Pero cuando el cuanto choca con la partícula intercambia su impulso con ella. La cantidad exacta depende de los detalles de la colisión que ciertamente se desconocen. El intercambio del impulso y es incierto por la cantidad Δp_y. Con el objeto de no destruir el patrón de difracción producido por el paso de un número grande de cuantos, Δp_y debe satisfacer la restricción

$$\Delta p_y/p_x \ll \theta$$

donde θ es el ángulo subtendido desde las rendijas entre un máximo y un mínimo consecutivos y p_x es la componente x del impulso del cuanto. Si no se cumple esta restricción el cuanto podría absorber en el choque una cantidad de impulso que lo haría llegar a un mínimo del patrón de difracción. Podemos suponer que se conoce exactamente la componente y del impulso de la partícula antes de la colisión, ya que no es necesario conocer su posición en ese instante. En consecuencia, Δp_y es igual a la incertidumbre en la componente y del impulso de la partícula después del choque. Se sabe que θ está relacionado con la longitud de onda de la radiación y la distancia entre las rendijas por la ecuación

$$\theta = \lambda/2d$$

Expresando esto en términos del impulso del cuanto, con la ayuda de (6–5), tenemos

$$\theta = h/2dp_x$$

y combinándola con la segunda desigualdad anterior

$$\Delta p_y/p_x \ll \theta = h/2dp_x$$

de manera que

$$\Delta p_y \ll h/2d$$

Al multiplicarla por la primera desigualdad,

$$\Delta y\, \Delta p_y \ll h/2$$

Esta es la condición que deben satisfacer las incertidumbres en la posición y y la componente Δp_y del impulso de la partícula para ser capaz de determinar, sin destruir el patrón de difracción, por cuál de las dos rendijas pasó el cuanto. Pero esta condición viola el principio de incertidumbre. Al investigar cuál es la rendija por la que pasó el cuanto no podremos observar el patrón de difracción. El principio de incertidumbre nos muestra que el problema que nos preocupa es, de hecho, ilusorio. En el capítulo 8 consideraremos otros ejemplos en los que el principio de incertidumbre ayuda a resolver conflictos aparentes entre los aspectos ondulatorios y corpusculares de una entidad.

www.FreeLibros.me

BIBLIOGRAFIA

Bohm, D., *Quantum Theory*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1951.
Bohr, N., *Atomic Physics and Human Knowledge*, John Wiley and Sons, Nueva York, 1958.

EJERCICIOS

1. Sume gráficamente seis ondas no moduladas; todas ellas tienen una amplitud de 1 cm y sus longitudes de onda son de 1.5, 1.6, 1.7, 1.8, 1.9 y 2.0 cm; las fases se ajustan de modo que en $x = 0$, $\Psi(x, t)_{t=t_0} = +1$ cm para todas ellas. Efectúe la suma dentro del intervalo $x = \pm 10$ cm y compare la longitud Δx del grupo que se forma y el intervalo Δk de los números de onda de las ondas que intervienen con la ecuación (6–19). Observe que, cuando el número de componentes es finito, y con una diferencia finita en los números de onda, no puede obtenerse un solo grupo, puesto que existen muchos valores de x para los cuales todas las componentes se encontrarán nuevamente en fase.

2. Encuentre los valores posibles que puede tomar el impulso de la partícula que se trató en el ejercicio 2 del capítulo 5, a partir de los valores para la energía predichos por las reglas de cuantización de Sommerfeld y Wilson. Con estos valores calcule las longitudes de onda posibles para las ondas piloto. Muestre que, salvo para el estado de más baja energía que le corresponde un impulso igual a cero, precisamente en estas longitudes de onda las ondas pueden combinarse y formar ondas estacionarias, como se estableció en la sección 4.

3. Discuta la excepción mencionada en el ejercicio 2 en términos del principio de incertidumbre.

4. Considere un experimento de difracción con una rendija semejante al ilustrado en la figura 6–1 para la radiación electromagnética. Considere, primero, la difracción de las ondas piloto y muestre, mediante una construcción de ondas secundarias de Huygens, que la anchura angular del patrón de difracción es $\theta \sim \lambda/d$. A continuación considere la desviación de las partículas y, mediante el principio de incertidumbre, estime el impulso transversal que se introduce al pasar por la rendija, utilizando la medida de su posición transversal que le proporciona la rendija, y muestre que el ángulo de desviación es $\theta \sim \lambda/d$. ¿Por qué son iguales las predicciones de los dos tratamientos?

5. Un niño que se encuentra en la parte superior de una escalera de altura A intenta golpear una hendidura en el piso arrojando canicas de masa m. Para dar en el blanco emplea un equipo de la mayor precisión posible. Muestre que, a pesar de todo el cuidado que pone, las canicas fallarán en el blanco por una distancia cuyo orden de magnitud es

$$(\hbar/m)^{1/2}(\overset{\frown}{H}/g)^{1/4}$$

donde g es la aceleración debida a la gravedad. Calcule esta distancia empleando valores razonables para A y m.

www.FreeLibros.me

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 7

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

1. Introducción

En este capítulo iniciamos nuestro desarrollo de la teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica. Esta, y su aplicación a varios casos típicos, ocupará nuestra atención en la mayor parte del resto del libro. Además, la discusión de la física atómica y nuclear que sigue a la presentación de la mecánica cuántica estará basada, en su mayor parte, en la teoría de Schrödinger. Por esta razón, nuestro estudio de la teoría, particularmente de los detalles matemáticos, será considerablemente más completo que el que hemos realizado anteriormente. Esto es necesario, ya que frecuentemente es más sencillo pensar en términos de las matemáticas de la mecánica cuántica que en términos de imágenes físicas más o menos alusivas que están representadas por las matemáticas y, por otra parte, las matemáticas son lo suficientemente complicadas que un estudio resumido, podría ocasionar confusión. Sin embargo, como es nuestra costumbre, cuando sea aconsejable estaremos dispuestos a sacrificar rigor en favor de claridad.

Antes de analizar la teoría de Schrödinger debemos mencionar que, casi simultáneamente, Heisenberg desarrolló un enfoque alternativo. En su teoría no se consideran ondas piloto. En su lugar maneja *cantidades dinámicas* tales como x, p_x, E representadas por *matrices*. Los aspectos cuánticos se introducen en la teoría por medio del principio de incertidumbre y se refleja en las condiciones de conmutación sobre las matrices. El principio de incertidumbre es equivalente al postulado de De Broglie. Las teorías de Heisenberg y Schrödinger son idénticas en contenido aunque de forma muy distinta. Debido a que la teoría dc Schrödinger se presta más para un tratamiento introductorio de la teoría, dejaremos a la de Heisenberg fuera de consideración.

2. La ecuación de Schrödinger

El lector aceptará que el postulado de De Broglie es esencialmente correcto. Asimismo, estará convencido de que éste no ofrece una teoría completa del comportamiento de una partícula sino que solamente constituye un primer paso. El postulado afirma que el movimiento de una partícula está gobernado

www.FreeLibros.me

por la propagación de sus ondas piloto asociadas, aunque no dice cómo se propagan estas ondas. Sólo para el caso simple de una partícula libre pudimos aprender algo sobre la propagación de las ondas piloto.* Para tratar el caso de una partícula que se mueve bajo la acción de una fuerza, es necesario tener una ecuación que nos diga cómo se propagan las ondas piloto en estas circunstancias más generales. Además, debemos tener una relación cuantitativa entre las ondas piloto y la partícula asociada; esto es, debemos saber exactamente cómo estas ondas "gobiernan" el movimiento de la partícula. La ecuación de propagación para las ondas piloto, la *ecuación de Schrödinger,* fue desarrollada en 1925, y la relación cuantitativa entre estas ondas y la partícula asociada se desarrolló al año siguiente.

Schrödinger, siguió, aunque con varias excepciones, las ideas de De Broglie. No empleó el pintoresco término de "ondas piloto", sino que tanto a las ondas como a la función matemática $\Psi(x, t)$ que las representa, las denominó *función de onda.* Adoptaremos esta terminología. El cambio más serio consistió en que Schrödinger sólo intentó desarrollar una teoría válida solamente en el intervalo no relativista de velocidades, aunque el postulado de De Broglie era consistente con la teoría de la relatividad, como se vio en la sección 2 del capítulo 6. Schrödinger adoptó las dos ecuaciones de De Broglie

$$\lambda = h/p \tag{7-1}$$

y

$$\nu = E/h \tag{7-2}$$

Por otra parte, no consideró la definición que para E daba De Broglie como la energía relativista total. De la teoría presentada en el capítulo 1 (vea la ecuación 1–22), es claro que, cuando se tiene un potencial V, en el límite no relativista $v/c \to 0$ la expresión para la energía total toma la forma

$$E_{\text{total relativista}} \to p^2/2m_0 + V + m_0c^2$$

En su teoría no relativista, Schrödinger no consideró el término m_0c^2 y tomó para E la definición clásica para la energía total

$$E = p^2/2m + V \tag{7-3}$$

donde $m = m_0$ es la masa en reposo. De la ecuación (7–2) observamos que un cambio en la definición de E cambiará el valor de ν. Recordemos, por otra parte, que los experimentos descritos en capítulos anteriores comprobaban la validez de la ecuación (7–1) aunque no la de la ecuación (7–2). Veremos posteriormente que el valor real de ν carece de importancia en la teoría de Schrödinger. Sin embargo, un punto se debe investigar inmediatamente: aceptando la ecuación (7–3) ¿podremos aun obtener como resultado necesario

* Sabemos que la velocidad de un grupo de ondas piloto asociado con una partícula libre es igual a la velocidad de ésta [vea la ecuación (6–13)] y que el grupo se difunde al correr el tiempo de manera que su longitud Δx es proporcional a t [vea la ecuación (6–29)].

www.FreeLibros.me

que la velocidad de grupo g de la función de onda para una partícula libre sea igual a la velocidad v de esta partícula? , tomemos

$$\nu = E/h = p^2/2mh + V/h$$

y

$$k \equiv 1/\lambda = p/h$$

Para una partícula libre la energía potencial V es una constante (vea posteriormente el número 3), de manera que

$$d\nu = \frac{2p\,dp}{2mh}$$

También tenemos

$$dk = dp/h$$

de donde obtenemos que

$$g = d\nu/dk$$

$$g = \frac{p\,dp}{mh}\frac{h}{dp} = \frac{p}{m} = v$$

Empezaremos nuestro desarrollo de la ecuación de Schrödinger alistando tres requisitos que *a priori* sabemos se deben satisfacer:

1. Debe ser consistente con las ecuaciones (7–1), (7–2) y (7–3).
2. Debe ser lineal en $\Psi(x, t)$. Esto es si $\Psi_1(x, t)$ y $\Psi_2(x, t)$ son soluciones a la ecuación, una combinación lineal de estas funciones $\Psi(x, t) = a_1\Psi_1(x, t) + a_2\Psi_2(x, t)$, también debe ser una solución para cualesquiera valores de a_1 y a_2. Este requisito asegura que podremos sumar funciones de onda para reproducir los fenómenos de interferencia que se observan, por ejemplo, en el experimento de Davisson y Germer. En capítulos anteriores hemos supuesto que se pueden sumar las funciones de onda (vea la ecuación 6–9).
3. En general, la energía potencial es una función de x y t. Cuando $V(x, t) = V_0$ es una constante, el impulso de la partícula debe ser constante ya que $dp/dt = F$ y

$$F = -\frac{\partial V(x, t)}{\partial x} = -\frac{\partial V_0}{\partial x} = 0$$

También en este caso la energía total es constante. Esta es la situación de una partícula cuyos valores de $k = p/h$ y $\nu = E/h$ son constantes, como se discutió en el capítulo anterior. Entonces, es necesario que la ecuación de Schrödinger tenga soluciones de ondas viajeras oscilatorias con número de onda y frecuencia constantes, semejante a las funciones de onda empleadas en ese capítulo.

www.FreeLibros.me

Escribiendo las ecuaciones (7–1) y (7–2) en términos de los parámetros

$$K \equiv 2\pi k, \qquad \omega \equiv 2\pi\nu \tag{7–4}$$

tenemos

$$p = \hbar K, \qquad E = \hbar\omega \tag{7–5}$$

y combinando las ecuaciones (7–3) y (7–5),

$$\hbar^2 K^2/2m + V(x, t) = \hbar\omega \tag{7–6}$$

Para satisfacer el requisito 1, la ecuación de Schrödinger debe ser consistente con la ecuación (7–6).

El requisito 2 exige que cada término de la ecuación sea lineal en $\Psi(x, t)$. En consecuencia, cada término debe contener a $\Psi(x, t)$ o una derivada de $\Psi(x, t)$ como*

$$\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x}, \quad \frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial x^2}, \ldots \quad \text{ó} \quad \frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t}, \quad \frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial t^2}, \ldots$$

La ecuación no puede contener términos independientes de $\Psi(x, t)$, o términos como $[\Psi(x, t)]^2$.

Nos valdremos del requisito 3 para encontrar la forma de la ecuación de Schrödinger. Tomamos una de las funciones de onda $\Psi_f(x, t)$ para la partícula libre y construimos una ecuación consistente con (7–6) que sólo contenga términos en esta función y sus derivadas. Esta ecuación nos dará una ecuación diferencial que tenga como solución la función de onda para la partícula libre cuando $V(x, t) = V_0$ es una constante. Entonces, daremos como postulado que aun cuando el potencial $V(x, t)$ no sea constante, las soluciones de esta ecuación diferencial son las funciones de onda correctas asociadas con la partícula que se mueve bajo el influjo de una fuerza que corresponde a ese potencial.

Consideremos la función de onda más simple para una partícula libre $\Psi_f = \operatorname{sen} 2\pi(kx - \nu t)$, que ya se discutió en el capítulo anterior. En términos de K y ω ésta es

$$\Psi_f = \operatorname{sen}(Kx - \omega t) \tag{7–7}$$

Calculemos algunas de sus derivadas recordando que K y ω son constantes ya que $V(x, t) = V_0$ es constante. Encontramos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Psi_f}{\partial x} &= K\cos(Kx - \omega t), & \frac{\partial^2\Psi_f}{\partial x^2} &= -K^2 \operatorname{sen}(Kx - \omega t) \\ \frac{\partial\Psi_f}{\partial t} &= -\omega\cos(Kx - \omega t), & \frac{\partial^2\Psi_f}{\partial t^2} &= -\omega^2 \operatorname{sen}(Kx - \omega t) \end{aligned} \tag{7–8}$$

* Una derivada de Ψ, tal como $\partial\Psi/\partial x$, es lineal en Ψ ya que si

$$\Psi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2$$

entonces

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}(a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2) = a_1\frac{\partial\Psi_1}{\partial x} + a_2\frac{\partial\Psi_2}{\partial x}$$

www.FreeLibros.me

La ecuación debe ser consistente con

$$\frac{\hbar^2}{2m} K^2 + V_0 = \hbar\omega \tag{7–9}$$

Al derivar dos veces con respecto a x se obtiene el factor K^2. Y al derivar una vez con respecto a t se obtiene el factor ω. Esto sugiere que ensayemos la ecuación

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi_f}{\partial x^2} + V_0 \Psi_f = \beta \frac{\partial \Psi_f}{\partial t} \tag{7–10}$$

donde α y β son constantes que se deben determinar. Insertando (7–7) y (7–8) en esta ecuación, encontramos

$$-\alpha \operatorname{sen}(Kx - \omega t)K^2 + \operatorname{sen}(Kx - \omega t)V_0 = -\beta \cos(Kx - \omega t)\omega \tag{7–11}$$

Aun cuando disponemos de las constantes α y β, es obvio que esta ecuación no concordará con (7–9) para todos los valores posibles de x y t, de manera que hemos fracasado en nuestro intento.

Al observar que en el proceso de derivación el $\operatorname{sen}(Kx - \omega t)$ se transforma en $\cos(Kx - \omega t)$, y viceversa, se sugiere que intentemos nuevamente de construir la ecuación diferencial partiendo de una combinación de dos funciones de la forma (7–7), siendo una de ellas un seno y la otra un coseno. Esto es,

$$\Psi_f = \cos(Kx - \omega t) + \gamma \operatorname{sen}(Kx - \omega t) \tag{7–12}$$

donde γ es una constante que se debe determinar y que nos da una cierta libertad que necesitaremos. Al calcular algunas derivadas encontramos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Psi_f}{\partial x} &= -K \operatorname{sen}(Kx - \omega t) + K\gamma \cos(Kx - \omega t) \\
\frac{\partial^2 \Psi_f}{\partial x^2} &= -K^2 \cos(Kx - \omega t) - K^2\gamma \operatorname{sen}(Kx - \omega t) \\
\frac{\partial \Psi_f}{\partial t} &= \omega \operatorname{sen}(Kx - \omega t) - \omega\gamma \cos(Kx - \omega t)
\end{aligned} \tag{7–13}$$

Suponemos que la forma de la ecuación diferencial está dada por la ecuación (7–10) y si substituimos allí estas derivadas se obtiene

$$\begin{aligned}
-\alpha K^2 \cos(Kx - \omega t) - \alpha K^2\gamma \operatorname{sen}(Kx - \omega t) + V_0 \cos(Kx - \omega t) \\
+ V_0\gamma \operatorname{sen}(Kx - \omega t) = \beta\omega \operatorname{sen}(Kx - \omega t) - \beta\omega\gamma \cos(Kx - \omega t)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&[-\alpha K^2 + V_0 + \beta\omega\gamma] \cos(Kx - \omega t) \\
&\qquad + [-\alpha K^2\gamma + V_0\gamma - \beta\omega] \operatorname{sen}(Kx - \omega t) = 0
\end{aligned}$$

www.FreeLibros.me

Para que esta ecuación sea válida para todos los valores de x y t, se deben cancelar tanto los coeficientes del seno como los del coseno. Esto es

$$-\alpha K^2 + V_0 = -\beta\gamma\omega \tag{7–14}$$

$$-\alpha K^2 + V_0 = \frac{\beta}{\gamma}\omega \tag{7–15}$$

lo que es sumamente estimulante: tenemos que satisfacer tres ecuaciones (7–9), (7–14) y (7–15) con tres constantes libres α, β y γ. Substrayendo (7–15) de (7–14) se tiene

$$\begin{aligned} 0 &= -\beta\gamma\omega - \frac{\beta}{\gamma}\omega \\ \gamma &= -1/\gamma \\ \gamma^2 &= -1 \\ \gamma &= \pm\sqrt{-1} \equiv \pm i \end{aligned} \tag{7–16}$$

y substituyendo en la ecuación (7–14),

$$-\alpha K^2 + V_0 = \mp i\beta\omega$$

Al compararla con la ecuación (7–9) observamos que

$$\begin{aligned} \alpha &= -\hbar^2/2m \\ \mp i\beta = \hbar, \quad \beta &= \mp\hbar/i = \pm i\hbar \end{aligned} \tag{7–17}$$

Existen dos conjuntos de soluciones posibles que dependen del valor que se tome para γ. Ordinariamente se elige $\gamma = +i$. Así, $\beta = +i\hbar$ y la ecuación diferencial (7–10) es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_f}{\partial x^2} + V_0\Psi_f = i\hbar\frac{\partial\Psi_f}{\partial t} \tag{7–18}$$

Esta ecuación es consistente con los tres requisitos *a priori*.

Se ha obtenido la ecuación (7–18) para el caso especial cuando el potencial $V(x, t) = V_0$, partiendo de una función de partícula libre Ψ_f semejante a las empleadas para este caso en el capítulo anterior. Supondremos que, aun cuando $V(x, t)$ no sea constante, la ecuación diferencial que controla la propagación de la función de onda es de la forma (7–18). Esto es, establecemos el *postulado* que la ecuación es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\Psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t} \tag{7–19}$$

Esta es la famosa *ecuación de Schrödinger*.

Es una ecuación de segundo orden en derivadas parciales para Ψ como función de x y t. En muchos aspectos es semejante a otras ecuaciones en

www.FreeLibros.me

derivadas parciales que surgen en la física clásica.* Sin embargo, una de las características de la ecuación de Schrödinger la distingue de las ecuaciones de la física clásica: contiene el número imaginario i. En consecuencia, sus soluciones son necesariamente funciones *complejas*. Ya se nos presentó un caso al ser obligados a tomar la función compleja

$$\Psi_f = \cos(Kx - \omega t) + i \operatorname{sen}(Kx - \omega t) \tag{7-20}$$

para el caso de la partícula libre.

3. Interpretación de la función de onda

La función de onda $\Psi(x, t)$ tiene un carácter inherentemente complejo. No lo sabíamos en el capítulo 6 cuando desarrollamos algunas de las propiedades cualitativas de las funciones de onda de la partícula libre. Sin embargo, cada uno de los argumentos de ese capítulo se pueden reformular substituyendo la expresión "función de onda" por la frase "la parte real de la función de onda".** En cada caso el argumento permanecerá válido y la conclusión será la misma. Recuerde que en la sección 2 del capítulo 6, al discutir la diferencia entre las velocidades de grupo y la de onda, describimos los resultados de una medida hipotética del valor de la función de onda al tiempo t_0 para varios valores de la coordenada x. Esto se hizo para tener algo concreto de que hablar. Si repitiésemos esa discusión, estaríamos ahora suficientemente familiarizados con la idea de una función de onda para considerar innecesario tal artificio. Nos damos cuenta que no existen los instrumentos hipotéticos que medirían el valor de una función de onda, ya que es imposible medir con un instrumento físico y real el valor de una cantidad compleja.

No se debe considerar un punto débil de la teoría de la mecánica cuántica el hecho de que las funciones de onda sean funciones complejas. Esta es, de hecho, una característica deseable, ya que nos impide inmediatamente atribuir a las funciones de onda una existencia física del mismo modo que la tienen las ondas en el agua. Esto es, no debemos intentar contestar, o incluso formular, las preguntas: exactamente ¿qué es lo que ondula? y ¿dónde ondula? Recuerde el lector que la consideración de esas preguntas respecto a la naturaleza de las ondas electromagnéticas llevó a los físicos del siglo XIX al falaz concepto del éter. Puesto que las funciones de onda son complejas, no existe la posibilidad de cometer el mismo error. Por el contrario, es inmediatamente claro que las funciones de onda son instrumentos de cómputo que sólo tienen existencia —o, por lo menos, significado— en el contexto de la teoría de Schrödinger de la que son parte. Este punto es subrayado por el hecho de que en la teoría de Heisenberg nunca aparecen las funciones de onda, aunque en sus resultados finales, esta teoría es equivalente a la de Schrödinger. Estos comentarios no deben dar la idea de que las funciones de onda carecen de interés físico. En ésta y en la sección 8 veremos que la

* Vea la ecuación (7–58) para la propagación de ondas transversales en una cuerda tensa.

** $R(x, t)$, definida por la ecuación (7–22), es la parte real de la función $\Psi(x, t)$.

www.FreeLibros.me

función de onda contiene efectivamente toda la información compatible con el principio de incertidumbre sobre la partícula asociada.

Para obtener esta información debemos relacionar cuantitativamente $\Psi(x, t)$ con las cantidades dinámicas que describen la partícula asociada. Como se ha indicado en el capítulo anterior, debe existir una relación entre una medida de la intensidad de $\Psi(x, t)$ en la región de coordenada x al tiempo t y la probabilidad por unidad de longitud, o *densidad de probabilidad*, $P(x, t)$ de encontrar a la partícula en esa región y en ese instante. Es obvio que $\Psi(x, t)$ no se puede, simplemente, igualar a $P(x, t)$, ya que la densidad de probabilidad es una cantidad real mientras que la función de onda es compleja. Sin embargo, un tipo de asociación fue propuesta en 1926 por Born en la forma de un *postulado:*

Si, al tiempo t, se efectúa una medida para ubicar la partícula asociada con la función de onda $\Psi(x, t)$, entonces la probabilidad $P(x, t)\,dx$ de que el valor de la coordenada se encuentre entre x y $x + dx$ es

$$P(x, t)\,dx = \Psi^*(x, t)\,\Psi(x, t)\,dx \tag{7–21}$$

El símbolo $\Psi^*(x, t)$ es el *complejo conjugado* de $\Psi(x, t)$. Para ilustrar el significado de este término, considere la función compleja

$$\Psi(x, t) = R(x, t) + i\,I(x, t) \tag{7–22}$$

donde $R(x, t)$ y $I(x, t)$ son funciones reales. (Siempre se puede descomponer de esta manera una función compleja.) Así, se *define* el complejo conjugado de esta función como

$$\Psi^*(x, t) = R(x, t) - i\,I(x, t) \tag{7–23}$$

Una función que encontraremos frecuentemente es

$$\Psi(x, t) = e^{i(Kx - \omega t)} \tag{7–24}$$

Esta es una forma conveniente de escribir la función de onda de la partícula libre (7–20) ya que $e^{iz} = \cos z + i \operatorname{sen} z$.* De esta relación y de la definición (7–23) se puede demostrar fácilmente que

$$\Psi^*(x, t) = e^{-i(Kx - \omega t)} \tag{7–25}$$

* Se puede mostrar fácilmente esta igualdad teniendo en cuenta los desarrollos en series de estas funciones

$$e^{iz} = 1 + \frac{(iz)}{1!} + \frac{(iz)^2}{2!} + \frac{(iz)^3}{3!} + \frac{(iz)^4}{4!} + \cdots$$

$$\cos z = 1 - \frac{z^2}{2!} + \frac{z^4}{4!} - \frac{z^6}{6!} + \cdots$$

$$\operatorname{sen} z = z - \frac{z^3}{3!} + \frac{z^5}{5!} - \frac{z^7}{7!} + \cdots$$

www.FreeLibros.me

Calculemos ahora $\Psi^*\Psi$ a partir de las ecuaciones (7–22) y (7–23). Esto es

$$\Psi^*\Psi = (R - iI)(R + iI)$$
$$\Psi^*\Psi = R^2 - i^2 I = R^2 + I^2$$

ya que $i^2 = -1$. Observamos que $\Psi^*\Psi$ *siempre* es una función real y el postulado de Born no es inconsistente al igualar $\Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$ con $P(x, t)$.

Por supuesto que esto no prueba que las dos cantidades deban ser iguales, ya que hay otras funciones de $\Psi(x, t)$, tales como su valor absoluto $|\Psi(x, t)|$, que también son reales. Alguna justificación de que $\Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$ dé la densidad de probabilidad se puede encontrar en el argumento siguiente: considere Ψ y Ψ^* que son, respectivamente, soluciones a la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{7–26}$$

y al complejo conjugado de la ecuación de Schrödinger,*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + V\Psi^* = -i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} \tag{7–26'}$$

Multiplique la ecuación (7–26) por Ψ^* y (7–26′) por Ψ y substráigalas. Esto es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right) = i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)$$

lo que se reduce a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\Psi$$

* Tome el complejo conjugado de cada término de la ecuación (7–26)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right)^* + (V\Psi)^* = \left(i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)^*$$

A partir de la definición (7–23) se puede mostrar fácilmente que el complejo conjugado de un producto es igual al producto de los complejos conjugados de sus factores. Así,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)^*\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right)^* + V^*\Psi^* = (i\hbar)^*\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)^*$$

Conforme a la ecuación (7–23), el omplejo conjugado de una cantidad real, tal como $(-\hbar^2/2m)$ o V, es igual a esa cantidad. El complejo conjugado de una cantidad imaginaria, tal como $(i\hbar)$, es igual al negativo de la cantidad. Además, de (7–23) y de la definición matemática de la derivada, se puede mostrar que el complejo conjugado de la derivada de una función es igual a la derivada del complejo conjugado de la función. Teniendo en cuenta estas propiedades, obtenemos inmediatamente la ecuación (7–26′).

www.FreeLibros.me

y, posteriormente, a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\Psi$$

Al integrar ambos miembros entre x_1 y x_2, encontramos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)dx=i\hbar\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\Psi\,dx$$

lo que es igual a

$$+\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right]_{x_1}^{x_2}=\frac{\partial}{\partial t}\int_{x_1}^{x_2}\Psi^*\Psi\,dx \qquad (7\text{–}27)$$

Sea Ψ la función de onda para la partícula libre (7–24). Entonces

$$\Psi=e^{i(Kx-\omega t)} \quad \text{y} \quad \Psi^*=e^{-i(Kx-\omega t)}$$

Al derivar respecto a x se tiene

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x}=iKe^{i(Kx-\omega t)}=iK\Psi$$

y

$$\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}=-iKe^{-i(Kx-\omega t)}=-iK\Psi^*$$

Substituyendo en la ecuación (7–27), tenemos

$$-\frac{\hbar}{m}\left[K\Psi^*\Psi\right]_{x_1}^{x_2}=\frac{\partial}{\partial t}\int_{x_1}^{x_2}\Psi^*\Psi\,dx$$

De la ecuación (7–5), $\hbar K/m=p/m=v$, donde v es la velocidad de la partícula. En consecuencia,

$$(v\Psi^*\Psi)_{x=x_1}-(v\Psi^*\Psi)_{x=x_2}=\frac{\partial}{\partial t}\int_{x_1}^{x_2}\Psi^*\Psi\,dx \qquad (7\text{–}28)$$

Realmente, esta ecuación no es muy interesante en el caso de una partícula libre, donde $V(x, t)$ es constante, ya que $\Psi^*\Psi=e^{-i(kx-\omega t)}e^{i(kx-\omega t)}=1$, $v=$ constante, y la ecuación se reduce a la identidad $0=0$. Sin embargo, al considerar un caso donde $V(x, t)$ es una función que varía muy lentamente con respecto a x y t (casi una constante), entonces, por lo menos dentro de un intervalo restringido del eje x, la función de onda se puede escribir como

$$\Psi=Ae^{i(Kx-\omega t)}$$

donde A, K y ω son funciones que varían muy lentamente con respecto a x y t. En este caso $\Psi^*\Psi=A^2$ y también v no son constantes, aunque aun

www.FreeLibros.me

obtendremos la ecuación (7–28) ya que podemos ignorar las derivadas de A, K y ω al evaluar $\partial\Psi^*/\partial x$ y $\partial\Psi/\partial x$. Bajo estas circunstancias podemos emplear la ecuación (7–28) para confirmar la identificación de $\Psi^*\Psi$ con la densidad de probabilidad al comparar esta ecuación con la *ecuación de conservación* en una dimensión en el caso de líquidos en movimiento

$$(v\rho)_{x=x_1} - (v\rho)_{x=x_2} = \frac{\partial}{\partial t}\int_{x_1}^{x_2} \rho\, dx \tag{7–29}$$

ó

$$(S)_{x=x_1} - (S)_{x=x_2} = \frac{\partial}{\partial t}\int_{x_1}^{x_2} \rho\, dx \tag{7–29'}$$

En la figura 7–1 se ilustra esquemáticamente esta ecuación. La cantidad ρ es la densidad de masa del líquido y v su velocidad; $v\rho = S$ es el flujo de masa del líquido, que es la masa que pasa por el punto x por unidad de tiempo, de manera que el miembro izquierdo de la ecuación es igual a la masa del líquido que pasa por unidad de tiempo a través de x_1 menos la masa de líquido que pasa por unidad de tiempo a través de x_2. La integral es la masa total de líquido contenida entre x_1 y x_2, de manera que el miembro derecho es precisamente el cambio de masa por unidad de tiempo en esa región. Así, la ecuación establece simplemente que en la región comprendida entre x_1 y x_2 no se genera ni se destruye líquido: se conserva. En el siguiente párrafo mostraremos que se debe aplicar el mismo tipo de ecuación de conservación a la probabilidad en mecánica cuántica. Al comparar las ecuaciones (7–28) y (7–29), veremos que esto será cierto si aceptamos el postulado de Born.

Figura 7-1. Ilustración de la ecuación de conservación en una dimensión.

Se puede encontrar fácilmente por qué la probabilidad se conserva. Considere la integral $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)\, dx$. Esta nos da la probabilidad total de que al tiempo t el valor de la coordenada de la partícula se encuentre entre $-\infty$ y $+\infty$. Es claro que debemos tener que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\, \Psi(x, t)\, dx = 1 \tag{7–30}$$

lo cual deberá ser cierto para todo tiempo t. Así que se debe conservar la probabilidad total. A menos que aceptemos algunas hipótesis muy especiales, esto podrá obtenerse si se conserva la probabilidad en cada región limitada por x_1 y x_2. O sea, debemos tener una ecuación de conservación de la forma (7–29).

www.FreeLibros.me

Antes de abandonar este argumento, obtengamos a partir de él la expresión para el *flujo de probabilidad* $S(x, t)$. Esta cantidad es la probabilidad por unidad de tiempo de que la partícula asociada con la función de onda $\Psi(x, t)$ pase por el punto x. Comparando las ecuaciones (7–28) y (7–29′) vemos que cuando $V(x, t)$ es una función que varía lentamente, $S(x, t)$ es precisamente $v\Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$. Se puede encontrar una expresión para $S(x, t)$ con validez general considerando la ecuación (7–27), que se ha obtenido sin aproximación alguna. Si establecemos el *postulado* de que el flujo de probabilidad es

$$S(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*(x, t)\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x} - \Psi(x, t)\frac{\partial\Psi^*(x, t)}{\partial x}\right] \qquad (7\text{–}31)$$

entonces la ecuación (7–27) se transforma en una ecuación de validez general para la conservación de la probabilidad en la mecánica cuántica. Esto lo consideramos como justificación del postulado. Fácilmente se puede demostar que $S(x, t)$ siempre es real.

4. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

La ecuación de Schrödinger (7–19) es una ecuación en derivadas parciales para Ψ en función de x y t. La técnica normal para resolverla es proponer soluciones que sean el producto de una función de x por una función de t, esto es, soluciones que tengan la forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\,\phi(t) \qquad (7\text{–}32)$$

Veremos que este tipo de soluciones son posibles *si la energía potencial sólo es una función de x*. Veremos que este procedimiento reduce al problema a la solución de dos ecuaciones diferenciales ordinarias.

Al substituir (7–32) en (7–19), suponiendo que $V(x, t) = V(x)$, obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)\,\phi(t) + V(x)\,\psi(x)\,\phi(t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x)\,\phi(t)$$

ahora bien

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)\,\phi(t) = \phi(t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = \phi(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$$

La notación $\partial^2\Psi(x)/\partial x^2$ es inadecuada ya que $\Psi(x)$ es una función de x solamente. De modo semejante tenemos

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x)\,\phi(t) = \psi(x)\frac{d\phi(t)}{dt}$$

y la ecuación se puede escribir como

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\,\psi(x)\,\phi(t) = i\hbar\psi(x)\frac{d\phi(t)}{dt}$$

www.FreeLibros.me

Dividiendo ambos miembros entre $\Psi(x)\phi(t)$, obtenemos

$$\frac{1}{\psi(x)}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\,\psi(x)\right\}=i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt}$$

El miembro izquierdo depende solamente de la variable x y el derecho solamente de la variable t. Ya que x y t son variables independientes, ambos miembros deben ser iguales a una cantidad que no dependa ni de x ni de t de manera que sea cierta la igualdad para todos los valores de las variables. Así, ambos miembros deben ser iguales a la misma *constante C de separación*. Esto es,

$$\frac{1}{\psi(x)}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\,\psi(x)\right\}=C \tag{7–33}$$

y

$$i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt}=C \tag{7–33'}$$

La ecuación (7–33′) es una simple ecuación diferencial de primer orden para ϕ como función t. Su solución es

$$\phi(t)=e^{-iCt/\hbar} \tag{7–34}$$

Podemos verificarla derivando respecto a t y substituyendo en la ecuación (7–33′):

$$\frac{d\phi(t)}{dt}=-\frac{iC}{\hbar}e^{-iCt/\hbar}=-\frac{iC}{\hbar}\phi(t)$$

con lo que se tiene que

$$i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt}=i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\left[-\frac{iC}{\hbar}\phi(t)\right]\equiv C;\quad \text{Q.E.D.}$$

La función $\phi(t)$ en una función compleja oscilatoria del tiempo

$$\phi(t)=e^{-iCt/\hbar}=\cos(Ct/\hbar)-i\,\text{sen}\,(Ct/\hbar)$$

con la frecuencia ν dada por $2\pi\nu=C/\hbar$. O sea, $\nu=C/2\pi\hbar=C/h$. Conforme a las ecuaciones (7–2) y (7–3) debemos tener que $\nu=E/h$, donde E es la energía total de la partícula, ya que $\phi(t)$ contiene la dependencia respecto a t de $\Psi(x,\ t)$. Así, C debe ser igual a la energía total E. Tomando esto en cuenta, podemos escribir la ecuación (7–33) en la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\,\psi(x)=E\psi(x) \tag{7–35}$$

www.FreeLibros.me

Poniendo $C = E$ en la ecuación (7–34), podemos escribir la solución a la ecuación de Schrödinger como

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \tag{7–36}$$

donde $\psi(x)$ es una solución a la ecuación (7–35), la que recibe el nombre de *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.*

Es una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden para ψ en función de x. No contiene números imaginarios y, en consecuencia, sus soluciones $\psi(x)$ no son *necesariamente* funciones complejas.* En la sección 7 mostraremos que esta ecuación está íntimamente relacionada con la ecuación diferencial independiente del tiempo para el movimiento ondulatorio clásico. Las soluciones $\psi(x)$ reciben el nombre de *funciones propias.* Se advierte al lector que recuerde la diferencia entre las funciones propias $\psi(x)$ y las funciones de onda $\Psi(x, t)$, y también la diferencia entre la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y la ecuación de Schrödinger.

5. Cuantización de la energía en la teoría de Schrödinger

La cuantización de la energía aparece en una forma muy natural en la teoría de Schrödinger.

En esta sección presentaremos, con cierto detalle, una descripción cualitativa de cómo es que esto sucede. En el capítulo 8 se presentarán varios ejemplos cuantitativos.

Considere una partícula de masa m que se mueve bajo la influencia de la fuerza $F(x, t)$. La energía potencial asociada a esta fuerza es $V(x, t)$. Ambas están relacionadas por la ecuación

$$F(x, t) = -\frac{\partial V(x, t)}{\partial x} \tag{7–37}$$

Para determinar el movimiento de la partícula a partir de la teoría de Schrödinger, debemos resolver la ecuación de Schrödinger con el potencial $V(x, t)$. Consideremos la clase de problemas cuando el potencial es una función de x solamente. (El caso más complicado de un potencial dependiente del tiempo se discutirá en un capítulo posterior.) Sabemos que cuando el potencial es independiente del tiempo las soluciones tienen la forma $\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$. Ya que en la ecuación (7–34) se ha evaluado $\phi(t)$, el problema

* Por supuesto que, si así los deseamos, pueden ser complejos. La ecuación diferencial es lineal en $\psi(x)$, de manera que siempre podemos tomar una solución que es la suma de una solución real más i veces una segunda solución real, siempre que las dos soluciones correspondan al mismo valor de E, como se muestra en la nota al pie de la página 193. Se puede poner como ejemplo la función (7–24), que es una solución con el potencial $V(x, t) = 0$. Puede escribirse como

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\,\phi(t), \quad \text{donde} \quad \phi(t) = e^{-i\omega t} = e^{-iEt/\hbar}$$

y

$$\psi(x) = e^{iKx} = \cos Kx + i \operatorname{sen} Kx$$

www.FreeLibros.me

de encontrar la solución se reduce al de encontrar las soluciones $\psi(x)$ a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial $V(x)$. Las funciones $\Psi(x, t)$ especifican el comportamiento del sistema a través de los postulados de probabilidad (7–21) y (7–31). La cuantización de la energía se presenta al observar que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene soluciones *aceptables* sólo para ciertos valores de la energía total E.

Para que la función propia $\psi(x)$ sea una solución aceptable, se deberán cumplir las siguientes restricciones para todos los valores de x:

$$\begin{aligned} &1a.\ \psi(x) \textit{ debe ser finita.} && 1b.\ \frac{d\psi(x)}{dx} \textit{ debe ser finita.} \\ &2a.\ \psi(x) \textit{ debe ser continua.} && 2b.\ \frac{d\psi(x)}{dx} \textit{ debe ser continua.} \end{aligned} \tag{7–38}$$

Si $\psi(x)$ o $d\psi(x)/dx$ violaran alguno de los requisitos $1a$ o $1b$, entonces

$$\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar}\,\psi(x) \quad \text{y} \quad \frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x} = e^{-iEt/\hbar}\,\frac{d\psi(x)}{dx}$$

también lo violaría. Esto significa que la densidad de probabilidad

$$P(x, t) = \Psi^*(x, t)\,\Psi(x, t)$$

y/o el flujo de probabilidad

$$S(x, t) = \frac{-i\hbar}{2m}\left[\Psi^*(x, t)\,\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x} - \Psi(x, t)\,\frac{\partial\Psi^*(x, t)}{\partial x}\right]$$

no estarían bien definidos, esto es, no tendrían valores finitos y definidos para todos los valores de la variable x.* Esto no es posible, ya que tanto $P(x, t)$ como $S(x, t)$ describen el comportamiento de una partícula física real y deben estar bien definidas. Para que el requisito $1b$ sea satisfecho debe cumplirse también $2a$. Podemos convencernos de la necesidad de satisfacer $2b$ al considerar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (7–35), la que podemos escribir como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\,[V(x) - E]\,\psi(x) \tag{7–39}$$

Si los valores de $V(x)$, E y $\psi(x)$ son finitos, $d^2\psi(x)/dx^2$ será finita. Esto es lo que pedimos en el requisito $2b$.

Teniendo en mente estas restricciones sobre las formas aceptables para $\psi(x)$, resolvamos mentalmente la ecuación de Schrödinger independiente del

* Todas las funciones propias que manejaremos en los capítulos siguientes serán uniformes, de manera que será automáticamente satisfecho el requisito de que $P(x, t)$ y $S(x, t)$ tengan un valor *definido* para toda x. Sin embargo, será necesario considerar explícitamente este requisito en el caso de las funciones propias del átomo de H tratadas en el capítulo 10.

www.FreeLibros.me

tiempo para una energía potencial $V(x)$ cuya forma se indica en la figura 7–2. Por "resolver mentalmente" queremos decir que nos imaginamos efectuar el mismo tipo de procedimiento de integración que se emplearía para encontrar soluciones a la ecuación diferencial mediante una máquina computadora. Se emplea esta técnica en aquellas situaciones donde no son aplicables los métodos matemáticos normales para obtener una integración explícita de la ecuación diferencial (que presentaremos en los capítulos siguientes) en virtud de la forma que tiene $V(x)$.

Para integrar la ecuación diferencial (7–39) debemos conocer el valor de la energía constante E de la partícula. Pero desconocemos inicialmente E; todo lo que conocemos es la energía potencial $V(x)$. En consecuencia, debemos elegir arbitrariamente el valor de esta constante, substituirlo en la ecuación y ver si la solución correspondiente es aceptable. El valor escogido para E se muestra en la figura 7–2 como una recta horizontal: Energía $= E$. Observamos que, para el valor de E seleccionado, la línea de energía $= V(x)$ corta dos veces a la recta energía $= E$, lo cual divide al eje en tres regiones: $x < x'$, $x' \leqslant x \leqslant x''$, $x > x''$. En las regiones primera y tercera la cantidad $[V(x) - E]$ es positiva; en la segunda, negativa.

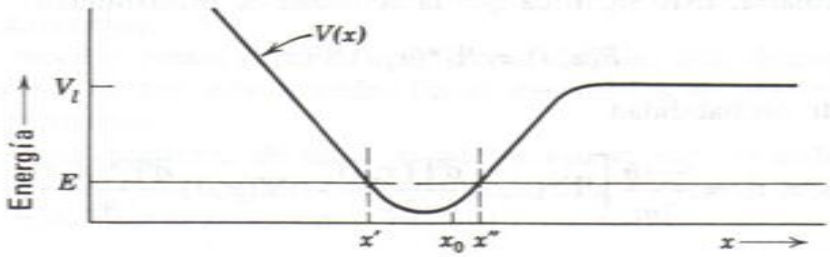

Figura 7-2. Un diagrama de energía que muestra la relación entre las energías potencial y total en un caso típico.

Al integrar la ecuación diferencial en una computadora debemos partir de algún punto x_0, que tomaremos de manera que $x' < x_0 < x''$ y supongamos algún valor para $\psi(x)$ en ese punto. Puesto que la ecuación es lineal en $\psi(x)$, no importa qué valor tomemos para $[\psi(x)]_{x_0}$. Tomemos $[\psi(x)]_{x_0} = 1$.* También debemos suponer algún valor inicial para la derivada $[d\psi(x)/dx]_{x_0}$. Conociendo estos valores, en el punto x_0 podemos encontrar sus valores en un punto cercano x_1 de la manera siguiente: si $(x_1 - x_0)$ es muy pequeño, el valor de $[\psi(x)]_{x_1}$ en x, estará dado por

$$[\psi(x)]_{x_1} - [\psi(x)]_{x_0} = \left[\frac{d\psi(x)}{dx}\right]_{x_0} (x_1 - x_0)$$

* Puesto que $\psi(x)$ no es necesariamente una función compleja, simplificaremos el argumento suponiéndola real.

www.FreeLibros.me

Empleando la ecuación de Schrödinger (7–39) se puede encontrar el valor de $[d\psi(x)/dx]_{x_1}$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi(x)$$

o sea

$$d\left[\frac{d\psi(x)}{dx}\right] = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi(x)\,dx$$

de manera que

$$\left[\frac{d\psi(x)}{dx}\right]_{x_1} - \left[\frac{d\psi(x)}{dx}\right]_{x_0} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]_{x_0}[\psi(x)]_{x_0}(x_1 - x_0)$$

siempre que $(x_1 - x_0)$ sea muy pequeño.

Repitiendo el procedimiento a partir de x_1, podemos encontrar los valores de $\psi(x)$ y $d\psi/dx$ en x_2. Continuando en esta forma, podemos trazar la función y sus derivadas sobre todo el eje x. Observemos ahora que en la región $x' \leqslant x \leqslant x''$, donde $[V(x) - E] < 0$, el signo del cambio en la derivada al aumentar x es opuesto al signo de la función. O sea, la función será cóncava hacia abajo donde la función sea positiva y cóncava hacia arriba donde la función sea negativa. En las regiones $x < x'$ y $x'' < x$ donde $[V(x) - E] > 0$, la función será cóncava hacia arriba si la función es positiva y cóncava hacia abajo si la función es negativa.

En la curva 1 de la figura 7–3 anotamos los resultados del cálculo, partiendo de x_0. Para $x < x''$ la función es cóncava hacia abajo, pero después de x'' se vuelve cóncava hacia arriba. Aunque la derivada es negativa para $x = x''$, pronto se anula y se vuelve positiva. Entonces la función ψ empieza a crecer y las cosas empeoran ya que, conforme a la ecuación de Schrödinger, la rapidez de cambio de la derivada, esto es, $d^2\psi/dx^2$, es proporcional a ψ. En este caso encontramos que $\psi \to \infty$ cuando $x \to \infty$. Ya que éste no es un

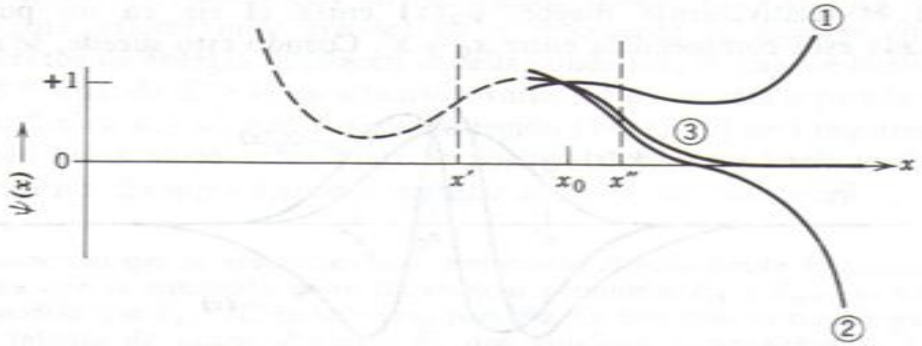

Figura 7-3. Ilustración de tres fracasos al integrar numéricamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en un caso típico.

www.FreeLibros.me

comportamiento aceptable para una función propia, hicimos un segundo intento tratanto de evitar este comportamiento divergente cambiando el valor inicial de la derivada $[d\psi/dx]_{x_0}$. En la curva 2 se indican los resultados. Ciertamente que tampoco tuvimos éxito, ya que ψ es negativa en la región donde la función es cóncava hacia abajo si su valor es negativo. Ahora podemos ver claramente la dificultad que presenta la obtención de una función propia aceptable. Es evidente que, al elegir correctamente el valor de $[d\psi/dx]_{x_0}$ encontraremos una función que tenga un comportamiento como el indicado en la curva 3, que es totalmente aceptable. En este caso ψ se aproxima asintóticamente al eje x. Cuanto más se aproxima a él tanto menor es su concavidad hacia arriba, de manera que no se vuelve hacia arriba.

En la figura 7–3 indicamos también, con una curva punteada, los resultados de extender el cálculo de la función correspondiente a la curva 3 en el sentido en que x disminuye. En virtud de los argumentos anteriores, es de esperarse que, en general, la función diverja para valores de x menores que x_0. Por otra parte, no es posible ajustar $[d\psi/dx]_{x_0}$ puesto que modificaría su comportamiento para valores grandes de x. Tampoco podemos evitar la divergencia tanto para valores mayores como para menores que x_0 uniendo dos funciones con derivada distinta en $x = x_0$, puesto que violaríamos el requisito de que la derivada de una función propia sea continua, dondequiera. Debemos entonces concluir que, para el valor de la energía total E que hemos elegido, no existe una solución aceptable para la ecuación de Shrödinger independiente del tiempo. La relación entre una función ψ y su segunda derivada, impuesta por la ecuación para ese valor de E, es tal que la función debe ser divergente para valores mayores que x_0 o para valores menores, o en ambos casos.

Sin embargo, al repetir este procedimiento para diferentes valores de E_1 encontraremos casualmente un valor E_1 para el que la ecuación de Schrödinger tiene una solución aceptable $\psi_1(x)$. Más aún, en general habrá varios valores de la energía total, E_1, E_2, E_3, . . . , para los que la ecuación de Schrödinger tendrá soluciones aceptables $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, $\psi_3(x)$, ... En la figura 7–4 indicamos la forma de las tres primeras soluciones aceptables. El comportamiento de $\psi_1(x)$ para valores mayores y menores que x es igual al de la curva 3 para $x > x_0$. Para $x > x_0$, el comportamiento de $\psi_2(x)$ es esencialmente el mismo que el de $\psi_1(x)$. Pero, ya que la magnitud de su segunda derivada es relativamente mayor, $\psi_2(x)$ cruza el eje en un punto cuya coordenada está comprendida entre x_0 y x'. Cuando esto sucede, se invierte el

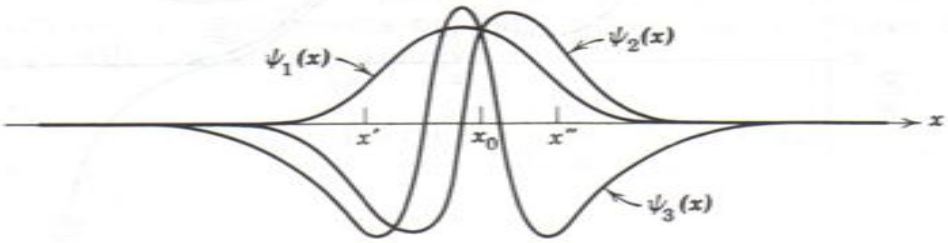

Figura 7-4. Las tres primeras soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en un caso típico.

www.FreeLibros.me

signo de la segunda derivada y la función se hace cóncava hacia arriba. En $x = x'$ el signo de la segunda derivada se invierte de nuevo, y para $x < x$ la función se aproxima asintóticamente al eje.

De la figura 7–4 y de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi(x)$$

podemos ver que la energía permitida E_2 es mayor que la energía permitida E_1. Considere el punto x_0 donde los valores de $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$ son iguales. A partir de la figura 7–4 es claro que, en este punto,

$$\left|\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}\right| > \left|\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}\right|$$

de modo que

$$|V(x) - E_2| > |V(x) - E_1|, \quad \text{y} \quad E_2 > E_1$$

Con argumentos semejantes se puede mostrar que $E_3 > E_2$. Es claro que las cantidades $(E_2 - E_1)$, $(E_3 - E_2)$, etc., no son infinitesimales puesto que la cantidad

$$\left[\left|\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}\right| - \left|\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}\right|\right]_{x_0}$$

no es una cantidad infinitesimal. De este modo, los valores de las energías permitidas se hallan bien separadas, y forman un conjunto *discreto* de energías. Para una partícula cuyo potencial $V(x)$ es independiente del tiempo, existen soluciones aceptables de la ecuación de Schrödinger sólo si la energía total de la partícula es cuantizada para ser precisamente igual a una del conjunto discreto de energías $E_1, E_2, E_3, \ldots$.

Esta afirmación es válida en tanto que la relación entre la energía potencial $V(x)$ y la energía total E sea la mostrada en la figura 7–2; esto es, en tanto existan x' y x'' de manera que $[V(x) - E] > 0$ cuando $x < x'$ o $x > x''$. Para un potencial del tipo mostrado en esa figura, donde $V(x)$ alcanza el valor límite V_l para valores muy grandes de x, solamente un número finito de niveles discretos de energía satisfacen aquella condición, lo cual se ilustra en la figura 7–5.* Cuando $E > V_l$ la situación varía. El eje x está separado en dos regiones: $x < x'$ y $x > x'$. En la segunda región $[V(x) - E]$ será negativa, $\psi(x)$ será cóncava hacia abajo si su valor es positivo y cóncava hacia arriba si su valor es negativo. Siempre tiende a regresar al eje y, en consecuencia, es una

* Los potenciales que se aproximan muy lentamente al valor límite V_l pueden ser la excepción, ya que la separación entre las energías permitidas E_n y E_{n+1} se hace muy pequeña a medida que $V_l - E_n$ se hace muy pequeña. En este caso, es posible que exista un número infinito de valores discretos E_n que satisfagan la condición $V_l > E_n$. Un ejemplo importante se tiene en el potencial de Coulomb $V(r) \propto -r^{-1}$, el que se aproxima muy lentamente al valor límite $V_l = 0$.

www.FreeLibros.me

función oscilatoria. La función $\psi(x)$ no divergirá para valores grandes de x. Ya que siempre podemos hacer que $\psi(x)$ se aproxime asintóticamente al eje para valores negativos de x eligiendo apropiadamente $[d\psi(x)/dx]_{x_0}$, obtendremos funciones propias aceptables para cualquier valor de $E > V_l$. En este caso los valores permitidos para la energía están distribuidos continuamente y se dice, por tanto, que forman un *continuo*. Es claro que si el potencial $V(x)$ alcanza valores límites tanto a la izquierda como a la derecha, los valores permitidos para la energía formarán un continuo para todas las energías mayores que el límite de magnitud menor.

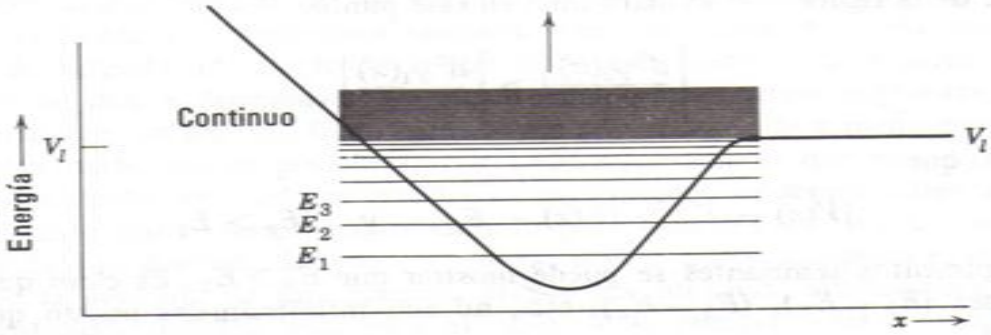

Figura 7-5. Los valores discretos y continuos para los valores permitidos de la energía predichos por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en un caso típico.

Observamos que cuando la relación entre la energía potencial $V(x)$ y la energía total E es tal que clásicamente la partícula estaría *confinada* a una región finita del eje x, para satisfacer el requisito clásico de que la energía E no debe ser menor que la energía potencial $V(x)$, de acuerdo con la teoría de Schrödinger, la energía total de la partícula sólo puede tener un valor de un conjunto *discreto* de energías. Cuando la relación entre $V(x)$ y E es tal que clásicamente la partícula *no estuviera ligada* y pudiera moverse en una región infinita del eje x, conforme a la teoría de Schrödinger, la energía total puede tener cualquier valor y las energías permitidas forman un *continuo*. Todas las conclusiones que hemos obtenido "al resolver mentalmente" la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo las podremos verificar en los capítulos siguientes al integrar explícitamente la ecuación en algunos casos.

6. Propiedades matemáticas de las funciones de onda y de las funciones propias

a) Hemos encontrado que, dado un potencial independiente del tiempo $V(x)$, existen soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger sólo para ciertos valores de la energía, que alistamos en el orden en que aumentan como

$$E_1, E_2, \ldots, E_n, \ldots \tag{7–40}$$

www.FreeLibros.me

Estas energías reciben el nombre de *valores propios* del potencial. Los primeros valores en la lista son discretos. Sin embargo, a menos que el potencial $V(x)$ aumente sin límite tanto a la izquierda como a la derecha, a partir de cierto punto los *valores propios* se vuelven continuos. A cada valor propio le corresponde una *función propia*

$$\psi_1(x), \psi_2(x), \ldots, \psi_n(x), \ldots \tag{7–41}$$

que es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial $V(x)$. Con cada valor propio existe una *función de onda*

$$\Psi_1(x, t), \Psi_2(x, t), \ldots, \Psi_n(x, t), \ldots \tag{7–42}$$

que es una solución a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para el potencial. De acuerdo a la ecuación (7–36), sabemos que estas funciones de onda son

$$e^{-iE_1t/\hbar}\psi_1(x), e^{-iE_2t/\hbar}\psi_2(x), \ldots, e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x), \ldots \tag{7–43}$$

El índice n, que toma valores enteros desde 1 hasta ∞ se emplea para designar un valor propio específico y la función propia correspondiente, recibe el nombre de *número cuántico*.

b) Cada una de las funciones de onda $\Psi_n(x, t)$ es una solución particular a la ecuación de Schrödinger con el potencial $V(x)$. Ya que ésta es lineal en las funciones de onda, cualquier combinación lineal de estas funciones también es una solución. Comprobémoslo en el caso simple

$$\Psi(x, t) = a_1\Psi_1(x, t) + a_2\Psi_2(x, t)$$

Al substituirla en la ecuación de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi - i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = 0$$

tenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(a_1\frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2} + a_2\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2}\right)$$
$$+ V(a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2) - i\hbar\left(a_1\frac{\partial\Psi_1}{\partial t} + a_2\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}\right) = 0$$

o sea

$$a_1\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2} + V\Psi_1 - i\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}\right]$$
$$+ a_2\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2} + V\Psi_2 - i\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}\right] = 0$$

www.FreeLibros.me

Ya que Ψ_1 y Ψ_2 satisfacen la ecuación de Schrödinger, se cancelan ambos paréntesis. Así

$$a_1\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2}+V\Psi_1-i\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}\right]$$
$$+a_2\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2}+V\Psi_2-i\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}\right]\equiv 0; \qquad \text{Q.E.D.}$$

Claramente este argumento puede extenderse para mostrar que la función

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}a_n\Psi_n(x,t) \tag{7–44}$$

donde a_n son constantes arbitrarias, es una solución a la ecuación de Schrödinger. Más aún, es la forma de la solución más general para el potencial $V(x)$.

c) Calculemos la densidad de probabilidad $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ para el caso general de una partícula cuya función de onda asociada es de la forma (7–44). La escribimos como

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}a_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x) \tag{7–45}$$

Su complejo conjugado es

$$\Psi^*(x,t)=\sum_{l=1}^{\infty}a_l^* e^{+iE_lt/\hbar}\psi_l^*(x) \tag{7–45'}$$

Hemos empleado dos letras distintas para el índice de las sumas en las dos series para que recordemos que estas dos series son independientes así como lo son los índices de la suma. Multiplicando estas dos series, obtenemos*

$$\Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)=\sum_n a_n^*a_n\psi_n^*(x)\,\psi_n(x)$$
$$+\sum_{\substack{l\\ l\neq n}}\sum_n a_l^*a_n\psi_l^*(x)\,\psi_n(x)e^{-i(E_n-E_l)t/\hbar} \tag{7–46}$$

* Por si no se tiene particular destreza en el manejo de las series, ilustraremos lo anterior escribiendo algunos términos

$$\begin{aligned}
&[a_1^*e^{iE_1t/\hbar}\psi_1^*+a_2^*e^{iE_2t/\hbar}\psi_2^*+a_3^*e^{iE_3t/\hbar}\psi_3^*+\cdots]\\
&\quad\times[a_1e^{-iE_1t/\hbar}\psi_1+a_2e^{-iE_2t/\hbar}\psi_2+a_3e^{-iE_3t/\hbar}\psi_3+\cdots]\\
&=[a_1^*a_1\psi_1^*\psi_1+a_2^*a_2\psi_2^*\psi_2+a_3^*a_3\psi_3^*\psi_3+\cdots]\\
&\quad+[(a_1^*a_2e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}\psi_1^*\psi_2+a_1^*a_3e^{-i(E_3-E_1)t/\hbar}\psi_1^*\psi_3+\cdots)\\
&\quad+(a_2^*a_1e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}\psi_2^*\psi_1+a_2^*a_3e^{-i(E_3-E_2)t/\hbar}\psi_2^*\psi_3+\cdots)\\
&\quad+(a_3^*a_1e^{-i(E_1-E_3)t/\hbar}\psi_3^*\psi_1+a_3^*a_2e^{-i(E_2-E_3)t/\hbar}\psi_3^*\psi_2+\cdots)\\
&\quad+(\qquad)+(\qquad)+\cdots]
\end{aligned}$$

www.FreeLibros.me

Observamos que, en general, la densidad de probabilidad depende del tiempo. Así, las probabilidades relativas de los diferentes resultados posibles de una medida hecha para localizar la partícula depende del tiempo en la que sea efectuada.

d) Considere el caso especial de una partícula cuya función de onda asociada es una de las funciones propias $\Psi_n(x, t)$ correspondiente al valor propio E_n. Entonces

$$\Psi_n^*(x, t)\,\Psi_n(x, t) = e^{iE_nt/\hbar}e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n^*(x)\,\psi_n(x) = \psi_n^*(x)\,\psi_n(x) \quad (7\text{–}47)$$

y la densidad de probabilidad resulta independiente del tiempo. Aun cuando la función de onda sea dependiente del tiempo, las probabilidades relativas de los resultados posibles de una medida de la ubicación de la partícula no dependen del tiempo en el que se efectúa dicha medida. Se dice que la partícula se encuentra en un estado estacionario, o *estado propio*, del potencial $V(x)$.*

e) Conforme a la ecuación (7–30), la interpretación probabilística de $\Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$ necesita que toda función de onda $\Psi(x, t)$ esté *normalizada*, esto es,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\,\Psi(x, t)\,dx = 1 \quad (7\text{–}48)$$

Es claro que, si la función de onda tiene la forma general

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n\Psi_n(x, t)$$

puede normalizarse, por lo menos a cualquier tiempo, eligiendo adecuadamente las constantes arbitrarias a_n**. Por supuesto que la ecuación (7–48) se debe satisfacer para todo tiempo. Posteriormente deduciremos una relación independiente del tiempo entre las constantes a_n que, al ser satisfecha, hará que $\Psi(x, t)$ esté normalizada para todo tiempo.

f) Considere el caso especial de una partícula cuya función de onda $\Psi(x, t)$ es simplemente una de las funciones de onda de estado propio, $\Psi_n(x, t)$. De la ecuación (7–47) tenemos

$$\Psi^*(x, t)\,\Psi(x, t) = \psi_n^*(x)\,\psi_n(x)$$

de modo que (7–48) requiere que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\,\psi_n(x)\,dx = 1 \quad (7\text{–}49)$$

* En la sección 12 del capítulo 13 se verá que un átomo no emite radiación electromagnética cuando los electrones atómicos se encuentran en un estado propio, ya que su distribución de carga, que es proporcional a $\Psi^*\Psi$, es independiente del tiempo.

** Se presentan ciertas dificultades con la normalización de las funciones de onda de una partícula no ligada, por ejemplo, con la función de onda para la partícula libre $\Psi(x, t) = e^{i(Kx-\omega t)}$. Sin embargo, esas dificultades no son fundamentales y serán discutidas en la primera sección del capítulo siguiente.

www.FreeLibros.me

Las funciones propias también deben estar normalizadas. Esto siempre se puede obtener de la manera siguiente. Suponga que al resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo hemos encontrado una función propia $\psi'_n(x)$. Calculemos la integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi'^*_n(x)\, \psi'_n(x)\, dx = A, \quad \text{una constante.}$$

Entonces, si construimos una nueva función $\psi_n(x) = A^{-1/2}\psi'_n(x)$, observamos que $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = 1$, y que $\psi_n(x)$ es una función propia normalizada.

g) El conjunto de funciones propias de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial $V(x)$ particular posee una propiedad sumamente interesante y útil expresada por la ecuación

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^*(x)\, \psi_n(x)\, dx = 0, \qquad l \neq n \tag{7–50}$$

La integral, sobre todos los valores de x, del producto de una función propia por el complejo conjugado de otra del conjunto siempre es igual a cero. Se dice que, en este caso, las funciones son *ortogonales*. No es difícil demostrar la ecuación (7–50). Considere dos funciones propias distintas $\psi_n(x)$ y $\psi_l(x)$, que sean soluciones a las ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + V\psi_n = E_n\psi_n \tag{7–51}$$

y

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_l}{dx^2} + V\psi_l = E_l\psi_l \tag{7–51'}$$

Tomando el complejo conjugado de la segunda ecuación, obtenemos la ecuación para $\psi_l^*(x)$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_l^*}{dx^2} + V\psi_l^* = E_l\psi_l^* \tag{7–52}$$

ya que, excepto la función propia, todas las demás cantidades son necesariamente reales. Multiplicamos (7–51) por ψ_l^* y (7–52) por ψ_n y, substrayendo, se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi_l^*\frac{d^2\psi_n}{dx^2} - \psi_n\frac{d^2\psi_l^*}{dx^2}\right) + V\psi_l^*\psi_n - V\psi_n\psi_l^* = (E_n - E_l)\psi_l^*\psi_n$$

Integramos respecto a x desde $-\infty$ hasta $+\infty$ y encontramos

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E_l - E_n)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_l^*\psi_n\, dx = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\psi_l^*\frac{d^2\psi_n}{dx^2} - \psi_n\frac{d^2\psi_l^*}{dx^2}\right)dx$$

www.FreeLibros.me

lo que se reduce a

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E_l - E_n)\int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^* \psi_n \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx}\left(\psi_l^* \frac{d\psi_n}{dx} - \psi_n \frac{d\psi_l^*}{dx}\right) dx$$

Integrando el miembro derecho obtenemos

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E_l - E_n)\int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^* \psi_n \, dx = \left[\psi_l^* \frac{d\psi_n}{dx} - \psi_n \frac{d\psi_l^*}{dx}\right]_{-\infty}^{\infty} \tag{7-53}$$

Si los valores E_n y E_l son discretos, las funciones propias correspondientes $\psi_n(x)$ y $\psi_l(x)$ representan una partícula ligada puesto que, como hemos visto en la sección anterior, el valor de estas funciones no sólo permanece finito para valores positivos y negativos grandes de x sino que, en realidad, tienden a cero en esos límites. En este caso, el miembro derecho de la ecuación (7–53) es igual a cero y, puesto que $(E_l - E_n) \neq 0$, se demuestra lo pedido. Si los valores propios se encuentran en el continuo, el valor de las funciones de ondas correspondientes permanecen finitos para valores positivos o negativos muy grandes de x (o para ambos). Sin embargo, aún se pueden arreglar las cosas de suerte que el miembro derecho de la ecuación (7–53) sea igual a cero.* Ocasionalmente $E_n = E_l$ para $l \neq n$, esto es, son iguales los valores propios correspondientes a dos funciones propias distintas. Se dice, entonces, que los dos estados propios se encuentran *degenerados*. (Recuerde la degeneración discutida en el tratamiento de Sommerfeld para el átomo de hidrógeno.) Puede mostrarse fácilmente, sin embargo, que siempre pueden hacerse ortogonales las funciones propias degeneradas.**

h) El hecho de que las funciones propias del conjunto sean normales y ortogonales se puede resumir en la ecuación siguiente:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^*(x)\, \psi_n(x)\, dx = \begin{matrix} 1, & l = n \\ 0, & l \neq n \end{matrix} \tag{7-54}$$

* Esto se encuentra relacionado con la normalización de las funciones de onda para una partícula no ligada, como se discutirá en la primera sección del capítulo siguiente.

** Considere ψ_n y ψ_l, dos soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con el potencial $V(x)$ con el mismo valor propio $E_n = E_l = E$. Entonces, la combinación lineal

$$\psi_a = a_n\psi_n + a_l\psi_l$$

también es una solución. Para verificarlo, substituimos en la ecuación:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}(a_n\psi_n + a_l\psi_l) + V(a_n\psi_n + a_l\psi_l) - E(a_n\psi_n + a_l\psi_l) = 0$$

Pero

$$a_n\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + V\psi_n - E_n\psi_n\right) + a_l\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_l}{dx^2} + V\psi_l - E_l\psi_l\right) \equiv 0; \quad \text{Q.E.D.}$$

(Puede verse inmediatamente de lo anterior que una combinación lineal de funciones pro-

www.FreeLibros.me

Estas propiedades dan lugar a simplificaciones considerables en los cálculos de la mecánica cuántica.

i) Derivemos ahora la relación entre las constantes arbitrarias a_n de la forma general para una función de onda

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \Psi_n(x, t)$$

que se debe satisfacer para que la función de onda esté normalizada:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\, \Psi(x, t)\, dx = 1$$

Integrando ambos miembros de la ecuación (7–46) sobre toda x, tenemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\, \Psi(x, t)\, dx = \sum_n a_n^* a_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\, \psi_n(x)\, dx + \sum_{\substack{l \\ l \neq n}} \sum_n a_l^* a_n e^{-i(E_n - E_l)t/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^*(x)\, \psi_n(x)\, dx$$

Ya que la doble suma sólo contiene términos para los cuales $l \neq n$, debemos aplicar la ecuación (7–54) ($l = n$) a cada integral que aparece en esa suma. Aplicándola también al término que contiene una sola suma, tenemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\, \Psi(x, t)\, dx = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* a_n$$

---

pias no es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo cuando $E_n \neq E_l$.) Tomemos ahora

$$\frac{a_n}{a_l} = -\frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_l\, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n\, dx}$$

Entonces ψ_a es ortogonal a ψ_n puesto que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_a\, dx = a_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n\, dx + a_l \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_l\, dx$$

$$= a_l \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n\, dx \left[\frac{a_n}{a_l} + \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_l\, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n\, dx} \right] = 0$$

Pueden determinarse completamente los valores de a_n y a_l al exigir que ψ_a esté normalizada. Se usa el par de funciones ortogonales degeneradas ψ_n y ψ_a en lugar del par original, ψ_n y ψ_l.

www.FreeLibros.me

La función de onda estará normalizada si

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n^* a_n = 1 \tag{7–55}$$

Ya que esta condición no contiene al tiempo, la función permanecerá siempre normalizada.

j) Considere la función de onda general $\Psi(x, t)$ que es una solución a la ecuación de Schrödinger para el potencial $V(x)$. Si conocemos la forma de esta función para un tiempo particular, por ejemplo para $t = 0$, entonces es fácil, por lo menos formalmente, calcular explícitamente la función a cualquier otro tiempo t. Para $t = 0$ escribimos la función de onda $\Psi(x, t)$ como la suma de las funciones de estado propio $\Psi_n(x, t)$ de la ecuación de Schrödinger para el potencial $V(x)$. Esto es, tomamos la ecuación (7–44), en la forma que tiene en (7–45), al tiempo $t = 0$. Se obtiene que

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x) \tag{7–56}$$

(Puede pensarse que es un tipo de análisis de Fourier generalizado.) Multiplicando ambos miembros por el complejo conjugado de una de las funciones propias, e integrando sobre toda x,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^*(x)\, \Psi(x, 0)\, dx = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^*(x)\, \psi_n(x)\, dx$$

De la ecuación (7–54) observamos que cada término de la suma será igual a cero excepto para $n = 1$, que será igual a uno. Se tiene, entonces,

$$a_l = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^*(x)\, \Psi(x, 0)\, dx$$

Esto nos da el valor constante de a_l. Puede calcularse la constante a_n substituyendo l por n. Además, el valor de la integral definida no depende de lo que llamamos variable de integración. Al reemplazar x por x' se tiene

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x')\, \Psi(x', 0)\, dx'$$

Para evaluar la función de onda $\Psi(x, t)$ en un tiempo arbitrario t, insertamos estos valores de a_n en la ecuación (7–45) y obtenemos

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x')\, \Psi(x', 0)\, dx' \right] e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x) \tag{7–57}$$

7. La teoría clásica de las ondas transversales en una cuerda tensa

En esta sección desarrollaremos la teoría clásica de las ondas transversales en una cuerda tensa. En cada una de las etapas la compararemos y contras-

www.FreeLibros.me

taremos con la teoría ondulatoria de la mecánica cuántica que hemos desarrollado en secciones anteriores. Como veremos, las propiedades matemáticas de estas dos teorías son a menudo semejantes. En consecuencia, podremos ilustrar el significado de gran parte de la teoría de la mecánica cuántica en términos de los fenómenos familiares descritos por la teoría ondulatoria clásica.

Considere una cuerda tensa. Si se desplaza hacia abajo, este desplazamiento se propagará en la cuerda de una manera característica a una onda en movimiento. La propagación de esta onda se puede describir completamente por la función de onda $\Psi(x, t)$, cuyo valor es igual al desplazamiento transversal al tiempo t del punto de coordenada x. Observemos que en la teoría clásica la función de onda es una función real, mensurable, con una interpretación física inmediata. La función de onda en la mecánica cuántica es una función compleja y, en consecuencia, no es mensurable. Además, existe una interpretación física sólo para el producto de la función de onda por su complejo conjugado.

Para discutir la propagación tanto de las ondas clásicas como las de la mecánica cuántica necesitamos conocer la ecuación diferencial que obedecen estas funciones de onda. No se puede derivar la ecuación ondulatoria cuántica a partir de la física clásica y se obtiene, esencialmente, a partir de un postulado. La ecuación para la onda clásica se puede derivar directamente de las leyes de Newton de la siguiente manera.

Considere un pequeño elemento de la cuerda cuyos extremos tienen las coordenadas x y $x + dx$. En la figura 7–6 mostramos ese elemento al tiempo t cuando el desplazamiento pasa por x. También se puede pensar que la figura es parte de una gráfica de la función $\Psi(x, t)$ en términos de x al tiempo t. Supongamos ahora que $\theta \ll 1$. Nuestra ecuación clásica para la onda se aplicará sólo a aquellas ondas sobre la cuerda que tengan una amplitud pequeña. Si $\theta \ll 1$

$$\operatorname{sen}\theta = \tan\theta = \theta$$

$$\cos\theta = 1$$

La longitud del elemento de la cuerda es dx

y la tensión T es una constante.

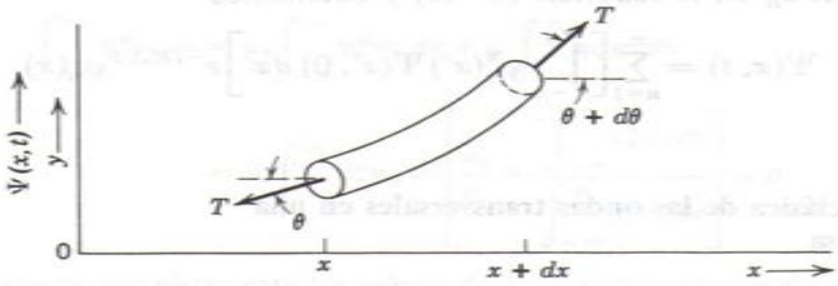

Figura 7-6. Aspecto que tiene un segmento de una cuerda cuando una onda transversal está pasando.

www.FreeLibros.me

La fuerza neta sobre el elemento en la dirección x será

$$T\cos(\theta + d\theta) - T\cos\theta = T - T = 0$$

y la fuerza neta en la dirección y,

$$T\,\mathrm{sen}\,(\theta + d\theta) - T\,\mathrm{sen}\,\theta = T(\theta + d\theta) - T\theta = T\,d\theta$$

Ahora bien, $\theta = \tan\theta = \partial\Psi(x, t)/\partial x$, que es la derivada de la función $\Psi(x, t)$ respecto a x, evaluada en el punto x al tiempo t. Así,

$$d\theta = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x}\,dx$$

que es el cambio en la derivada, por unidad de cambio en x, multiplicado por el cambio en x. En consecuencia

$$T\,d\theta = T\frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial x^2}\,dx$$

Conforme a las leyes de Newton, esta fuerza neta en la dirección y será igual a la masa del elemento de la cuerda por la aceleración en la dirección y. La masa es $\rho\,dx$, donde ρ es la masa por unidad de longitud de la cuerda. Puesto que es cero la fuerza neta en la dirección x, el elemento se moverá sólo en la dirección y con la aceleración $\partial^2\Psi(x, t)/\partial t^2$. En consecuencia se tiene,

$$T\frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial x^2}\,dx = \rho\frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial t^2}\,dx$$

o bien

$$\frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\rho}{T}\frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial t^2} \tag{7–58}$$

Esta es la ecuación clásica para la onda. Gobierna la propagación de ondas, de pequeña amplitud, en una cuerda. Esencialmente, la misma ecuación gobierna la propagación de ondas electromagnéticas, de amplitud arbitraria, a través del espacio. La ecuación clásica para la onda relaciona la segunda derivada espacial de $\Psi(x, t)$ con su segunda derivada temporal. Todas las constantes en la ecuación son reales. La ecuación en la mecánica cuántica para la onda,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\,\Psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t}$$

relaciona la segunda derivada espacial de $\Psi(x, t)$ con su primera derivada temporal y con la función misma. En esta ecuación algunas de las constantes son reales y otras imaginarias. Sin embargo, son muy semejantes los métodos para resolver estas ecuaciones en derivadas parciales. Consideremos un ejemplo de la solución de la ecuación clásica para las ondas.

www.FreeLibros.me

Una cuerda de longitud a que se encuentra a la tensión T tiene fijos ambos extremos. Inicialmente se le imprime un desplazamiento arbitrario, de amplitud pequeña y, al dejarla libre, se desea conocer su movimiento. Debemos resolver la ecuación de modo que

$$\Psi(x, t) = 0, \qquad \text{para } x = \pm\, a/2, \text{ para toda } t \tag{7–59}$$

que establece que están fijos los extremos de la cuerda. Condiciones semejantes se tienen para la función en la mecánica cuántica cuando describe el movimiento de una partícula confinada a cierta región del espacio. Esta función siempre tiende a cero para valores muy grandes, positivos y negativos, de la coordenada x.

En este problema, es apropiado buscar soluciones de la forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\,\phi(t)$$

y substituyéndola en la ecuación (7–58), se obtiene

$$\phi(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{\rho}{T}\,\psi(x)\frac{d^2\phi(t)}{dt^2}$$

Dividiendo ambos miembros entre $\psi(x)\phi(t)$,

$$\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{\rho}{T}\frac{1}{\phi(t)}\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = -K^2$$

Ya que x y t son variables independientes, ambos miembros de la ecuación deben ser iguales a la misma constante de separación, que tomamos igual a $-K^2$. Así tenemos dos ecuaciones diferenciales de segundo orden

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + K^2\psi(x) = 0 \tag{7–60}$$

y

$$\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} + K^2\frac{T}{\rho}\,\phi(t) = 0 \tag{7–61}$$

Considere la ecuación (7–60), que es de forma idéntica a la ecuación de Schrödinger para el caso $V(x) = 0$.* La solución general a esta ecuación es

$$\psi(x) = A \operatorname{sen} Kx + B \cos Kx \tag{7–62}$$

* La analogía es aún más marcada si consideramos una cuerda cuya densidad por unidad de longitud $\rho(x)$ es una función de x, obtendremos una ecuación de forma idéntica a la que tiene la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con el potencial $V(x)$.

www.FreeLibros.me

donde A y B son constantes arbitrarias. Para verificar que es una solución, calculemos

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = AK\cos Kx - BK\,\text{sen}\,Kx$$

y

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -AK^2\,\text{sen}\,Kx - BK^2\cos Kx = -K^2\psi(x)$$

y al substituirlas en la ecuación (7–60), obtenemos

$$-K^2\psi(x) + K^2\psi(x) \equiv 0; \quad \text{Q.E.D.}$$

Para determinar los valores permitidos para la constante de separación, aplicamos las condiciones (7–59):

$$\Psi(\pm a/2, t) = \psi(\pm a/2)\,\phi(t) = 0, \qquad \text{para toda } t.$$

de manera que

$$\psi(\pm a/2) = 0 \tag{7–63}$$

Tenemos entonces

$$A\,\text{sen}\,\frac{Ka}{2} + B\cos\frac{Ka}{2} = 0$$

y

$$-A\,\text{sen}\,\frac{Ka}{2} + B\cos\frac{Ka}{2} = 0$$

Substrayendo y sumando

$$A\,\text{sen}\,\frac{Ka}{2} = 0$$

$$B\cos\frac{Ka}{2} = 0$$

Ambas ecuaciones se deben satisfacer.

No hay valor de K que cancele simultáneamente a sen $(Ka/2)$ y cos $(Ka/2)$. Sin embargo, se pueden satisfacer estas ecuaciones al elegir K de manera que cos $(Ka/2)$ sea igual a cero y tomando $A = 0$, o al elegir K de manera que sen $(Ka/2)$ sea igual a cero y tomando $B = 0$. Esto es, tomamos

$$A = 0;\ \cos\frac{Ka}{2} = 0, \quad \text{que implica} \quad \frac{Ka}{2} = \frac{n\pi}{2} \quad \text{con } n = 1, 3, 5, \ldots$$

o bien (7–64)

$$B = 0;\ \text{sen}\,\frac{Ka}{2} = 0, \quad \text{que implica} \quad \frac{Ka}{2} = \frac{n\pi}{2} \quad \text{con } n = 2, 4, 6, \ldots.$$

www.FreeLibros.me

Existen entonces dos clases de soluciones. Para la *primera clase*

$$\psi_n(x) = B \cos \frac{n\pi x}{a}, \qquad n = 1, 3, 5, \ldots$$

y para la *segunda clase* (7–65)

$$\psi_n(x) = A \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a}, \qquad n = 2, 4, 6, \ldots$$

Estas son las funciones propias para una cuerda de longitud a cuyos extremos se encuentran fijos. En la figura 7–7 se muestra la gráfica de las tres primeras funciones propias. Observe la semejanza esencial entre estas funciones y las tres funciones propias cuánticas para una partícula confinada, cuya gráfica está en la figura 7–4. Pero su significado físico es distinto. En la teoría clásica, $\psi_n(x)$ da la dependencia espacial de la amplitud de la vibración; en la teoría cuántica, $\psi_n^*(x)\psi_n(x)$ da la dependencia espacial de la ubicación probable de la partícula asociada.

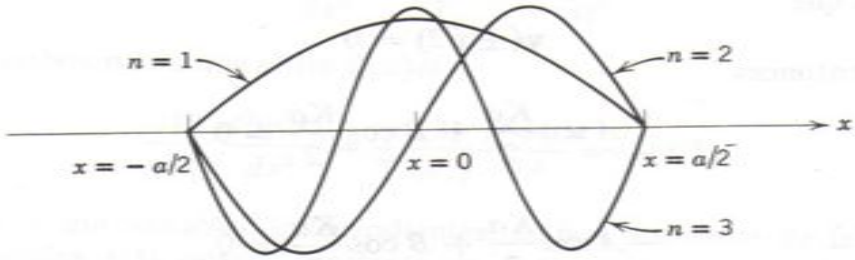

Figura 7-7. Las tres primeras funciones propias para una cuerda cuyos extremos se encuentran fijos.

Considere ahora la ecuación (7–61). Al compararla con las ecuaciones (7–60) y (7–62), es claro que su solución general es de la forma

$$\phi(t) = \alpha \operatorname{sen}(K\sqrt{T/\rho}\, t) + \beta \cos(K\sqrt{T/\rho}\, t) \tag{7–66}$$

donde α y β son constantes arbitrarias. Al elegir apropiadamente el origen del tiempo, podemos hacer $\alpha = 0$ y simplificar la ecuación (7–66):

$$\phi(t) = \beta \cos(K\sqrt{T/\rho}\, t) \tag{7–66'}$$

Ya que la ecuación (7–61) no encierra constantes complejas, tiene una solución real (7–66′). En la ecuación correspondiente al caso cuántico (7–33′), aparece el número imaginario i y su solución (7–34) es necesariamente compleja.

Combinando las ecuaciones (7–59), (7–64), (7–65) y (7–66′), se obtienen las funciones de onda para una cuerda de longitud a, densidad por unidad de longitud ρ, tensión T, y con ambos extremos fijos:

$$\Psi_n(x, t) = a_n \cos(2\pi\nu_n t)\, \psi_n(x) \tag{7–67}$$

www.FreeLibros.me

donde

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \cos \dfrac{n\pi x}{a}, & n = 1, 3, 5, \ldots \\ \operatorname{sen} \dfrac{n\pi x}{a}, & n = 2, 4, 6, \ldots \end{cases}$$

y

$$\nu_n = \frac{K}{2\pi}\sqrt{\frac{T}{\rho}} = \frac{n}{2a}\sqrt{\frac{T}{\rho}}$$

Las a_n son constantes arbitrarias y las ν_n son las frecuencias de vibración de la cuerda. Este conjunto discreto de frecuencias está constituido por los tonos "fundamental", "segundo armónico", "tercer armónico", etc., producido por todo instrumento de cuerdas. En la teoría clásica la frecuencia está cuantizada; en la cuántica, la energía está cuantizada y relacionada con la frecuencia por la ecuación $E = h\nu$.

Una diferencia interesante entre las dos teorías es que en la clásica no se requiere que las funciones satisfagan la condición de normalización (7–48): la integral $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx$ puede tomar cualquier valor, ya que las constantes a_n, que determinan la amplitud de las vibraciones, pueden tomar cualquier valor que no sea muy grande de manera que se viole la restricción $\theta \ll 1$. Sin embargo, las funciones propias de la teoría clásica de una cuerda en vibración son ortogonales. La relación de ortogonalidad es

$$\int_{-a/2}^{a/2} \psi_l(x)\, \psi_n(x)\, dx = 0, \qquad l \neq n \tag{7–68}$$

Esta es equivalente a la ecuación (7–50) ya que, en este caso, el valor de x está comprendido entre $-a/2$ y $+a/2$, y $\psi_l^*(x) = \psi_l(x)$. El lector deberá verificar la ecuación (7–68) evaluando algunas de las integrales.

La forma general de la función clásica para la onda es una combinación lineal arbitraria de las funciones (7–67), esto es,

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(2\pi\nu_n t)\, \psi_n(x) \tag{7–69}$$

Generalmente, la forma de la dependencia respecto a x de la función $\Psi(x, t)$, en un tiempo dado t, depende del valor de t. Esta situación es análoga a la descrita por la ecuación (7–46). Sin embargo, si hacemos vibrar la cuerda dando a cada segmento un desplazamiento inicial cuya magnitud esté dada por alguna de las funciones propias, la forma de la dependencia de $\Psi(x, t)$ respecto a x será independiente del tiempo. Por ejemplo, si al tiempo $t = 0$ le damos a la cuerda un desplazamiento de la forma $\Psi(x, 0) = C \cos(\pi x/a)$, en la ecuación (7–69) tendremos

$$C \cos \frac{\pi x}{a} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x)$$

www.FreeLibros.me

En este caso $a_n = 0$, $n \neq 1$ y $a_1 = C$. Puesto que las a_n no dependen del tiempo, la función de onda estará dada por

$$\Psi(x, t) = C \cos\left(2\pi \frac{1}{2a}\sqrt{\frac{T}{\rho}}\, t\right) \cos\frac{\pi x}{a}$$

para todo tiempo. Esta situación es análoga a la del estado propio en la mecánica cuántica.

Considere una cuerda que en $t = 0$ se le da un desplazamiento distinto al de una función propia; pulsemos la cuerda en su centro, por ejemplo, de modo que $\Psi(x, 0) = (a/2 - |x|)\delta/(a/2)$, como se muestra en la figura 7–8. Para determinar el movimiento subsiguiente de la cuerda, calculamos los coeficientes a_n a partir del desplazamiento inicial. Para $t = 0$, la ecuación (7–69) tiene la forma

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n\, \psi_n(x) \tag{7–70}$$

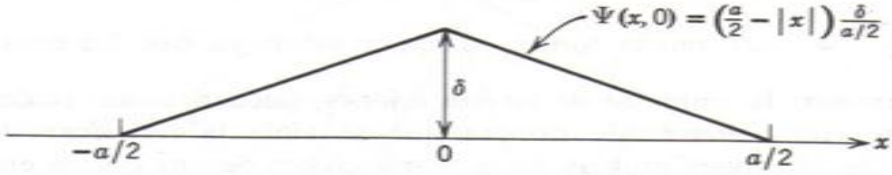

Figura 7-8. Una cuerda pulsada en su centro.

Para calcular alguna de las constantes, a_l, por ejemplo, multiplicamos ambos miembros de esta ecuación por $\psi_l(x)$ e integramos sobre todo el intervalo de variación de x, o sea,

$$\int_{-a/2}^{a/2} \psi_l(x)\, \Psi(x, 0)\, dx = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_{-a/2}^{a/2} \psi_l(x)\, \psi_n(x)\, dx$$

En virtud de la condición de ortogonalidad (7–68), salvo para $n = l$, se cancelan todos los términos de la suma. En consecuencia,

$$a_l = \frac{\displaystyle\int_{-a/2}^{a/2} \psi_l(x)\, \Psi(x, 0)\, dx}{\displaystyle\int_{-a/2}^{a/2} [\psi_l(x)]^2\, dx} \tag{7–71}$$

que es igual a

$$a_l = \frac{\displaystyle\int_{-a/2}^{a/2} \psi_l(x)\left(\frac{a}{2} - |x|\right)\frac{\delta}{a/2}\, dx}{\displaystyle\int_{-a/2}^{a/2} [\psi_l(x)]^2\, dx}$$

www.FreeLibros.me

Calculando las funciones propias a partir de la ecuación (7–67) y evaluando las integrales,

$$a_n = \begin{matrix} 8\delta/\pi^2 n^2, & n = 1, 3, 5, \ldots \\ 0, & n = 2, 4, 6, \ldots \end{matrix}$$

donde hemos reemplazado l por n. En virtud de la simetría de $\Psi(x, 0)$, sólo para n non son distintos de cero los coeficientes en la serie (7–70). La serie es

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1,3,5,\ldots} \frac{8\delta}{\pi^2 n^2} \psi_n(x)$$

y en virtud de (7–67)

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1,3,5,\ldots} \frac{8\delta}{\pi^2 n^2} \cos \frac{n\pi x}{a}$$

Los coeficientes de las funciones coseno decrecen rápidamente al aumentar n y la serie converge rápidamente. Se puede obtener una buena aproximación a $\Psi(x, 0)$ tomando sólo algunos de los primeros términos de la serie. Esto se ilustra en la figura 7–9, donde se muestra la gráfica de los tres primeros términos de la serie, su suma y también la función

$$\Psi(x, 0) = \left(\frac{a}{2} - |x|\right)\frac{\delta}{a/2}$$

a la cual converge la serie.

Lo que hemos hecho es escribir el desplazamiento inicial $\Psi(x, 0)$ en términos de una serie de funciones propias $\psi_n(x)$. [Puesto que sucede que $\psi_n(x)$ son senos y cosenos, lo anterior equivale a hacer un análisis de Fourier de $\Psi(x, 0)$.] Esto nos permite calcular el desplazamiento de la cuerda en

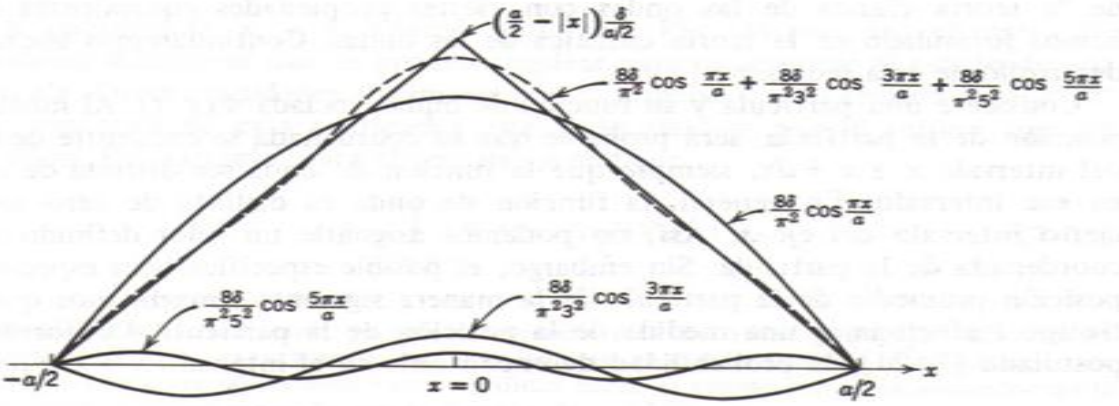

Figura 7-9. Ilustración del análisis de Fourier de una cuerda pulsada en su centro.

www.FreeLibros.me

cualquier tiempo, insertando simplemente en la forma general para la función de onda (7–69) los valores de a_n que se han calculado. Esto es,

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1,3,5,\ldots} \frac{8\delta}{\pi^2 n^2} \cos(2\pi\nu_n t) \cos\frac{n\pi x}{a}$$

Puede obtenerse una buena aproximación para $\Psi(x, t)$ tomando sólo algunos de los primeros términos de la serie. Consideremos el significado físico de esta serie. En $t = 0$ hacemos que vibren simultáneamente diferentes estados propios. En el transcurso del tiempo, estos estados propios vibran independientemente uno de otro con su frecuencia característica ν_n. En cualquier tiempo se puede obtener el desplazamiento neto en x, sumando los desplazamientos de cada uno de esos estados en x.

Empleando la expresión general (7–71) para las a_n, podemos encontrar la solución general al problema de una cuerda que vibra con sus extremos fijos como resultado de un desplazamiento inicial $\Psi(x, 0)$ arbitrario. La solución es

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\int_{-a/2}^{a/2} \psi_n(x')\,\Psi(x', 0)\,dx'}{\int_{-a/2}^{a/2} [\psi_n(x')]^2\,dx'} \cos(2\pi\nu_n t)\,\psi_n(x)$$

Esta ecuación es análoga a la (7–57), mediante la cual se calcula la función cuántica para una partícula que se mueve en un cierto potencial en términos de la forma inicial de la función de onda.

8. Valores esperados y operadores diferenciales

En la sección anterior comparamos algunas de las propiedades matemáticas de la teoría clásica de las ondas con ciertas propiedades equivalentes que hemos formulado en la teoría cuántica de las ondas. Continuaremos ahora el desarrollo de esta teoría.

Considere una partícula y su función de onda asociada $\Psi(x, t)$. Al medir la posición de la partícula, será probable que su coordenada se encuentre dentro del intervalo x a $x + dx$, siempre que la función de onda sea distinta de cero en ese intervalo. En general, la función de onda es distinta de cero sobre cierto intervalo del eje x. Así, no podemos asignarle un valor definido a la coordenada de la partícula. Sin embargo, es posible especificar una especie de posición promedio de la partícula de la manera siguiente. Imaginemos que al tiempo t efectuamos una medida de la posición de la partícula. Conforme al postulado (7–21), la probabilidad de encontrarla en el intervalo x a $x + dx$ es

$$P(x, t)\,dx = \Psi^*(x, t)\,\Psi(x, t)\,dx \qquad (7\text{–}72)$$

www.FreeLibros.me

Repetimos esta medida varias veces, siempre en el mismo valor de t, y registramos los valores de x.* Podemos tomar el promedio de los valores observados para caracterizar la posición de la partícula al instante t. Este valor, que lo designaremos por $\bar{x}$, es el *valor esperado* de la coordenada x de la partícula al tiempo t. Obviamente,

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} xP(x, t)\, dx$$

El integrando es el valor de la coordenada x con un factor de peso, que es la probabilidad de que se observe este valor de la coordenada. Al integrar se obtiene el promedio de los valores observados. De (7–72) esta expresión toma la forma**

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\, x\Psi(x, t)\, dx \tag{7–73}$$

Puede verse que una expresión parecida a (7–73) sería apropiada para calcular el valor esperado de cualquier función de x. Esto es

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\, x^2\Psi(x, t)\, dx$$

y

$$\overline{f(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) f(x) \Psi(x, t)\, dx$$

donde $f(x)$ es una función arbitraria de x. Aun para una función que depende explícitamente del tiempo, como la energía potencial $V(x, t)$, se puede escribir

$$\overline{V(x, t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\, V(x, t)\, \Psi(x, t)\, dx \tag{7–74}$$

ya que las medidas que se efectúan para evaluar $V(x, t)$ se hacen en un mismo tiempo t, de modo que todavía son válidos los argumentos del párrafo anterior.

La coordenada x y la energía potencial $V(x, t)$ son dos ejemplos de *cantidades dinámicas* que se pueden emplear para caracterizar el estado de una partícula. Otras cantidades dinámicas son el impulso p y la energía total E. El valor esperado de esas cantidades está dado siempre por el mismo tipo de expresión. Por ejemplo, para el impulso p se tiene

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\, p\Psi(x, t)\, dx \tag{7–75}$$

* Podemos visualizar esto, ya sea efectuando medidas sobre partículas idénticas en ambientes idénticos, encontrando cada partícula en el estado asociado con la función de onda $\Psi(x, t)$ ya sea efectuando varias medidas sobre la misma partícula, encontrando la partícula en el estado asociado con la función de onda $\Psi(x, t)$.

** Los términos del integrando se escriben en este orden para que haya simetría con otra notación que emplearemos posteriormente.

www.FreeLibros.me

Para calcular la integral en la ecuación (7–75), se debe expresar el integrando $\Psi^*(x, t)p\Psi(x, t)$ en términos de las variables x y t. En un problema clásico, siempre se puede expresar p en términos de las variables x y/o t después que el problema se ha resuelto. Por ejemplo, si una partícula cuyo potencial es independiente del tiempo, su impulso lineal p se puede expresar como una función de x ya que, una vez resuelto el problema clásico, se le conoce precisamente en cada punto de la trayectoria. Pero esto no se puede hacer en el caso cuántico, ya que el principio de incertidumbre establece que p y x no se pueden conocer simultáneamente con toda precisión. Debemos encontrar algún otro modo de expresar el integrando en términos de x y t.

Se puede encontrar una clave al considerar la función de onda para la partícula libre (7–24),

$$\Psi(x, t) = e^{i(Kx-\omega t)}$$

Al derivar respecto a x se tiene

$$\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x} = iKe^{i(Kx-\omega t)} = iK\Psi(x, t)$$

Ya que $K = p/\hbar$,

$$\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x} = i\frac{p}{\hbar}\Psi(x, t)$$

lo que se puede escribir también como

$$p[\Psi(x, t)] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}[\Psi(x, t)]$$

Esto indica que existe una relación entre la cantidad dinámica p y el *operador* $-i\hbar\,\partial/\partial x$. Una relación semejante existe entre la energía E y el operador $i\hbar\,\partial/\partial t$. Al derivar con respecto al tiempo t la función de onda para la partícula libre que tiene

$$\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t} = -i\omega e^{i(Kx-\omega t)} = -i\omega\Psi(x, t)$$

Ya que $\omega = E/\hbar$, esto se puede escribir como

$$E[\Psi(x, t)] = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[\Psi(x, t)]$$

Esta asociación se aplica no solamente en el caso de la función de onda para la partícula libre. Es posible mostrarlo de diferentes maneras. Presentaremos la que parece más convincente. Considere la ecuación (7–3) que define la energía total E:

$$p^2/2m + V(x, t) = E$$

www.FreeLibros.me

Reemplacemos las cantidades dinámicas p y E por sus operadores asociados. Tenemos

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + V(x, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

ó

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{7–76}$$

Esto es una ecuación en operadores. Para obtener una ecuación diferencial, aplicamos la ecuación sobre la igualdad

$$\Psi(x, t) = \Psi(x, t)$$

y obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\,\Psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t}$$

Esta es precisamente la ecuación de Schrödinger (7–19). Observamos que establecer el *postulado de las relaciones*

$$\begin{aligned} p &\leftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \\ E &\leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \end{aligned} \tag{7–77}$$

es equivalente a establecer el postulado de la ecuación de Schrödinger. Este es esencialmente el procedimiento originalmente seguido por Schrödinger. Proporciona un método poderoso para obtener la ecuación de Schrödinger en situaciones más complicadas que las discutidas en este capítulo. Lo aplicaremos en el capítulo 10 para obtener la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones y, también, cuando se consideran varias partículas.

Aplicando (7–77) en la ecuación (7–75) para el valor esperado del impulso lineal,

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x, t)\,p\Psi(x, t)\,dx$$

se tiene

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x, t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x, t)\,dx$$

o bien

$$\bar{p} = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x, t)\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x}\,dx \tag{7–78}$$

www.FreeLibros.me

Hemos obtenido una expresión que se puede evaluar inmediatamente si se conoce $\Psi(x, t)$.* De manera semejante, podemos evaluar el valor esperado de la energía de la manera siguiente

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\, E\, \Psi(x, t)\, dx$$

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(x, t)\, dx$$

$$\bar{E} = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}\, dx \qquad (7\text{–}79)$$

De la ecuación (7–76), también se puede escribir

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \Psi(x, t)\, dx$$

En general, podemos obtener el valor esperado de cualquier cantidad dinámica, esto es, una cantidad que es función de x, p y, posiblemente, t, evaluando la integral

$$\overline{f(x, p, t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\, f_{\text{op}}\left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, t \right) \Psi(x, t)\, dx \qquad (7\text{–}80)$$

donde el operador $f_{\text{op}}(x, -i\hbar\, \partial/\partial x, t)$ se obtiene de la función $f(x, p, t)$, que especifica la cantidad dinámica, reemplazando p por $-i\hbar\, \partial/\partial x$.**

Observamos de la función de onda $\Psi(x, t)$ contiene mayor información que la densidad de probabilidad

$$P(x, t) = \Psi^*(x, t)\, \Psi(x, t)$$

* Ahora vemos la razón del ordenamiento de los términos del integrando de $\bar{p}$. No sería posible escribir

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x}\, dx$$

ya que carecería de significado. Tampoco sería posible escribir

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t)\, dx = -i\hbar\, [\Psi^*(x, t) \Psi(x, t)]_{-\infty}^{\infty}$$

ya que sería idénticamente igual a cero.

** Vea el ejercicio 8 al final del capítulo.

www.FreeLibros.me

y que el flujo de probabilidad

$$S(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*(x, t)\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x} - \Psi(x, t)\frac{\partial\Psi^*(x, t)}{\partial x}\right]$$

A través de la ecuación (7–80), la función de onda puede dar también el valor esperado de la coordenada x, de la energía potencial $V(x, t)$, del impulso lineal p, de la energía total E y, en general, de cualquier cantidad dinámica $f(x, p, t)$. Más aún, la función de onda contiene toda la información que, teniendo en cuenta el principio de incertidumbre, deseamos tener de la partícula asociada con esa función de onda.

Calculemos el valor esperado de la energía total $\bar{E}$ de una partícula cuya función tiene la forma general

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n\Psi_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-iE_n t/\hbar}\,\psi_n(x) \tag{7–81}$$

Conforme a la ecuación (7–79),

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) i\hbar\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t}\,dx$$

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} a_l^* e^{iE_l t/\hbar}\,\psi_l^*(x) i\hbar \sum_{n=1}^{\infty} a_n\left(-\frac{iE_n}{\hbar}\right)e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x)\,dx$$

$$\bar{E} = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{l=1}^{\infty} E_n a_l^* a_n e^{i(E_l - E_n)t/\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^*(x)\,\psi_n(x)\,dx$$

De la ecuación (7–54) observamos que la integral es igual a cero excepto para $l = n$, cuando la integral es igual a la unidad. A la suma sobre l contribuye sólo el término $l = n$:

$$\bar{E} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n a_n^* a_n e^{i(E_n - E_n)t/\hbar}$$

o sea,

$$\bar{E} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n a_n^* a_n \tag{7–82}$$

Ya que la energía total de la partícula está cuantizada y sólo puede ser igual a alguno de los valores propios E_n, cualquier medida de esta cantidad será igual a alguno de estos valores. Sin embargo, puesto que la función de onda (7–81) es la suma de varias funciones de onda $\Psi_n(x, t)$, correspondiendo a cada una un valor propio diferente, cualquiera de estos valores puede ser resultado de la medida. Así, es claro que podemos interpretar la ecuación (7–82) diciendo que *la cantidad $a_n^* a_n$ es igual a la probabilidad de que al efectuar una medida*

www.FreeLibros.me

de la energía su valor sea igual a E_n, esto es, igual a la probabilidad de que la partícula se encuentre en el estado propio n. Entonces, esta ecuación dará el promedio de los valores que se encuentran en un número grande de medidas de la energía de la partícula cuyo estado está descrito por la función de onda (7–81), que es la definición del valor esperado de la energía de la partícula. En general, $\bar{E}$ no será igual a alguno de los valores propios. Sin embargo, si se sabe que la partícula se encuentra en algún estado propio $\Psi_k(x, t)$, por ejemplo, en la ecuación (7–81), se tendrá $a_k = 1$ y $a_n = 0$ para $n \neq k$. En este caso, de la ecuación (7–82) se tiene que $\bar{E} = E_k$, como sería de esperarse.

9. El límite clásico de la mecánica cuántica

Considere una partícula cuyo potencial es $V(x, t)$. Cuando las distancias e impulsos característicos que describen el movimiento de la partícula son tan grandes que se puede ignorar el principio de incertidumbre, las predicciones de la mecánica cuántica coinciden con las leyes de Newton, como lo probaremos a continuación:*

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V(x, t)}{\partial x} \tag{7–83}$$

donde

$$p = m\frac{dx}{dt}$$

Tal prueba fue enunciada por Ehrenfest en 1927. Esta es mucho más compleja que mostrar que las leyes de la mecánica relativista se aproximan a las de la mecánica de Newton cuando las velocidades características son pequeñas en comparación con la velocidad de la luz. A pesar de esto, es de la mayor importancia estar seguro que la mecánica cuántica concuerda con la clásica en el límite apropiado.

En el capítulo 6 discutimos que, cuando son grandes las distancias y los impulsos característicos, es posible asociar a la partícula una función de onda $\Psi(x, t)$ en la forma de un grupo que implica una incertidumbre en esas cantidades, que siempre serán relativamente pequeñas. El valor esperado de x para una función de onda arbitraria $\Psi(x, t)$ es

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi \, dx$$

Calculando la derivada respecto al tiempo de esta cantidad obtenemos

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} x \Psi \right) dx$$

* La primera ecuación es, simplemente, $dp/dt = F$, donde F es la fuerza. Vea la ecuación (7–37).

www.FreeLibros.me

De (7–26) y (7–26′) se pueden obtener los valores de $\partial\Psi/\partial t$ y $\partial\Psi^*/\partial t$:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\Psi^* x\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi\right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + V\Psi^*\right)x\Psi\right]dx$$

Se cancelan los términos que contienen V, de manera que

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\Psi^* x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}x\Psi\right)dx$$

Aislando el segundo término e integrando por partes se tiene

$$\int_{-\infty}^{\infty}\underbrace{x\Psi}_{u}\underbrace{\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}dx}_{dv} = \left[\underbrace{x\Psi}_{u}\underbrace{\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}}_{v}\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\underbrace{\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}}_{v}\underbrace{\frac{\partial(x\Psi)}{\partial x}dx}_{du}$$

Ya que Ψ es un grupo cuya extensión espacial es limitada, para que la incertidumbre en la coordenada x sea relativamente pequeña tanto la función como sus derivadas tenderán a cero cuando $x \to \pm\infty$. En consecuencia, el término integrado será igual a cero, esto es,

$$\int_{-\infty}^{\infty}x\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}dx = -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial(x\Psi)}{\partial x}\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}dx$$

Integrando nuevamente por partes

$$\int_{-\infty}^{\infty}x\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}dx = -\left[\frac{\partial(x\Psi)}{\partial x}\Psi^*\right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial^2(x\Psi)}{\partial x^2}dx$$

lo que se reduce a

$$\int_{-\infty}^{\infty}x\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}dx = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial^2(x\Psi)}{\partial x^2}dx$$

y substituyendo en la ecuación para $d\bar{x}/dt$ se tiene

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\left[x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2(x\Psi)}{\partial x^2}\right]dx$$

El paréntesis en la integral se puede escribir como

$$\begin{aligned} x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2(x\Psi)}{\partial x^2} &= x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x}\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \Psi\right) \\ &= x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi}{\partial x} \\ &= -2\frac{\partial\Psi}{\partial x} \end{aligned}$$

www.FreeLibros.me

y, en consecuencia

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\, dx$$

Conforme a la ecuación (7–78), el valor esperado del impulso de la partícula es

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\, dx \tag{7–84}$$

de manera que

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{\bar{p}}{m}$$

o sea

$$\bar{p} = m\frac{d\bar{x}}{dt} \tag{7–85}$$

Calculemos a continuación la derivada de $\bar{p}$ con respecto al tiempo. Derivando la ecuación (7–84), tenemos

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x\, \partial t} \right) dx$$

De la ecuación de Schrödinger substituimos $\partial\Psi/\partial t$ y $\partial\Psi^*/\partial t$

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} \right) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \left(V\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial (V\Psi)}{\partial x} \right) dx$$

y, en consecuencia,

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) dx - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial V}{\partial x}\Psi\, dx$$

Integrando el primer término del miembro derecho, tenemos

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial V}{\partial x}\Psi\, dx$$

www.FreeLibros.me

Este término se cancela en virtud del comportamiento cuando $x \to \pm\infty$. Así

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = -\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(\frac{\partial V}{\partial x}\right) \Psi \, dx \tag{7-86}$$

Ahora bien, $\partial V/\partial x \equiv \partial V(x, t)\partial x$ es alguna función de x y t. En consecuencia, al comparar la ecuación (7–86) con la ecuación general para el valor esperado de una cantidad dinámica (7–80), observamos que

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = -\overline{\frac{\partial V(x, t)}{\partial x}} \tag{7-87}$$

donde $\overline{\partial V(x, t)/\partial x}$ es el valor esperado de la derivada espacial de la energía potencial.

Las ecuaciones (7–85) y (7–87) son idénticas a las leyes de Newton (7–83), excepto que se refieren a los valores esperados. Cuando las distancias y los impulsos que describen el movimiento de la partícula son muy grandes en comparación con las incertidumbres en estas cantidades, todas las cantidades dinámicas tienen valores precisos y no es necesario distinguir entre $\bar{x}$ y x, $\bar{p}$ y p, o $\overline{\partial V/\partial x}$ y $\partial V/\partial x$. Entonces las ecuaciones que hemos derivado de la teoría de la mecánica cuántica se pueden identificar completamente con las ecuaciones de la mecánica de Newton: la mecánica cuántica concuerda con la de Newton en aquel límite donde el principio de incertidumbre carece de importancia. Por otra parte, en el siguiente capítulo veremos que, fuera de este límite, la mecánica cuántica predice varios fenómenos sumamente interesantes que no tienen análogo en la mecánica de Newton.

BIBLIOGRAFIA

Bohm, D., *Quantum Theory*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1951.

Pauling, L., y E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

Schiff, L. I., *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

Sherwin, C. W., *Introduction to Quantum Mechanics*, Henry Holt and Co., Nueva York, 1959.

EJERCICIOS

1. Muestre que siempre es real el flujo de probabilidad (7–31). *Nota:* una cantidad real es igual a su compleja conjugada.

2. Considere una partícula de masa m en el estado de mínima energía E_1 del potencial

$$V(x) = \begin{matrix} V_0, & x < -a/2, \quad x > a/2 \\ 0, & -a/2 < x < a/2 \end{matrix}$$

donde m, V_0 y a son tales que $E_1 = 0.5V_0$. Haga un esquema de la forma de la función propia $\psi_1(x)$ de esta partícula. Suponga ahora que se aumenta V_0 por un factor 3. ¿Qué

www.FreeLibros.me

pasa con la forma de $\psi_1(x)$ donde $V(x) > E_1$? ¿Y dónde $V(x) < E_1$? ¿Qué efecto tiene sobre el valor de E_1? Estas preguntas se deben responder cualitativamente, considerando el comportamiento de las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con el potencial en cuestión.

3. Tome un potencial de la forma considerada en el ejercicio 2 con $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 4$. Emplee las expresiones para $[\psi(x)]_{x_{j+1}} - [\psi(x)]_{x_j}$ y $[d\psi(x)/dx]_{x_{j+1}} - [d\psi(x)/dx]_{x_j}$, de la sección 5, para encontrar la primera función propia $\psi_1(x)$ y el primer valor propio E_1 por una integración numérica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Compare estos resultados con los analíticos que se presentan en la sección 4 del capítulo 8. *Nota:* inicie la integración en $x = 0$, donde es claro que $d\psi_1(x)/dx = 0$, y tome $(x_{j+1} - x_j) = 0.1a/2$.

4. Integrando numéricamente, encuentre el primer valor propio E_1 para el potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < -a/2, \quad x > a/2 \\ 0, & -a/2 < x < -a/4, \quad a/4 < x < a/2 \\ v_0, & -a/4 < x < a/4 \end{cases}$$

donde

$$v_0 = \pi^2\hbar^2/8ma^2$$

Haga uso de las condiciones $\psi_1(x) = 0$, $x \leqslant -a/2$, $x \geqslant a/2$. No es necesario que $\psi_1(x)$ sea continua en $x = \pm a/2$, como se justificará en la sección 5 del capítulo 8 para un potencial de este tipo. En uno de los ejercicios de ese capítulo se trata analíticamente la ecuación de Schrödinger con este potencial.

5. Derive la ecuación clásica para una cuerda cuya densidad por unidad de longitud $\rho(x)$ es variable. Sepárela en dos ecuaciones diferenciales ordinarias y compare la ecuación en x con la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con un potencial arbitrario $V(x)$.

6. Verifique la ecuación (7–68) evaluando algunas de las integrales.

7. Formule y resuelva el problema del movimiento de una cuerda, cuyos extremos están fijos, y que se pulsa a una distancia b de su centro. Verifique que cuando $b \to 0$ su solución se reduce a la del problema tratado en la sección 7.

8. Al calcular el valor esperado del producto de la posición y el impulso se presenta una ambigüedad, ya que no es claro cuál expresión de las siguientes se debe usar:

$$\overline{xp} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi \, dx$$

$$\overline{xp} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) x \Psi \, dx$$

Muestre que ninguna es aceptable, ya que se viola el requisito de que xp sea real. Muestre entonces que la expresión

$$\overline{xp} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left[\frac{x\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) x}{2}\right] \Psi \, dx$$

se puede aceptar ya que satisface este requisito. *Nota:* integre por partes.

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 8

Las soluciones a la ecuación de Schrödinger

1. La partícula libre

En este capítulo mostraremos algunas de las características de la teoría de la mecánica cuántica. En particular, consideraremos varios fenómenos predichos por esta teoría, encontrando las funciones y los valores propios de la ecuación de Schrödinger para diferentes valores particulares de la energía potencial $V(x, t)$.

Consideremos inicialmente el caso más simple: $V(x, t) =$ constante. De este modo, la fuerza $F(x, t) = -\partial V(x, t)/\partial x$ que actúa sobre la partícula será igual a cero; se trata de una partícula libre. Ya que lo anterior es cierto para cualquier valor de la constante, no se pierde generalidad al tomar $V(x, t) = 0$. En la mecánica clásica sabemos que si esto se cumple para una partícula libre, ésta se encuentra en reposo o se mueve con un impulso p constante. En cualquier caso, su energía total E es una constante.

Para encontrar el comportamiento predicho por la mecánica cuántica, de una partícula libre, resolveremos la ecuación de Schrödinger con $V(x, t) = 0$; puesto que la energía potencial no es una función de t, sólo será necesario resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Para $V(x, t) = 0$ esta ecuación toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \tag{8–1}$$

Si las soluciones son las funciones propias $\psi(x)$, las funciones de onda serán

$$\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar}\,\psi(x) \tag{8–2}$$

donde E es la energía total de la partícula. Sabemos, por la sección 5 del capítulo anterior, que existe *una solución aceptable de la ecuación* (8–1) *para todo valor de* $E \geqslant 0$.

Una solución a la ecuación diferencial (8–1) se puede escribir como

$$\psi(x) = Ae^{iKx} + Be^{-iKx} \tag{8–3}$$

www.FreeLibros.me

donde A y B son constantes arbitrarias y $K = \sqrt{2mE}/\hbar$. Se puede demostrar que ésta es una solución válida calculando

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = i^2K^2Ae^{iKx} + i^2K^2Be^{-iKx} = -K^2\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

y, substituyendo en la ecuación (8–1):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(x) \equiv E\psi(x); \quad \text{Q.E.D.}$$

Ya que la solución (8–3) contiene dos constantes arbitrarias, es una solución general de la ecuación ordinaria de segundo orden (8–1). En resumen, la función de onda que describe el comportamiento de una partícula libre es

$$\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x) \tag{8–4}$$

donde

$$\psi(x) = Ae^{iKx} + Be^{-iKx} \tag{8–4'}$$

y

$$K = \sqrt{2mE}/\hbar$$

Consideraremos primeramente el caso en que una de las constantes es igual a cero, B por ejemplo. La función de onda toma la forma

$$\Psi(x, t) = Ae^{-iEt/\hbar}e^{iKx} = Ae^{i(Kx-Et/\hbar)} \tag{8–5}$$

que también se puede escribir como

$$\Psi(x, t) = A\cos(Kx - Et/\hbar) + iA\,\text{sen}(Kx - Et/\hbar)$$

Esta es una *onda viajera*, cuya frecuencia angular es $\omega = E/\hbar$; sus nodos se mueven hacia la derecha con la velocidad $w = \nu/k \equiv \omega/K = E/\hbar K$. La densidad de probabilidad $P(x, t)$ y el flujo de probabilidad $S(x, t)$ son:

$$P(x, t) = \Psi^*\Psi = A^*e^{-i(Kx-Et/\hbar)}Ae^{i(Kx-Et/\hbar)}$$

$$P(x, t) = A^*A \tag{8–6}$$

y

$$S(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)$$

$$S(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left[A^*e^{-i(Kx-Et/\hbar)}AiKe^{i(Kx-Et/\hbar)} - Ae^{i(Kx-Et/\hbar)}A^*(-iK)e^{-i(Kx-Et/\hbar)}\right]$$

$$S(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m}A^*A2iK = \frac{\hbar K}{m}A^*A \tag{8–7}$$

www.FreeLibros.me

Conforme al postulado de De Broglie (ecuación 7–5),

$$\hbar K = p = mv$$

donde v es la velocidad de la partícula. El flujo de probabilidad será

$$S(x, t) = vA^*A = vP(x, t) \tag{8–8}$$

que concuerda con la relación clásica entre el flujo, la velocidad y la densidad. Para la función de onda (8–5), tanto la densidad como el flujo de probabilidad son constantes al transcurrir el tiempo e independientes de la posición. Además, la función de onda contiene el impulso $p = \hbar K$ y la energía E. Por esto, reconocemos que esta función está asociada con una partícula que viaja a lo largo del eje x con un impulso p constante y bien definido, aunque su coordenada x está indeterminada. Esta es la situación física de una partícula cuyo impulso se conoce exactamente, pero que está ubicada en algún lugar del *haz* infinitamente largo de partículas. Para la función de onda obtenida al hacer A igual a cero,

$$\Psi(x, t) = Be^{-i(Kx + Et/\hbar)} \tag{8–9}$$

encontramos

$$P(x, t) = B^*B \tag{8–10}$$

y

$$S(x, t) = -\frac{\hbar K}{m} B^*B \tag{8–11}$$

El signo del flujo de probabilidad $S(x, t)$ indica, por supuesto, la dirección del movimiento de la partícula. (En tres dimensiones este flujo de probabilidad es una cantidad vectorial.) La partícula asociada con la función de onda (8–5) se mueve en un haz en el sentido positivo del eje x, mientras que la asociada con la función de onda (8–9) se mueve en un haz en el sentido negativo del eje x.

Calculemos la integral de la densidad de probabilidad para la función de onda (8–5). Se tiene que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\Psi\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} A^*A\, dx = A^*A \int_{-\infty}^{\infty} dx$$

Observamos que diverge a menos que $A = 0$. Esta es la dificultad que surge en la normalización de la función de onda de una partícula no ligada, dificultad que ya encontramos en el capítulo anterior. Pero no es de carácter fundamental. La función de onda representa la situación ideal de una partícula que se mueve en un haz de longitud infinita y cuya coordenada x está completamente indeterminada. Este no corresponde a una situación física real donde se sabe que la partícula no puede hallarse fuera de un intervalo finito del eje x. Una función de onda que describa la situación real tendrá una amplitud esencialmente constante a lo largo de la longitud del haz; fuera de él su

www.FreeLibros.me

amplitud será igual a cero. Tendrá la forma de un grupo de longitud Δx grande, pero finito. Conforme al principio de incertidumbre, una función de onda conveniente, además de contener el impulso $p = \hbar K$, comprende una distribución de impulsos sobre el intervalo $\Delta p = \hbar\, \Delta K \sim \hbar/\Delta x$ centrado en el impulso $p = \hbar K$. Se puede pensar que la función (8–5) representa el comportamiento de una partícula en el límite cuando $\Delta x \to \infty$. No surge dificultad alguna en la normalización de una función de onda cuando Δx es finita, se dificulta en el límite, cuando la función se puede normalizar sólo si se anula la constante multiplicativa A. A pesar de esto, se puede emplear la forma límite de la función de onda en el cálculo de cantidades que no dependen del valor de la constante multiplicativa. En este capítulo efectuaremos una serie de cálculos con la función de onda en su forma límite; sólo se asignará un sentido físico al *cociente* de la constante multiplicativa de una función de onda y la constante multiplicativa de otra función de onda. Este procedimiento evita la dificultad de normalización.

En algunas situaciones es necesario emplear una función de onda que corresponda a un grupo de longitud finita. Esta función se puede construir al sumar funciones de onda de la forma (8–5) si el grupo se mueve en la dirección positiva del eje x, o de la forma (8–9) en el caso contrario. Cada una de las funciones corresponderá a valores diferentes de K y E. Esto es

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \Psi_n(x, t) \tag{8–12}$$

donde

$$\Psi_n(x, t) = e^{-iE_n t/\hbar} e^{iK_n x} \quad \text{y} \quad K_n = \sqrt{2mE_n}/\hbar$$

Ya que cada una de las $\Psi_n(x, t)$ es una solución de la ecuación (7–44) se puede demostrar que (8–12) será también una solución. Las constantes A_n se pueden calcular, como en la ecuación (7–57), a partir de la forma que tenga la función para algún tiempo, por ejemplo, $t = 0$. Para ilustrar lo anterior, consideremos una partícula libre, esto es, con un potencial $V(x) = 0$, que se mueve en el sentido positivo del eje x; para $t = 0$ la coordenada x de la partícula se encuentra dentro del intervalo Δx, centrado en el valor esperado de x, y el valor de su impulso dentro del intervalo Δp, centrado en el valor esperado de p. Supongamos, además, que $\Delta x\, \Delta p$ es $\hbar$ el valor mínimo permitido por el principio de incertidumbre. En consecuencia, se puede demostrar, que la función de onda normalizada para esta partícula es, para toda t,*

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x') \Psi(x', 0)\, dx' \right] e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x) \tag{8–13}$$

* En rigor, las ecuaciones (8–13) y (8–12) se deben escribir como integrales, ya que K_n varía continuamente en el caso de una partícula libre. Se ha escrito la ecuación (8–13) como una suma, con el objeto de mostrar la analogía con la ecuación (7–57).

www.FreeLibros.me

donde

$$\Psi(x', 0) = [2\pi(\Delta x)^2]^{-1/4} e^{-\left[\frac{(x'-\bar{x})^2}{4(\Delta x)^2} - \frac{i\bar{p}x'}{\hbar}\right]}$$

y

$$\psi_n(x) = e^{iK_n x}$$

[Si una partícula satisface las condiciones iniciales anteriores, pero se mueve bajo la influencia de una fuerza cuyo potencial es $V(x)$, la expresión para $\Psi(x, t)$ es la misma, salvo que se deben emplear las funciones $\psi_n(x)$ apropiadas a ese potencial.] Hemos presentado la ecuación (8–13) sólo por el interés que ofrece. Afortunadamente, casi siempre es posible formular los problemas de la mecánica cuántica de manera que la función de onda para una partícula libre se pueda representar por la función de onda (8–5) o por la (8–9), o por una simple combinación lineal de ambas, en lugar de algo tan complicado como es la ecuación (8–13). [Lo mismo es cierto para una partícula cuyo potencial $V(x)$ tiene una forma arbitraria.] Sólo este tipo de problemas consideraremos en este libro.

Consideremos las funciones (8–5)

$$\Psi(x, t) = Ae^{-iEt/\hbar} e^{iKx}$$

y (8–9)

$$\Psi(x, t) = Be^{-iEt/\hbar} e^{-iKx}$$

que son las soluciones de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre. Supongamos que $A = -B$; al sumar las dos funciones de onda, obtenemos una nueva función

$$\Psi(x, t) = Ae^{-iEt/\hbar}(e^{iKx} - e^{-iKx})$$

que se puede escribir como

$$\Psi(x, t) = Ae^{-iEt/\hbar}[\cos Kx + i \operatorname{sen} Kx - \cos(-Kx) - i \operatorname{sen}(-Kx)]$$

$$\Psi(x, t) = 2Aie^{-iEt/\hbar} \operatorname{sen} Kx$$

$$\Psi(x, t) = A'e^{-iEt/\hbar} \operatorname{sen} Kx \qquad (8\text{–}14)$$

donde A' es una constante arbitraria igual a $2i$ veces A. Elijamos ahora la relación entre las constantes de manera que $A = B$ y sumemos las dos funciones. El resultado es la nueva función de onda

$$\Psi(x, t) = Be^{-iEt/\hbar}(e^{iKx} + e^{-iKx})$$

que puede escribirse como

$$\Psi(x, t) = Be^{-iEt/\hbar}[\cos Kx + i \operatorname{sen} Kx + \cos(-Kx) + i \operatorname{sen}(-Kx)]$$

$$\Psi(x, t) = 2Be^{-iEt/\hbar} \cos Kx$$

$$\Psi(x, t) = B'e^{-iEt/\hbar} \cos Kx \qquad (8\text{–}15)$$

www.FreeLibros.me

donde B' es una constante arbitraria igual a 2 veces B e independiente de A'. Puesto que la ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial lineal, las funciones de onda también son soluciones, así como también lo es su suma,

$$\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar}(A' \operatorname{sen} Kx + B' \cos Kx)$$

la que se puede escribir como

$$\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x) \tag{8–16}$$

donde

$$\psi(x) = A' \operatorname{sen} Kx + B' \cos Kx \tag{8–16'}$$

y

$$K = \sqrt{2mE}/\hbar$$

A partir de la forma de la ecuación (8–16) reconocemos que la (8–16') también debe ser una solución de la ecuación de Schrödinger (8–1) para la partícula libre. Puesto que contiene dos constantes arbitrarias, también es una solución general —tan general como (8–4'). De hecho, podríamos haber escrito inmediatamente (8–16'), así como lo hicimos con (8–4'). Sin embargo, el procedimiento seguido tiene la ventaja de subrayar la relación entre las dos soluciones generales.

Además, nos ayuda a interpretar el significado de la función (8–16). En primer lugar, observamos que la función de onda se obtuvo sumando y restando dos ondas viajeras de igual amplitud y sentido opuesto y, por tanto, debe ser una *onda estacionaria*. Esto se puede comprobar directamente de la forma (8–16), ya que los nodos de $\Psi(x, t)$ están fijos en el espacio, y su posición está dada por las raíces de $A' \operatorname{sen} Kx + B' \cos Kx = 0$. Recordemos que con la partícula se han asociado dos ondas viajeras cuyos impulsos están perfectamente determinados, de igual magnitud y de sentido opuesto. En consecuencia, debemos asociar la onda estacionaria (8–16) con una partícula que se mueve en un haz infinitamente largo, de manera que la *magnitud* precisa de su impulso p se conoce, aunque su *sentido* se desconoce. Esto es, la función de onda está asociada con una partícula que puede estar moviéndose en el sentido positivo o negativo del eje x, con impulso de magnitud igual a p, y cuya coordenada x está indeterminada.

Comprobemos la interpretación que hemos dado a la ecuación (8–16) mediante el cálculo de la densidad de probabilidad $P(x, t)$ y del flujo de probabilidad $S(x, t)$. Para simplificar, consideremos que alguna de las constantes, B', por ejemplo, es igual a cero. De este modo

$$\Psi(x, t) = A' e^{-iEt/\hbar} \operatorname{sen} Kx \tag{8–17}$$

y

$$P(x, t) = \Psi^*\Psi = A'^* e^{iEt/\hbar} \operatorname{sen} Kx\, A' e^{-iEt/\hbar} \operatorname{sen} Kx$$

$$P(x, t) = A'^* A' \operatorname{sen}^2 Kx \tag{8–18}$$

www.FreeLibros.me

También

$$S(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\right)$$

$$S(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left[A'^* e^{iEt/\hbar} \operatorname{sen} Kx\, A' e^{-iEt/\hbar} K \cos Kx - A' e^{-iEt/\hbar} \operatorname{sen} Kx A'^* e^{iEt/\hbar} K \cos Kx\right]$$

$$S(x, t) = 0 \tag{8–19}$$

El que el flujo de probabilidad sea igual a cero concuerda con nuestra interpretación de $\Psi(x, t)$; la probabilidad, por unidad de tiempo, de que la partícula pase por el punto x en el sentido positivo del eje x, es igual a la probabilidad por unidad de tiempo de que pase por el mismo punto en el sentido negativo. La una cancelará a la otra, y el flujo total de probabilidad $S(x, t)$ será igual a cero. Consideremos ahora la densidad de probabilidad $P(x, t)$, cuya gráfica se muestra en la figura 8–1. Ahí se indica también la densidad de probabilidad constante que se debe esperar clásicamente para una partícula asociada con la función (8–17). El que $P(x, t)$, predicha por la mecánica cuántica, se extienda hasta valores infinitamente grandes de x, tanto positivos como negativos, concuerda con nuestra interpretación de la función de onda y con el comportamiento clásico de la partícula. En contraste con este comportamiento clásico se encuentra la presencia de puntos del eje x donde la partícula nunca se podrá encontrar. Esto es una manifestación del carácter ondulatorio de una partícula cuya situación está descrita por tal función de onda. Clásicamente no se observa este comportamiento, ya que la distancia $d = \pi/K = h/2p$ es sólo la mitad de la longitud de onda de De Broglie de la partícula. Esta distancia es muy pequeña en el límite clásico, y el patrón para $P(x, t)$ aparece tan comprimido en la dirección de x, que sólo su comportamiento promedio (constante) se puede resolver experimentalmente.

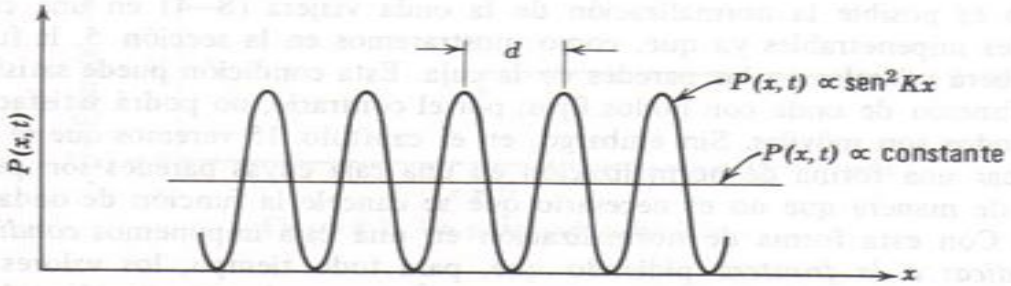

Figura 8-1. La densidad de probabilidad para una función estacionaria de partícula libre.

La función de onda estacionaria (8–16) presenta el mismo problema respecto a la normalización que la función de onda viajera. Sin embargo, en este caso hay un modo particularmente simple para eliminar esta dificultad. El problema de normalización surge en virtud del comportamiento de la función

www.FreeLibros.me

de onda para x. El problema se puede evitar al suprimir la función fuera de una región grande, aunque finita, definida por $-L/2 \leqslant x \leqslant L/2$. Esto es, el valor de la función dentro de este intervalo está dado por (8–16), mientras que es igual a cero fuera de él. De este modo

$$\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x) \tag{8–20}$$

donde

$$\psi(x) = \begin{matrix} A' \operatorname{sen} Kx + B' \cos Kx, & -L/2 \leqslant x \leqslant L/2 \\ 0, \quad x \leqslant -L/2, & x \geqslant L/2 \end{matrix} \tag{8–20'}$$

Es obvio que no habrá dificultad en normalizar la función de onda (8–20). Además, puesto que las funciones se cancelan cuando $x \to \pm\infty$, se ve inmediatamente de la ecuación (7–53) que no será difícil demostrar que éstas también serán ortogonales. En la sección 5 veremos que el procedimiento indicado en la ecuación (8–20) equivale matemáticamente a decir que la energía potencial $V(x)$ es infinitamente grande para $x \leqslant -L/2$ y $x \geqslant L/2$. Es como si la región $-L/2 \leqslant x \leqslant L/2$ estuviera encerrada en una caja unidimensional de paredes impenetrables. A este procedimiento se le da el nombre de *normalización en una caja*. Siempre que las paredes de la caja estén suficientemente lejos de la región de interés físico, su presencia no tendrá efectos de importancia y eliminará las dificultades matemáticas asociadas con la normalización y la ortogonalidad de las funciones que corresponden a la partícula libre. Una vez normalizada la función, las constantes A' y B' dependerán de la longitud L de la caja, lo cual no tendrá mayores consecuencias, ya que no intervendrán en los resultados de cálculos de alguna cantidad con interés físico. La normalización en la caja cambiará los valores propios E de continuos en discretos. La separación entre dos valores contiguos será proporcional a L^{-2}, de modo que para L muy grande el espectro de energía será prácticamente continuo.

No es posible la normalización de la onda viajera (8–4) en una caja de paredes impenetrables ya que, como mostraremos en la sección 5, la función se deberá cancelar en las paredes de la caja. Esta condición puede satisfacerla una función de onda con nodos fijos; por el contrario, no podrá satisfacerla si sus nodos son móviles. Sin embargo, en el capítulo 15 veremos que se puede emplear una forma de normalización en una caja cuyas paredes son penetrables, de manera que no es necesario que se cancele la función de onda sobre ellas. Con esta forma de normalización en una caja imponemos *condiciones periódicas a la frontera* pidiendo que, para todo tiempo, los valores de la función y de su derivada espacial en una de las paredes sean iguales a los que tiene en la otra. De la ecuación (7–53) es claro que con estas condiciones a la frontera las funciones propias serán ortogonales. Este tipo de normalización hace que los valores propios de la energía sean discretos. Al normalizar en una caja de paredes penetrables, sólo nos interesa lo que pase dentro de la caja y restringimos el dominio de la variable x a la región comprendida entre las paredes. Las funciones de onda podrán ser normalizadas. La constante de normalización dependerá de la longitud de la caja, aunque ésta no aparecerá

www.FreeLibros.me

en los resultados finales de los cálculos que se efectúen sobre cantidades que se midan experimentalmente.

En resumen, se puede ignorar el problema de la normalización y ortogonalización de las funciones y funciones propias de onda, tanto viajeras como estacionarias, para la partícula libre. Se asegura la consistencia matemática de la teoría diciendo que se puede emplear una función de onda en forma de un grupo, o que se puede aplicar alguna de las formas de normalización en una caja. Normalmente, en la práctica no es necesario emplear ninguno de estos recursos, y se pueden usar las funciones de onda (8–4) y (8–16) "como están".

2. El potencial de escalón

En las próximas secciones describiremos, de acuerdo con la mecánica cuántica, el movimiento de una partícula cuya energía potencial $V(x)$ cambia discontinuamente para algunos valores de x, permaneciendo constante en los demás puntos. Por supuesto que no existen en la naturaleza potenciales que sean funciones discontinuas de x. Sin embargo, se emplean frecuentemente en la mecánica cuántica para aproximar situaciones reales; su tratamiento matemático es simple, ya que, en cada intervalo, el potencial es constante. Con estos potenciales podremos ilustrar algunas predicciones de la mecánica cuántica. Consideremos el ejemplo más simple: *un potencial de escalón*, como se muestra en la figura 8–2. Escogemos el origen del eje x en el escalón. Entonces

$$V(x) = \begin{matrix} V_0, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{matrix} \tag{8–21}$$

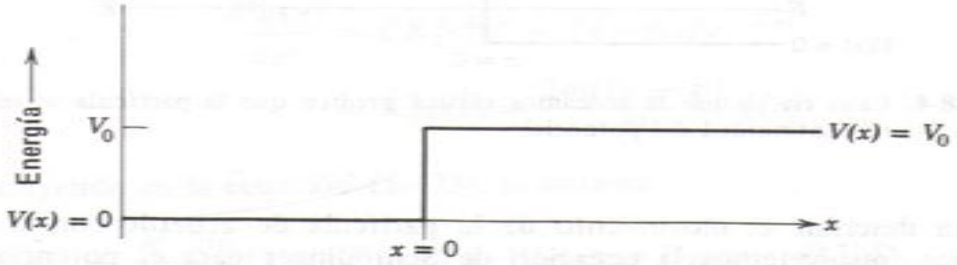

Figura 8-2. Un potencial de escalón.

donde V_0 es constante. Podemos pensar que $V(x)$ es el límite de la función de energía potencial para una partícula cargada que se mueve a lo largo del eje de un sistema formado por dos electrodos cuya diferencia de potencial es diferente de cero, como se ilustra en la figura 8–3.

Suponga que una partícula de masa m y energía total E se encuentra en la región $x < 0$, y se mueve hacia el punto donde cambia $V(x)$. Conforme a la mecánica clásica, la partícula se moverá libremente en esta región hasta que

www.FreeLibros.me

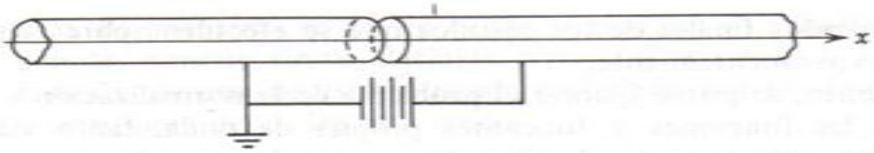

Figura 8-3. Un sistema físico por el cual se puede aproximar un potencial de escalón.

llegue al punto $x = 0$, donde estará bajo la acción de una fuerza impulsiva $F(x) = -\partial V(x)/\partial x$ en el sentido negativo del eje x. Clásicamente, el movimiento posterior de la partícula dependerá de la relación entre E y V_0, lo que también es cierto en la descripción cuántica. Consideremos el primer caso:

$E < V_0$

Esta situación se ilustra en la figura 8–4. Puesto que la energía total E es constante, la mecánica clásica afirma que la partícula no puede penetrar en la región $x > 0$, puesto que en ella

$$E = p^2/2m + V(x) < V(x)$$

ó

$$p^2/2m < 0$$

La fuerza impulsiva cambiará el impulso de la partícula de manera que la hará moverse en el sentido negativo del eje x, con un impulso de igual magnitud y de sentido opuesto al inicial, de manera que su energía total permanezca constante.

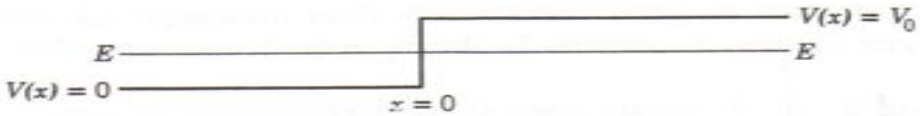

Figura 8-4. Caso en el que la mecánica clásica predice que la partícula se refleja en la discontinuidad del potencial.

Para describir el movimiento de la partícula de acuerdo con la mecánica cuántica, resolveremos la ecuación de Schrödinger para el potencial (8–21) cuando la energía total $E < V_0$. Sabemos de la sección 5, capítulo 7, que *existen soluciones aceptables para la ecuación de Schrödinger con el potencial* $V(x)$ *para todo valor* $E \geqslant 0$. Puesto que se trata de un potencial independiente del tiempo bastará encontrar las funciones propias que sean soluciones de la ecuación de Schrödinger. El potencial divide al eje x en dos regiones. Para $x < 0$, la función propia es una solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x), \qquad x < 0 \tag{8–22}$$

www.FreeLibros.me

Para $x > 0$, la solución satisface

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x), \qquad x > 0 \tag{8–23}$$

Se resuelven separadamente las dos ecuaciones. La función propia para toda x se construye uniendo las dos soluciones en $x = 0$, de modo que satisfaga la condición (7–38), que requiere que tanto $\psi(x)$ como $d\psi(x)/dx$ sean finitas y continuas.

La ecuación (8–22) es precisamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (8–1) para una partícula libre. Su solución general se puede escribir en la forma de onda viajera (8–4′), o en la de onda estacionaria (8–16′). Cualquiera se puede usar, ya que son matemáticamente equivalentes. Sin embargo, empleando la forma más adecuada a este problema, es posible simplificar el cálculo o la interpretación de los resultados. Es conveniente emplear ondas viajeras cuando se trata el movimiento de una partícula no ligada; en el caso contrario, la forma estacionaria es la más adecuada. Para nuestro problema tomamos

$$\psi(x) = Ae^{iK_1x} + Be^{-iK_1x}, \qquad x < 0 \tag{8–24}$$

donde

$$K_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

Consideremos ahora la ecuación (8–23). Su solución general es

$$\psi(x) = Ce^{K_2x} + De^{-K_2x}, \qquad x > 0 \tag{8–25}$$

donde

$$K_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad \text{y} \quad E < V_0$$

Para comprobar lo anterior, calculemos

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = CK_2^2e^{K_2x} + D(-K_2)^2e^{-K_2x}$$
$$= K_2^2\psi(x) = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi(x)$$

y substituyendo en la ecuación (8–23), se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi(x) + V_0\psi(x) \equiv E\psi(x); \quad \text{Q.E.D.}$$

Las constantes arbitrarias A, B, C y D se deben elegir de modo que la función propia satisfaga las condiciones (7–38). Consideremos primeramente el comportamiento de la función propia cuando $x \to +\infty$. En esta región del eje x, la solución a la ecuación de Schrödinger está dada por (8–25). Debido a la presencia del primer término, esta solución divergirá cuando $x \to +\infty$; para evitarlo, debemos cancelarlo de modo que

$$C = 0 \tag{8–26}$$

www.FreeLibros.me

Considere ahora la función propia en $x = 0$. Aquí deben empalmarse las soluciones (8–24) y (8–25) para que tanto $\psi(x)$ como $d\psi(x)/dx$ sean continuas. La continuidad de $\psi(x)$ implica que

$$D(e^{-K_2x})_{x=0} = A(e^{iK_1x})_{x=0} + B(e^{-iK_1x})_{x=0}$$

esto es

$$D = A + B \tag{8–27}$$

Puesto que

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = -K_2De^{-K_2x}, \qquad x > 0$$

y

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = iK_1Ae^{iK_1x} - iK_1Be^{-iK_1x}, \qquad x < 0$$

la continuidad en la derivada requiere

$$-K_2D(e^{-K_2x})_{x=0} = iK_1A(e^{iK_1x})_{x=0} - iK_1B(e^{-iK_1x})_{x=0}$$

o sea

$$\frac{iK_2}{K_1}D = A - B \tag{8–28}$$

Sumando las ecuaciones (8–27) y (8–28) obtenemos

$$A = \frac{D}{2}\left(1 + \frac{iK_2}{K_1}\right) \tag{8–29}$$

y restándolas

$$B = \frac{D}{2}\left(1 - \frac{iK_2}{K_1}\right) \tag{8–30}$$

La función propia para este potencial correspondiente a la energía E es

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2}(1 + iK_2/K_1)e^{iK_1x} + \frac{D}{2}(1 - iK_2/K_1)e^{-iK_1x}, & x \leqslant 0 \\ De^{-K_2x}, & x \geqslant 0 \end{cases} \tag{8–31}$$

No se ha determinado la constante arbitraria D, ya que no hemos normalizado la función propia. Pudo haber sido hecha por las técnicas descritas en la sección 1, pero no es necesario.

La función de onda es

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} Ae^{-iEt/\hbar}e^{iK_1x} + Be^{-iEt/\hbar}e^{-iK_1x}, & x \leqslant 0 \\ De^{-iEt/\hbar}e^{-K_2x}, & x \geqslant 0 \end{cases} \tag{8–32}$$

www.FreeLibros.me

En la región $x < 0$ la función contiene una onda viajera en el sentido positivo del eje x y otra en el sentido negativo; en la región $x > 0$ contiene una onda estacionaria. Para interpretar (8–32), es útil calcular el flujo de probabilidad $S(x, t)$ en la región $x < 0$. Comparándolas con las ecuaciones (8–7) y (8–11) y las funciones de onda de las que se derivaron, es claro que, en nuestro caso,

$$S(x, t) = vA^*A - vB^*B, \qquad x < 0 \tag{8–33}$$

donde $v = \hbar K_1/m$ es la magnitud de la velocidad de la partícula. El primer término, que proviene del primero de la función de onda, corresponde al flujo de probabilidad en el sentido positivo del eje x; el segundo término, proveniente del segundo de la función de onda, es un flujo de probabilidad en el sentido opuesto. En consecuencia, para $x < 0$, con el primer término de $\Psi(x, t)$ ó $S(x, t)$ asociamos la incidencia de la partícula en el punto donde cambia el potencial, y con el segundo término la reflexión de la partícula al cambiar el potencial. La relación del flujo de probabilidad reflejado al flujo de probabilidad incidente es

$$R = \frac{vB^*B}{vA^*A} = \frac{B^*B}{A^*A} = \frac{(1 - iK_2/K_1)^*(1 - iK_2/K_1)}{(1 + iK_2/K_1)^*(1 + iK_2/K_1)}$$

$$= \frac{(1 + iK/_2K_1)(1 - iK_2/K_1)}{(1 - iK_2/K_1)(1 + iK_2/K_1)} = 1$$

La cantidad B^*B/A^*A es también la relación entre las intensidades de la onda reflejada y la incidente en la región $x < 0$. El que esta relación sea igual a la unidad significa que una partícula que incide sobre el cambio de potencial, con una energía total $E < V_0$, se refleja con probabilidad unidad, lo que concuerda con las predicciones clásicas.

Puesto que $e^{iK_1x} = \cos K_1x + i \operatorname{sen} K_1x$, etc., la función propia (8–31) se puede escribir como

$$\psi(x) = \begin{cases} D \cos K_1x - D\dfrac{K_2}{K_1} \operatorname{sen} K_1x, & x \leqslant 0 \\ De^{-K_2x}, & x \geqslant 0 \end{cases} \tag{8–34}$$

La función de onda correspondiente a esta función propia es, de hecho, una onda estacionaria para toda x. En este caso las ondas viajeras incidente y reflejada se combinan para formar una onda estacionaria en virtud de que son de la misma amplitud.

En la figura 8–5 se muestra la gráfica de la función (8–34) con D real. Encontramos un comportamiento que contrasta con el comportamiento clásico: aunque en la región $x > 0$ la densidad de probabilidad

$$P(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) = D^*De^{-2K_2x} \tag{8–35}$$

disminuye rápidamente al aumentar x, la probabilidad de encontrar la partícula en esta región es finita. Conforme a la mecánica clásica, la partícula no podría encontrarse en esa región en virtud de que la energía total es menor

www.FreeLibros.me

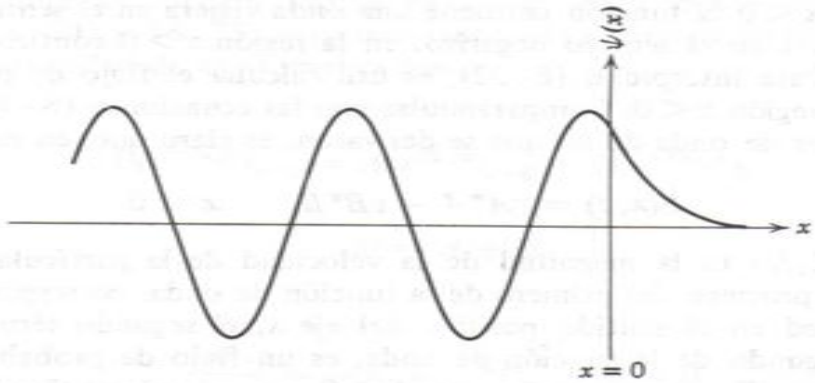

Figura 8-5. Un potencial de escalón para una función propia en el caso en que la mecánica clásica predice que la partícula es reflejada.

que la potencial. Que una partícula pueda penetrar a una región clásicamente prohibida, es una de las predicciones más impresionantes de la mecánica cuántica.

Posteriormente discutiremos algunos experimentos que confirman esta predicción. Señalamos, sin embargo, que la ecuación (8–35) no es inconsistente con los experimentos de la mecánica clásica. Es claro que la probabilidad de encontrar a la partícula a la derecha de $x = 0$ es sólo apreciable en una región de longitud Δx que es del orden de $1/K_2$. Esto es

$$\Delta x \sim 1/K_2 = \hbar/\sqrt{2m(V_0 - E)}$$

En el límite clásico el producto $m\,(V_0 - E)$ es tan grande comparado con $\hbar^2$, que Δx es tan pequeña que será imposible medirla.

Además, el principio de incertidumbre demuestra que las propiedades ondulatorias que manifiesta una entidad al penetrar en una región prohibida clásicamente no entra en conflicto con sus propiedades corpusculares. Consideremos un experimento adecuado para localizar la partícula en la región $x > 0$. Puesto que $P(x, t)$, para $x > 0$, tiene un valor apreciable sólo en un intervalo de longitud Δx, el experimento se reduciría a localizar la partícula en esta región. Esto produciría una incertidumbre en el impulso de magnitud

$$\Delta p \sim \hbar/\Delta x \sim \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

En consecuencia, la incertidumbre en la energía de la partícula sería

$$\Delta E = (\Delta p)^2/2m \sim V_0 - E$$

de modo que no puede decirse con seguridad que la energía total E de la partícula sea menor que la energía potencial V_0.

Consideremos ahora el movimiento de la partícula cuando

$E > V_0$

Este caso se ilustra en la figura 8–6. Clásicamente, una partícula que se encuentra en $x < 0$ y que viaja en el sentido positivo del eje x estará sujeta a

www.FreeLibros.me

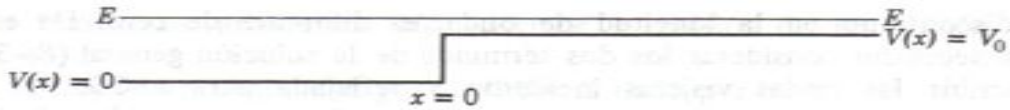

Figura 8-6. Caso en que la mecánica clásica prediga que la partícula no es reflejada en la discontinuidad del potencial.

una fuerza impulsiva retardadora $F(x) = -\partial V(x)/\partial x$ en el punto $x = 0$. Esta impulsión solamente frenará a la partícula que entre a la región $x > 0$, continuando su movimiento en el sentido positivo del eje x. Su energía total permanecerá constante; su impulso en la región $x < 0$ es p_1, donde $E = p_1^2/2m$; para $x > 0$, el impulso es p_2, donde $E = p_2^2/2m + V_0$.

Cuánticamente, el movimiento de la partícula está descrito por la función de onda $\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x)$, donde la función propia $\psi(x)$ es solución de la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x), \qquad x < 0 \tag{8–36}$$

y

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (E - V_0)\psi(x), \qquad x > 0 \tag{8–37}$$

Además, satisface las condiciones (7–38) en el punto $x = 0$. La primera ecuación describe el movimiento de una partícula libre con impulso p_1. Su solución general en forma de onda viajera es

$$\psi(x) = Ae^{iK_1x} + Be^{-iK_1x}, \qquad x < 0 \tag{8–38}$$

donde

$$K_1 = \sqrt{2mE}/\hbar = p_1/\hbar$$

La segunda ecuación describe el movimiento de una partícula libre con impulso p_2. Su solución general en la forma de onda viajera es

$$\psi(x) = Ce^{iK_2x} + De^{-iK_2x}, \qquad x > 0 \tag{8–39}$$

donde

$$K_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar = p_2/\hbar \quad \text{y} \quad E > V_0$$

La función de onda especificada por las ecuaciones (8–38) y (8–39) consiste de ondas viajeras de longitud de onda $\lambda_1 = h/p_1 = 2\pi/K_1$ para $x < 0$ y de una longitud de onda mayor, $\lambda_2 = h/p_2 = 2\pi/K_2$ para $x > 0$.

Clásicamente, la probabilidad de que la partícula pase por el punto cero y entre en la región $x > 0$ es igual a la unidad. Este no es el caso en la mecánica cuántica: en virtud de las propiedades ondulatorias de la partícula, la probabilidad de que la partícula sea reflejada en el punto $x = 0$, donde hay un

www.FreeLibros.me

cambio discontinuo en la longitud de onda, es diferente de cero. De este modo, es necesario considerar los dos términos de la solución general (8–38) para describir las ondas viajeras incidente y reflejada para $x < 0$. Por el contrario, no es necesario tomar en cuenta el segundo término de la solución general (8–39), ya que describe una onda que viaja en el sentido negativo del eje x en la región $x > 0$. Ya que la partícula incide en el sentido positivo del eje x, esta onda sólo se podría originar si la partícula se refleja en algún punto en la región $x > 0$. Puesto que nada puede provocar esta reflexión, sabemos que sólo existe una onda transmitida para $x > 0$, de manera que debemos tomar

$$D = 0 \tag{8–40}$$

Las constantes arbitrarias A, B y C se determinan al pedir que tanto $\psi(x)$ como $d\psi(x)/dx$ sean continuas en $x = 0$. Para lo primero se debe tener

$$A(e^{iK_1x})_{x=0} + B(e^{-iK_1x})_{x=0} = C(e^{iK_2x})_{x=0}$$

o sea,

$$A + B = C \tag{8–41}$$

y para lo segundo

$$iK_1A(e^{iK_1x})_{x=0} - iK_1B(e^{-iK_1x})_{x=0} = iK_2C(e^{iK_2x})_{x=0}$$

o sea

$$K_1(A - B) = K_2C \tag{8–42}$$

De las ecuaciones (8–41) y (8–42) encontramos

$$B = \frac{K_1 - K_2}{K_1 + K_2} A$$

y

$$C = \frac{2K_1}{K_1 + K_2} A \tag{8–43}$$

La función propia resulta

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{iK_1x} + A\dfrac{K_1 - K_2}{K_1 + K_2} e^{-iK_1x}, & x \leqslant 0 \\ A\dfrac{2K_1}{K_1 + K_2} e^{iK_2x}, & x \geqslant 0 \end{cases} \tag{8–44}$$

La constante arbitraria A se puede determinar por la condición de normalización, lo cual no haremos. Es obvio que no se podría haber encontrado una función propia que satisficiera simultáneamente las condiciones de continuidad y de normalización si el coeficiente de la onda reflejada B se hubiera puesto igual a cero, ya que se tendrían que satisfacer tres condiciones con sólo

www.FreeLibros.me

dos constantes arbitrarias. No haremos la gráfica de la función compleja (8–44).

El flujo de probabilidad para $x < 0$ está dado por

$$S(x, t) = v_1 A^* A - v_1 B^* B$$

donde

$$v_1 = \hbar K_1/m = p_1/m$$

El primer término es el flujo incidente, y el segundo el flujo reflejado. El flujo transmitido se obtiene calculando $S(x, t)$ para $x > 0$:

$$S(x, t) = v_2 C^* C$$

donde

$$v_2 = \hbar K_2/m = p_2/m$$

La probabilidad de que la partícula sea reflejada a la región $x < 0$ está dada por el cociente del flujo reflejado entre el flujo incidente, o sea,

$$R = \frac{v_1 B^* B}{v_1 A^* A} = \frac{(K_1 - K_2)^2}{(K_1 + K_2)^2} \tag{8–45}$$

La relación del flujo transmitido al incidente es la probabilidad de transmisión de la partícula a la región $x > 0$, o sea

$$T = \frac{v_2 C^* C}{v_1 A^* A} = \frac{K_2}{K_1} \frac{(2K_1)^2}{(K_1 + K_2)^2}$$

$$T = \frac{4K_1 K_2}{(K_1 + K_2)^2} \tag{8–46}$$

Puede mostrarse fácilmente que

$$R + T = 1 \tag{8–47}$$

El flujo de probabilidad que incide sobre la discontinuidad del potencial se separa en uno transmitido y en otro reflejado. De la ecuación (8–47) es obvio que se conserva el flujo total de probabilidad. O sea, que la partícula se refleja o se transmite, pero nunca desaparece. Por supuesto que la partícula no se romperá en dos en el punto de discontinuidad: toda entera se transmitirá o se reflejará. En un gran número de intentos, la probabilidad promedio de ir en el sentido negativo del eje x es R, y la de continuar en el sentido positivo es T. Observe que R y T no varían al intercambiar K_1 con K_2. Esto quiere decir que se obtendrían los mismos valores para R y T si la partícula incidiera sobre la discontinuidad del potencial en la dirección negativa del eje x desde la región $x > 0$. La función de onda que describe el movimiento de la partícula y, por tanto, el flujo de probabilidad, son reflejados parcialmente porque el potencial $V(x)$ es *discontinuo* y no porque el potencial aumente en el sentido del movimiento de la partícula.

www.FreeLibros.me

Investiguemos el comportamiento de R para $E \simeq V_0$ y también para $E \gg V_0$. En el primer caso, $K_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \to 0$, mientras que $K_1 = \sqrt{2mE}/\hbar \to \sqrt{2mV_0}/\hbar$. Entonces

$$R = \left(\frac{K_1 - K_2}{K_1 + K_2}\right)^2 \to \left(\frac{K_1}{K_1}\right)^2 = 1$$

y la probabilidad de que la partícula sea reflejada se acerca a la unidad. En el segundo caso, $K_2 \to \sqrt{2mE}/\hbar = K_1$. Así, $R \to 0$ y es despreciable la probabilidad de que la partícula sea reflejada. Sin embargo, el caso $E \gg V_0$ no equivale necesariamente al caso del límite clásico donde, como sabemos, no hay reflexión. Esto es patente si se evalúa la ecuación (8–45) en términos de E y V_0:

$$R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}}\right)^2 \tag{8–48}$$

La constante de Planck no interviene en la ecuación; el valor de R sólo depende del cociente V_0/E. Si mantenemos constante este cociente, la ecuación (8–48) predice que habrá reflexión aun cuando V_0 y E sean tan grandes que sean válidas las predicciones de la mecánica cuántica. Esto es paradójico sólo en apariencia, ya que, en el límite de grandes energías, la hipótesis de que el cambio en $V(x)$ sea abrupto no se puede aproximar por ninguna situación física. La causa es que la reflexión es el resultado de un cambio abrupto en la longitud de onda, donde "abrupto" significa que ésta cambia apreciablemente en una distancia comparable a una longitud de onda. Si el cambio en 1 longitud de onda es pequeño, porque es pequeño el cambio en el potencial en esta distancia, la reflexión es despreciable. Lo anterior se puede mostrar resolviendo la ecuación de Schrödinger para un potencial como el que se muestra en la figura 8–7. Estas afirmaciones, que se deducen de las propiedades del movimiento ondulatorio, las debe conocer el lector por ser semejantes al comportamiento de las ondas de agua o de las luminosas. En el límite clásico, la longitud de onda de De Broglie es tan pequeña, que la variación de cualquier potencial con realidad física en una longitud de onda es tan pequeña que no conduce a reflexión alguna. Sin embargo, para las partículas en sistemas atómicos o nucleares, donde la longitud de onda puede ser grande respecto a la distancia en la que el potencial cambia apreciablemente, el fenómeno de reflexión puede ser muy importante.

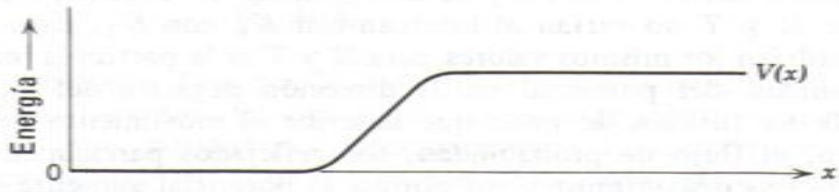

Figura 8-7. Una función propia para un potencial de escalón alisado.

www.FreeLibros.me

3. Potenciales de barrera

A continuación consideraremos un *potencial de barrera*, como se ilustra en la figura 8–8. Este potencial es

$$V(x) = \begin{matrix} V_0, & 0 < x < a \\ 0, & x < 0, x > a \end{matrix} \tag{8–49}$$

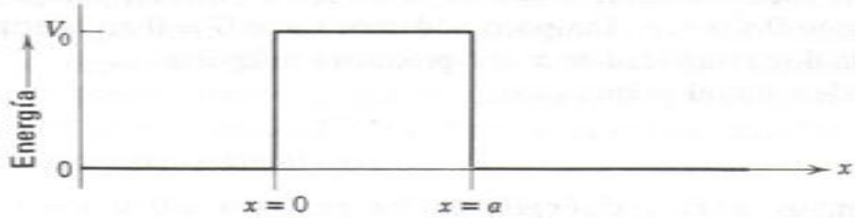

Figura 8-8. Un potencial de barrera.

Si una partícula con energía total E, proveniente de la región $x < 0$, incide sobre la barrera, de acuerdo con la mecánica clásica tendrá una probabilidad igual a uno de ser reflejada si $E < V_0$, y una probabilidad, también igual a uno, de ser transmitida si $E > V_0$. Estas conclusiones no son válidas en la mecánica cuántica.

Para este potencial *existen soluciones aceptables de la ecuación de Schrödinger para toda* $E \geqslant 0$. La ecuación se separa en tres ecuaciones para cada una de las regiones: $x < 0$, $0 < x < a$ y $x > a$. En las regiones primera y tercera la ecuación es la de una partícula libre de energía E. Las soluciones en forma de ondas viajeras tienen la forma

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{iK_{\mathrm{I}}x} + Be^{-iK_{\mathrm{I}}x}, \qquad x < 0 \\ \psi(x) &= Ce^{iK_{\mathrm{I}}x} + De^{-iK_{\mathrm{I}}x}, \qquad x > a \end{aligned} \tag{8–50}$$

donde

$$K_{\mathrm{I}} = \sqrt{2mE}/\hbar$$

En la segunda región, la forma de la ecuación depende de si $E < V_0$ o $E > V_0$. Ambos casos se han discutido en la sección anterior. En el primer caso

$$\psi(x) = Fe^{-K_{\mathrm{II}}x} + Ge^{K_{\mathrm{II}}x}, \qquad 0 < x < a \tag{8–51}$$

donde

$$K_{\mathrm{II}} = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad \text{y} \quad E < V_0$$

En el segundo caso

$$\psi(x) = Fe^{iK_{\mathrm{III}}x} + Ge^{-iK_{\mathrm{III}}x}, \qquad 0 < x < a \tag{8–52}$$

www.FreeLibros.me

donde

$$K_{\mathrm{III}} = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \quad \text{y} \quad E > V_0$$

Si la partícula incide en el sentido positivo del eje x debemos poner

$$D = 0$$

ya que sólo puede existir una onda transmitida en la región $x > a$. Por otra parte, no podemos hacer $G = 0$ en la ecuación (8–51), puesto que x es finita en la región $0 < x < a$. Tampoco podemos hacer $G = 0$ en la ecuación (8–52), ya que la discontinuidad en $x = a$ producirá reflexión.

Consideremos el primer caso:

$E < V_0$

Al ensamblar $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ en los puntos $x = 0$ y $x = a$, se obtendrán cuatro ecuaciones que contienen las constantes, A, B, C, F y G. Como ejercicio, el lector escribirá las ecuaciones y calculará B, C, F y G en términos de A. Si se desea, el valor de A puede determinarse a partir de la condición de normalización. En la figura 8–9 se indica la forma de la función propia. La figura deberá tomarse con la debida reserva, ya que tanto la forma exacta de $\psi(x)$ en la región $0 < x < a$, como la relación de su amplitud en la región $x > a$ a su amplitud en la región $x < 0$ depende de los valores de E, V_0, a y m. Además, $\psi(x)$ es una función compleja. [Por ejemplo, $\psi(x) = Ce^{iK_{\mathrm{I}}x}$ para $x > a$.] En la figura hemos hecho la gráfica de la parte real de $\psi(x)$.

El resultado más interesante del cálculo es la relación T de la intensidad del flujo de probabilidad transmitido en la región $x > a$ a la intensidad del flujo de probabilidad incidente. Su valor es

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[1 + \frac{\operatorname{senh}^2 K_{\mathrm{II}} a}{(4E/V_0)(1 - E/V_0)}\right]^{-1}, \qquad E < V_0$$

la que es igual a

$$T = \left[1 + \frac{\operatorname{senh}^2\left(\sqrt{\dfrac{2mV_0a^2}{\hbar^2}(1 - E/V_0)}\right)}{(4E/V_0)(1 - E/V_0)}\right]^{-1}, \qquad E < V_0 \qquad (8\text{–}53)$$

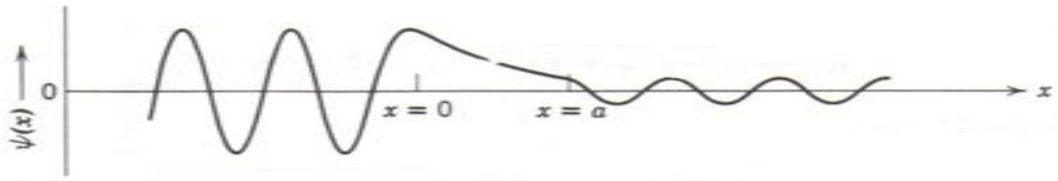

Figura 8-9. La parte real de la función propia para la penetración de una barrera.

www.FreeLibros.me

Si el argumento del seno hiperbólico es mucho mayor que 1, el valor de T será pequeño y aproximadamente igual a

$$T \simeq 16 \frac{E}{V_0}(1 - E/V_0)e^{-2K_{II}a} \tag{8–54}$$

Aquí nos encontramos frente a la notable predicción (en contraste con la mecánica clásica), de que una partícula de masa m y energía total E, que incide sobre una barrera de altura $V_0 > E$ y de espesor a, posee una cierta probabilidad T de penetrar la barrera y aparecer en el otro lado. A este fenómeno se le denomina *penetración de la barrera*. Por supuesto, T es despreciable en el límite clásico, ya que en este caso la cantidad $2mV_0a^2/\hbar^2$, que es una medida de la "opacidad" de la barrera, es extremadamente grande.

Consideremos a continuación el caso

$E > V_0$

Aquí se tienen ondas viajeras en las tres regiones, aunque de mayor longitud de onda en el intervalo $0 < x < a$. Al aplicar las condiciones de continuidad en $x = 0$ y $x = a$, se pueden calcular las constantes B, C, F y G. De esta forma

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[1 + \frac{\operatorname{sen}^2 K_{III}a}{(4E/V_0)(E/V_0 - 1)}\right]^{-1}, \qquad E > V_0$$

que es igual a

$$T = \left[1 + \frac{\operatorname{sen}^2\left(\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}(E/V_0 - 1)}\right)}{(4E/V_0)(E/V_0 - 1)}\right]^{-1}, \qquad E > V_0 \tag{8–55}$$

La forma de las funciones (8–53) y (8–55) depende del valor de $2mV_0a^2/\hbar^2$. En la figura 8–10 se hizo la gráfica de T en función de E/V_0 para un electrón incidente sobre una barrera de altura $V_0 = 10$ ev y anchura $a = 1.85 \times 10^{-8}$ cm; $(2mV_0a/\hbar^2 = 9)$. Este es un valor característico para los potenciales en el caso de un electrón que se mueve en un cristal, por ejemplo. Para $E/V_0 \ll 1$, T es muy pequeño. Pero cuando E/V_0 rebasa en poco a la unidad, T no es del todo despreciable. Es patente que la penetración de la barrera puede ser importante en los sistemas atómicos. Para $E/V_0 > 1$, T es, en general, menor que 1 en virtud de las reflexiones en las discontinuidades del potencial. De la ecuación (8–55) se puede ver que $T = 1$ para $K_{III}a = \pi$, 2π, 3π, ... Esta condición sólo expresa el hecho de que el espesor a de la barrera es igual a un número entero o semientero de longitudes de onda $\lambda_{III} = 2\pi/K_{III}$, en esa región. Para esta barrera en particular, los electrones de energía $E \simeq 21$ ev, 53 ev, etc, satisfacen la condición $K_{III}a = \pi$, 2π, etc. y pasan a la región $x > a$ sin reflejarse. Este efecto es un resultado de la interferencia destructiva entre las reflexiones en $x = 0$ y $x = a$ y está íntima-

www.FreeLibros.me

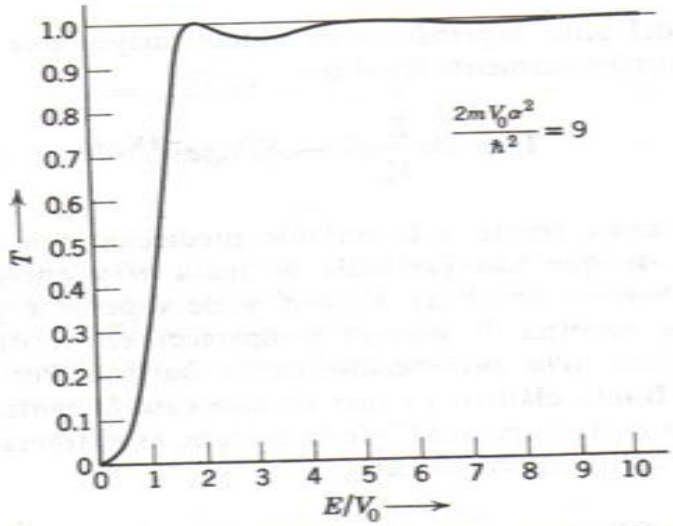

Figura 8-10. El coeficiente de transmisión para la penetración de una barrera.

mente relacionado con el *efecto Ramsauer*, observado en la dispersión de electrones por átomos, lo que se discutirá en el capítulo 15.

La penetración de la barrera es una manifestación del carácter ondulatorio del movimiento de la partícula; este mismo fenómeno se observa en otros tipos de movimiento ondulatorio. Hemos visto que la ecuación diferencial independiente del tiempo que gobierna la propagación de ondas en una cuerda es esencialmente igual a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Esto también es cierto de la ecuación diferencial independiente del tiempo para la radiación electromagnética. Para una radiación de frecuencia ν que se propaga en un medio cuyo índice de refracción es μ, la ecuación es

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{2\pi\nu}{c}\mu\right)^2 \psi(x) = 0 \tag{8–56}$$

Al compararla con la ecuación (7–35), es patente que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es idéntica a la ecuación para la propagación de la luz en un medio cuyo índice de refracción es una función de la coordenada x:

$$\mu(x) = \frac{c}{2\pi\nu}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]} \tag{8–57}$$

En realidad, existen fenómenos ópticos que son análogos a cada uno de los fenómenos cuánticos que surgen al considerar el movimiento de partículas no ligadas. Por ejemplo, un fenómeno óptico que es completamente análogo al cuántico, en el que el coeficiente de transmisión es igual a uno cuando el espesor de la barrera es igual a un número entero o semientero de longitudes de onda, lo tenemos en el "revestimiento óptico" de lentes con el objeto de obtener una transmisión luminosa muy alta. En particular, la situación

www.FreeLibros.me

$E < V(x)$, que encontramos cuánticamente en la penetración de una barrera, es equivalente a la situación óptica con un índice de refracción complejo. Esto ocurre en el caso de reflexión interna total.

Considere un rayo luminoso que desde el interior del vidrio incide sobre la superficie de separación con el aire a un ángulo crítico θ_c. Esta situación, llamada *reflexión interna total,* se ilustra en la figura 8–11. Un análisis detallado en términos de la teoría electromagnética muestra que el índice de refracción a lo largo de la línea AB es real, e imaginario a lo largo de BC.

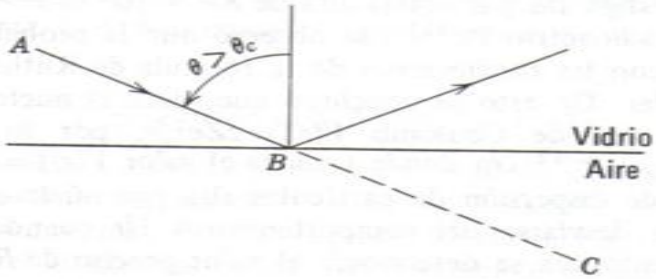

Figura 8-11. Ilustración de la reflexión interna total.

Asimismo, muestra que en la región BC hay vibraciones electromagnéticas cuya forma es igual a la onda estacionaria exponencial decreciente de la ecuación (8–34) para la región $E < V(x)$. Para esta onda electromagnética estacionaria el flujo de energía es cero, como también lo es el flujo de probabilidad para una onda cuántica estacionaria. Sin embargo, al colocar un segundo bloque de vidrio suficientemente cerca del primero de modo que la intensidad de las vibraciones electromagnéticas sea apreciable, éstas serán recogidas y se propagarán a través del segundo bloque: las vibraciones electromagnéticas en el claro de aire comunicarán un flujo de energía a este segundo bloque. Esta *reflexión interna total frustrada* se ilustra en la figura 8–12. Acontece esencialmente lo mismo en el caso cuántico cuando el espesor de la región donde $E < V(x)$, en lugar de ser infinito (potencial de escalón), es finito (potencial de barrera). Newton fue el primero (alrededor de 1700) en

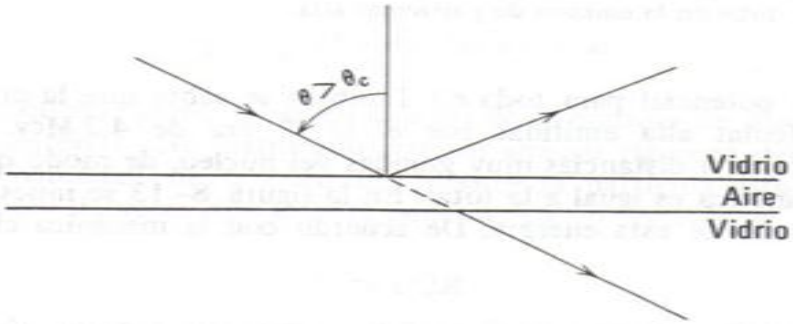

Figura 8-12. Ilustración de la reflexión interna frustrada.

www.FreeLibros.me

observar este tipo de transmisión para ángulos mayores que θ_c. La ecuación que relaciona la intensidad del haz transmitido con el espesor del claro de aire y los otros parámetros, es idéntica, en forma, a la ecuación (8–53). Esto ha sido comprobado experimentalmente.

La primera vez que se discutió la penetración de barreras por partículas fue en relación con la emisión de partículas alfa por elementos radioactivos. Como ejemplo típico, considere un núcleo del elemento radioactivo U^{238}. Mediante experimentos de dispersión de Rutherford, ha sido investigada la energía potencial $V(r)$ de la partícula alfa a una distancia r del núcleo. Utilizando como partícula testigo las partículas alfa de 8.8×10^6 ev $= 8.8$ Mev* emitidas por el elemento radioactivo Po^{212}, se observó que la probabilidad de dispersión concordaba con las predicciones de la fórmula de Rutherford sobre todo el intervalo angular. De esto se concluyó que, para el núcleo de U^{238}, $V(r)$ coincidía con la ley de Coulomb $V(r) = zZe^2/r$, por lo menos hasta la distancia $r' = 3.0 \times 10^{-12}$ cm donde tomaba el valor $V(r') = 8.8$ Mev. A partir de experimentos de dispersión de partículas alfa por núcleos ligeros, se sabía que $V(r)$ debería desviarse del comportamiento $1/r$ cuando $r < R$, el radio nuclear, aunque entonces se desconocía el valor preciso de R para los núcleos radioactivos pesados. Además, puesto que ocasionalmente se emiten partículas alfa del núcleo U^{238}, se aceptó su existencia dentro de tales núcleos —a los que están ligados por el potencial $V(r)$. De estos argumentos se concluyó que la forma de $V(r)$ para $r < r'$ debería coincidir cualitativamente con la indicada en la figura 8–13. (Esta hipótesis ha sido confirmada en experimentos recientes con partículas alfa de energía suficientemente grande como para

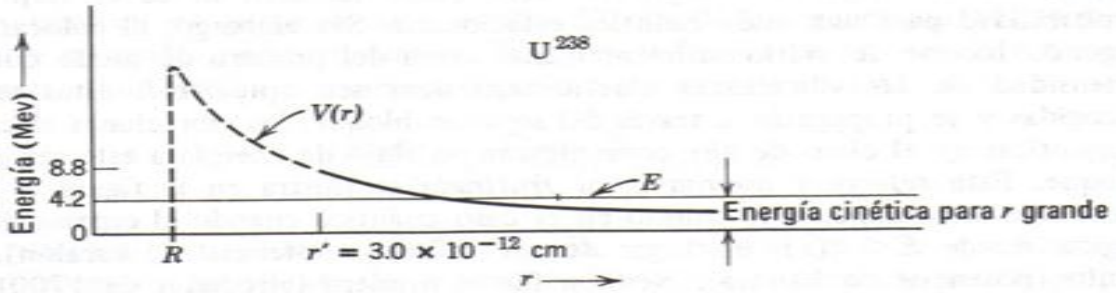

Figura 8-13. Un diagrama de energía que muestra la relación entre las energías potencial y total en la emisión de partículas alfa.

investigar el potencial para toda r.) También se sabía que la energía cinética de las partículas alfa emitidas por el U^{238} era de 4.2 Mev. Esta energía cinética se mide a distancias muy grandes del núcleo, de modo que $V(r) = 0$ y la energía cinética es igual a la total. En la figura 8–13 se muestra también el valor constante de esta energía. De acuerdo con la mecánica clásica la situa-

* 1 Mev $= 10^6$ ev $= 1.602 \times 10^{-6}$ erg. Esta es una unidad de energía que frecuentemente se emplea en la física nuclear.

www.FreeLibros.me

ción es completamente paradójica. Una partícula alfa de energía total E se encuentra inicialmente en la región $r < R$. La región está separada del resto del espacio por un potencial de barrera cuya altura es, por lo menos, igual al duplo de E. Sin embargo, ocasionalmente se observa que la partícula penetra la barrera y se aleja del núcleo.

En 1928 Gamow, Condon y Gurney consideraron la emisión de partículas alfa como un problema cuántico de penetración de una barrera. Propusieron que $V(r) = zZe^2/r$ para $r > R$ y $V(r) < E$ para $r < R$, como se muestra en la figura 8–13. Ya que $K_{||}a \gg 1$, se empleó la ecuación (8–54) para evaluar el factor de transmisión T. Resulta que $K_{||}a$ es una cantidad tan grande que la exponencial domina completamente el comportamiento de T, de modo que basta tomar

$$T \simeq e^{-2K_{||}a} = e^{-2\sqrt{(2m/\hbar^2)(V_0 - E)}\,a}$$

Aunque esta expresión es válida para una barrera de altura V_0 y espesor a, puede aplicarse a una barrera $V(r)$ si se la considera que consta de un conjunto de barreras rectangulares adyacentes de altura $V(r_i)$ y espesor Δr_i. La razón es que, en el límite, las reflexiones producidas en las discontinuidades en las barreras rectangulares no contribuyen apreciablemente al factor de transmisión, y su valor está determinado completamente por el decremento exponencial en la función propia en la región interna de las barreras. El factor de transmisión correspondiente a la i-ésima barrera rectangular es

$$T_i = e^{-2\sqrt{(2m/\hbar^2)[V(r_i) - E]}\,\Delta r_i}$$

Si se pueden ignorar las reflexiones de modo que no exista interacción entre las barreras individuales, el factor total de transmisión será igual al producto de los factores individuales de transmisión, ya que las probabilidades independientes son multiplicativas. De este modo

$$\begin{aligned} T &= e^{-2\sqrt{(2m/\hbar^2)[V(r_1) - E]}\,\Delta r_1} e^{-2\sqrt{(2m/\hbar^2)[V(r_2) - E]}\,\Delta r_2} e^{-2\sqrt{(2m/\hbar^2)V[(r_3) - E]}\,\Delta r_3} \cdots \\ &= e^{-2\left(\sqrt{(2m/\hbar^2)[V(r_1) - E]}\,\Delta r_1 + \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(r_2) - E]}\,\Delta r_2 + \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(r_3) - E]}\,\Delta r_3 + \cdots\right)} \\ &= e^{-2\sum_i \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(r_i) - E]}\,\Delta r_i} \end{aligned}$$

Si Δr_i es muy pequeño, la expresión anterior toma la forma

$$T = e^{-2\int \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(r) - E]}\,dr} \tag{8–58}$$

Si T es muy pequeño, como lo es en el caso de la emisión de partículas alfa, el tratamiento anterior está justificado por un análisis riguroso del problema.

T es la probabilidad de que en un intento la partícula alfa penetre la barrera. El número de veces que intenta penetrar en un segundo es

$$N \simeq v/2R \tag{8–59}$$

si se supone que la partícula alfa se encuentra rebotando con velocidad v

www.FreeLibros.me

dentro del núcleo de diámetro $2R$. Así, la probabilidad de que el núcleo emita una partícula alfa por segundo, que se designa por λ, es

$$\lambda \simeq \frac{v}{2R} e^{-2\int_R^\infty \sqrt{(2m/\hbar^2)[(zZe^2/r)-E]}\,dr} \tag{8-60}$$

Al aplicar esta expresión a un núcleo radioactivo determinado se conocen todas las cantidades que intervienen en esta expresión, salvo v y R. Suponiendo que v es comparable a la velocidad de la partícula alfa después de la emisión (esto es, $\frac{1}{2}mv = E$), entonces λ es sólo una función del radio nuclear R. Tomando el valor $R \simeq 9 \times 10^{-13}$ cm, que se infiere del análisis de Rutherford de la dispersión de partículas alfa por núcleos ligeros, Gamow, Condon y Gurney obtuvieron valores para λ que concordaban razonablemente con los experimentales, a pesar de que variaban dentro de un intervalo muy grande. Para U^{238}, $\lambda = 5 \times 10^{-18}$ seg^{-1}; para Po^{212}, $\lambda = 2 \times 10^{6}$ seg^{-1}. Esta variación se debe principalmente a que la energía de emisión E cambia notablemente de un elemento a otro; por otra parte, la altura y anchura de la barrera (Z y R) permanece aproximadamente constante dentro del intervalo de los elementos radioactivos.

La aplicación satisfactoria de la mecánica cuántica al proceso de la emisión de partículas alfa es uno de los apoyos más sólidos a esta teoría. Asimismo, este proceso ilustra estupendamente la dualidad corpúsculo-onda. La "partícula" alfa puede localizarse como tal cuando se encuentra fuera de la barrera; al penetrarla se comporta como una onda. Cualquier intento de localizarla dentro de la barrera introduciría, de acuerdo con el principio de incertidumbre, una indeterminación tan grande en la energía de la partícula que no sería posible afirmar con seguridad que no estuviera pasando por encima de la barrera.

4. Potenciales de pozo cuadrado

En esta sección discutiremos el potencial más simple que puede confinar una partícula en una región finita del espacio, un *potencial de pozo cuadrado*, que se indica en la figura 8–14. Matemáticamente:

$$V(x) = \begin{matrix} V_0, & x < -a/2, \quad x > +a/2 \\ 0, & -a/2 < x < +a/2 \end{matrix} \tag{8-61}$$

Consideremos en primer lugar, el caso:

$E > V_0$ (ondas viajeras)

Desde el punto de vista clásico, una partícula que se moviera bajo la influencia de este potencial con energía total $E > V_0$ podría moverse a todo lo largo del eje x. Al entrar en la región $-a/2 < x < +a/2$, recibiría una impulsión aceleradora y viajaría en ella con un impulso mayor que el impulso inicial. Al abandonar esta región recibiría una impulsión desaceleradora de manera que su impulso final sería igual al impulso inicial. No desarrollaremos

www.FreeLibros.me

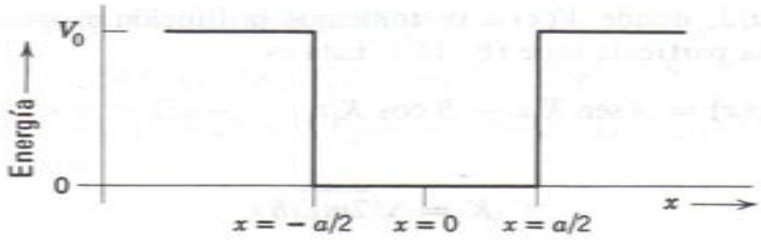

Figura 8-14. Un potencial de pozo cuadrado.

aquí la solución de onda viajera en el problema cuántico, *solución que existe para toda* $E > V_0$, ya que son esencialmente las mismas que aquellas para el potencial de barrera con $E > V_0$. Efectivamente, se puede obtener el factor T de transmisión directamente de la ecuación (8–55), siempre que los términos sean definidos apropiadamente. Este factor es menor que la unidad, como en el caso anterior, salvo para aquellas energías cuando a es igual a un número entero o semientero de longitudes de onda en la región $-a/2 < x < +a/2$. Posteriormente discutiremos la solución con ondas estacionarias para el potencial de pozo cuadrado cuando $E > V_0$.

Consideremos ahora el caso:

$E < V_0$ (ondas estacionarias)

Si la energía total de la partícula es $E < V_0$, ésta clásicamente sólo se podría encontrar en la región $-a/2 < x < +a/2$. La partícula estaría confinada en esta región y rebotaría constantemente en las paredes con un impulso de magnitud constante. Además, se predice clásicamente que el valor de la energía total E del estado ligado puede tomar cualquier valor. En la sección 5 del capítulo 7 hemos demostrado cualitativamente que sólo *ciertos valores son posibles para la energía total E*. En esta sección calcularemos cuantitativamente los valores propios discretos, y las correspondientes funciones propias, para el potencial de pozo cuadrado.

Frecuentemente se emplea este potencial en la mecánica cuántica para representar una situación en la que la partícula se mueve en una región restringida del espacio bajo la influencia de las fuerzas que la confinan a esa región. Aunque este potencial simplificado pierde algunos detalles del movimiento, conserva la característica fundamental de ligar la partícula a una región de un tamaño determinado mediante fuerzas de cierta magnitud. Por ejemplo, se pueden explicar muchos aspectos del movimiento de una partícula nuclear en el núcleo suponiendo que la partícula se encuentra bajo la acción de un pozo de potencial con una profundidad de 50 Mev y unas dimensiones lineales de 10^{-12} cm, aproximadamente.

La descripción del movimiento clásico de una partícula ligada por el pozo cuadrado sugiere que lo más apropiado sería buscar soluciones a la ecuación de Schrödinger que tuvieran la forma de ondas estacionarias. Como una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la región

www.FreeLibros.me

$-a/2 < x < +a/2$, donde $V(x) = 0$, tomemos la función propia de onda estacionaria para la partícula libre (8–16′). Esta es

$$\psi(x) = A \operatorname{sen} K_{\mathrm{I}}x + B \cos K_{\mathrm{I}}x, \qquad -a/2 < x < +a/2 \tag{8–62}$$

donde

$$K_{\mathrm{I}} = \sqrt{2mE}/\hbar$$

En las regiones $x < -a/2$ y $x > +a/2$, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo coincide con la ecuación (8–23). De acuerdo con la ecuación (8–25), las soluciones están dadas por

$$\psi(x) = Ce^{K_{\mathrm{II}}x} + De^{-K_{\mathrm{II}}x}, \qquad x < -a/2 \tag{8–63}$$

y

$$\psi(x) = Fe^{K_{\mathrm{II}}x} + Ge^{-K_{\mathrm{II}}x}, \qquad x > +a/2 \tag{8–64}$$

donde

$$K_{\mathrm{II}} = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad \text{y} \quad E < V_0$$

Para determinar las constantes arbitrarias se necesita, en primer lugar, que las funciones propias siempre permanezcan finitas. Considere la ecuación (8–63) cuando $x \to -\infty$. Entonces, se debe tener que

$$D = 0 \tag{8–65}$$

De modo semejante, es necesario tomar

$$F = 0 \tag{8–66}$$

para que la función (8–64) permanezca finita cuando $x \to +\infty$. A continuación es necesario que las funciones propias y su primera derivada sean continuas en $x = -a/2$ y $x = +a/2$. De donde se obtienen las cuatro ecuaciones siguientes:

$$-A \operatorname{sen}(K_{\mathrm{I}}a/2) + B \cos(K_{\mathrm{I}}a/2) = Ce^{-K_{\mathrm{II}}a/2} \tag{8–67}$$

$$AK_{\mathrm{I}} \cos(K_{\mathrm{I}}a/2) + BK_{\mathrm{I}} \operatorname{sen}(K_{\mathrm{I}}a/2) = CK_{\mathrm{II}}e^{-K_{\mathrm{II}}a/2} \tag{8–68}$$

$$A \operatorname{sen}(K_{\mathrm{I}}a/2) + B \cos(K_{\mathrm{I}}a/2) = Ge^{-K_{\mathrm{II}}a/2} \tag{8–69}$$

$$AK_{\mathrm{I}} \cos(K_{\mathrm{I}}a/2) - BK_{\mathrm{I}} \operatorname{sen}(K_{\mathrm{I}}a/2) = -GK_{\mathrm{II}}e^{-K_{\mathrm{II}}a/2} \tag{8–70}$$

Substrayendo la ecuación (8–67) de la (8–69),

$$2A \operatorname{sen}(K_{\mathrm{I}}a/2) = (G - C)e^{-K_{\mathrm{II}}a/2} \tag{8–71}$$

Sumando la ecuación (8–67) con la (8–69),

$$2B \cos(K_{\mathrm{I}}a/2) = (G + C)e^{-K_{\mathrm{II}}a/2} \tag{8–72}$$

Substrayendo la ecuación (8–70) de la (8–68)

$$2BK_{\mathrm{I}} \operatorname{sen}(K_{\mathrm{I}}a/2) = (G + C)K_{\mathrm{II}}e^{-K_{\mathrm{II}}a/2} \tag{8–73}$$

www.FreeLibros.me

Sumando la ecuación (8–70) con la (8–68)

$$2AK_{\mathrm{I}} \cos (K_{\mathrm{I}}a/2) = -(G - C)K_{\mathrm{II}}e^{-K_{\mathrm{II}}a/2} \tag{8–74}$$

Siempre que $B \neq 0$ y $(G + C) \neq 0$, podemos dividir la ecuación (8–73) entre la (8–72) y obtener

$$K_{\mathrm{I}} \tan (K_{\mathrm{I}}a/2) = K_{\mathrm{II}} \tag{8–75}$$
$$\text{si} \quad B \neq 0 \quad \text{y} \quad (G + C) \neq 0$$

Siempre que $A \neq 0$ y $(G - C) \neq 0$, podemos dividir la ecuación (8–74) entre la (8–71) y obtener

$$K_{\mathrm{I}} \cot (K_{\mathrm{I}}a/2) = -K_{\mathrm{II}} \tag{8–76}$$
$$\text{si} \quad A \neq 0 \quad \text{y} \quad (G - C) \neq 0$$

Se puede ver fácilmente que es imposible satisfacer simultáneamente las ecuaciones (8–75) y (8–76). En el caso contrario, sería válida la ecuación que se obtiene al sumarlas,

$$K_{\mathrm{I}} \tan (K_{\mathrm{I}}a/2) + K_{\mathrm{I}} \cot (K_{\mathrm{I}}a/2) = 0$$

Al multiplicarla por $\tan (K_{\mathrm{I}}a/2)$ se tendría

$$K_{\mathrm{I}} \tan^2 (K_{\mathrm{I}}a/2) + K_{\mathrm{I}} = 0$$

ó

$$\tan^2 (K_{\mathrm{I}}a/2) = -1$$

Esto es imposible, ya que tanto K_{I} como $a/2$ son reales. Así, sólo es posible satisfacer (8–75) pero no (8–76), o bien satisfacer (8–76) pero no (8–75). Como en el caso de las funciones propias de la cuerda vibrante, las funciones propias para el pozo cuadrado forman dos clases. Para la *primera clase*

$$\begin{aligned} K_{\mathrm{I}} \tan (K_{\mathrm{I}}a/2) &= K_{\mathrm{II}} \\ A &= 0 \\ G - C &= 0 \end{aligned} \tag{8–77}$$

Entonces la ecuación (8–69) toma la forma

$$B \cos (K_{\mathrm{I}}a/2) = Ge^{-K_{\mathrm{II}}a/2}$$
$$G = B \cos (K_{\mathrm{I}}a/2)e^{K_{\mathrm{II}}a/2} = C$$

y las funciones propias son

$$\psi(x) = \begin{cases} [B \cos (K_{\mathrm{I}}a/2)e^{K_{\mathrm{II}}a/2}]e^{K_{\mathrm{II}}x}, & x < -a/2 \\ [B] \cos (K_{\mathrm{I}}x), & -a/2 < x < a/2 \\ [B \cos (K_{\mathrm{I}}a/2)e^{K_{\mathrm{II}}a/2}]e^{-K_{\mathrm{II}}x}, & x > a/2 \end{cases} \tag{8–77'}$$

www.FreeLibros.me

Para la *segunda clase*

$$\begin{aligned} K_{|} \cot (K_{|}a/2) &= -K_{||} \\ B &= 0 \\ G + C &= 0 \end{aligned} \tag{8–78}$$

Entonces la ecuación (8–69) toma la forma

$$\begin{aligned} A \operatorname{sen} (K_{|}a/2) &= Ge^{-K_{||}a/2} \\ G = A \operatorname{sen} (K_{|}a/2)e^{K_{||}a/2} &= -C \end{aligned}$$

y las funciones propias son

$$\psi(x) = \begin{cases} [-A \operatorname{sen} (K_{|}a/2)e^{K_{||}a/2}]e^{K_{||}x}, & x < -a/2 \\ [A] \operatorname{sen} (K_{|}x), & -a/2 < x < a/2 \\ [A \operatorname{sen} (K_{|}a/2)e^{K_{||}a/2}]e^{-K_{||}x}, & x > a/2 \end{cases} \tag{8–78'}$$

Considere la primera de las ecuaciones (8–77). Evaluando $K_{|}$ y $K_{||}$ y multiplicando por $a/2$, la ecuación toma la forma

$$\sqrt{mEa^2/2\hbar^2} \tan \left(\sqrt{mEa^2/2\hbar^2}\right) = \sqrt{m(V_0 - E)a^2/2\hbar^2} \tag{8–79}$$

Esta es una ecuación para la incógnita E si se conocen tanto la masa m de la partícula como la profundidad V_0 y el espesor a del potencial. Sus soluciones dan los valores permitidos para la energía total de la partícula —los valores propios correspondientes a las funciones propias de la primera clase. Las soluciones de la ecuación sólo se pueden obtener por métodos numéricos o gráficos. Presentaremos un método gráfico simple, que ilustrará los rasgos característicos de la ecuación. Hagamos el cambio de variable

$$\epsilon \equiv \sqrt{mEa^2/2\hbar^2} \tag{8–80}$$

de manera que la ecuación toma la forma

$$\epsilon \tan \epsilon = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \epsilon^2} \tag{8–81}$$

Si hacemos la gráfica de las funciones

$$p(\epsilon) = \epsilon \tan \epsilon$$

y

$$q(\epsilon) = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \epsilon^2}$$

en el mismo diagrama, las intersecciones dan los valores de ϵ que resuelven la ecuación (8–81). Esta representación está dada en la figura 8–15. Los ceros de la función $p(\epsilon)$ se encuentran en $\epsilon = 0, \pi, 2\pi, \ldots$, y para $\epsilon = \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \ldots$ su valor es infinito. La función $q(\epsilon)$ está representada por un cuarto de circunferencia de radio $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$. De la figura se deduce que el número de soluciones posibles de la ecuación (8–81) depende del radio del

www.FreeLibros.me

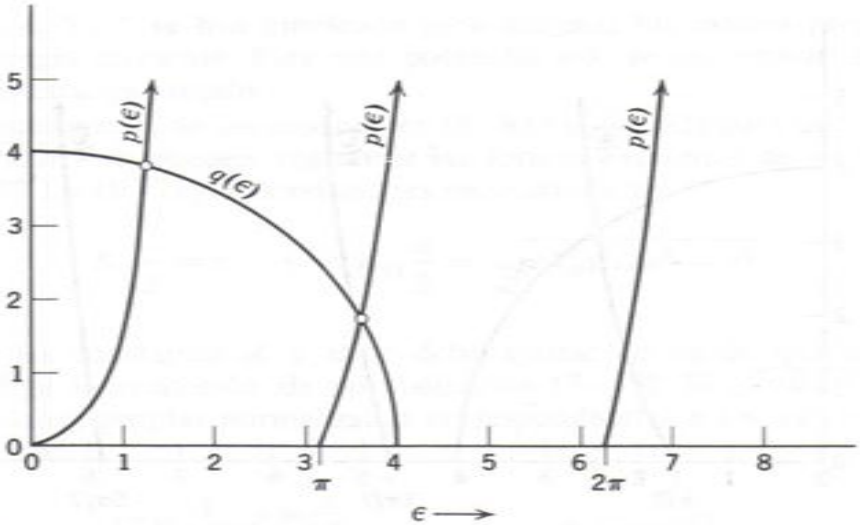

Figura 8-15. Una solución gráfica de la ecuación para los valores propios de la primera clase de un potencial de pozo cuadrado dado. [Solución de $\epsilon \tan \epsilon = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \epsilon^2}$ o $\mathbf{p}(\epsilon) = \mathbf{q}(\epsilon)$.]

cuarto de circunferencia. Cada solución da un valor propio para $E < V_0$ que corresponde a una función propia de la primera clase. Existe un valor propio si $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < \pi$; dos si $\pi \leqslant \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 2\pi$; tres si $2\pi < \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 3\pi$, etc. En la figura se ilustra el caso $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 4$; existen dos soluciones: $\epsilon \simeq 1.25$ y $\epsilon \simeq 3.60$. De la ecuación (8–80) se tiene que los valores propios son

$$E = \epsilon^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} = \epsilon^2 \frac{2\hbar^2}{mV_0a^2} V_0 \simeq \left(\frac{1.25}{4}\right)^2 V_0 \simeq 0.098 V_0$$

y

$$E = \epsilon^2 \frac{2\hbar^2}{mV_0a^2} V_0 \simeq \left(\frac{3.60}{4}\right)^2 V_0 \simeq 0.81 V_0$$

Los valores propios asociados con las funciones propias de la segunda clase están dados por las soluciones de una ecuación análoga obtenida a partir de (8–78):

$$-\epsilon \cot \epsilon = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \epsilon^2} \tag{8–82}$$

La figura 8–16 ilustra la solución a esta ecuación. Es claro que no existirán valores propios para $E < V_0$ que correspondan a funciones propias de la segunda clase si $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < \pi/2$; existirá uno si $\pi/2 \leqslant \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 3\pi/2$; dos si $3\pi/2 \leqslant \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 5\pi/2$ etc. La figura ilustra el caso para $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 4$, la única solución de la ecuación (8–82) es $\epsilon \simeq 2.45$ y el valor propio es

$$E = \epsilon^2 \frac{2\hbar^2}{mV_0a^2} V_0 \simeq \left(\frac{2.45}{4}\right)^2 V_0 \simeq 0.37 V_0$$

www.FreeLibros.me

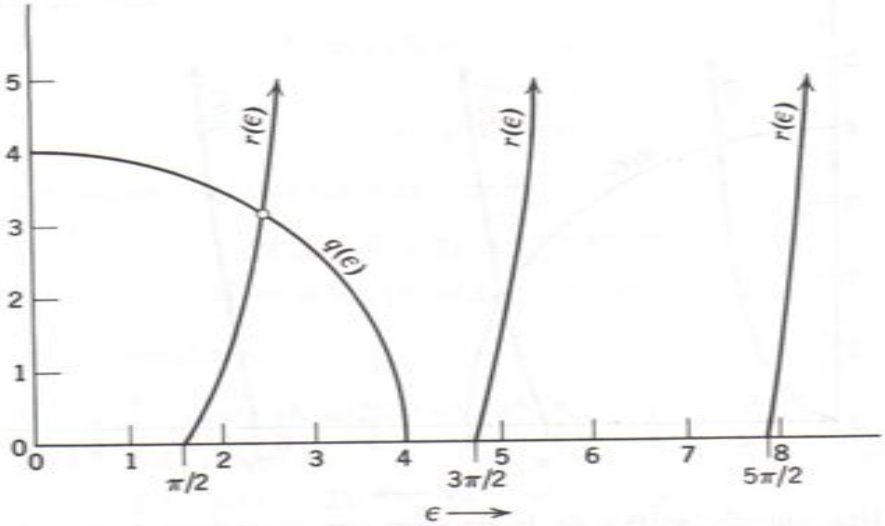

Figura 8-16. Una solución gráfica de la ecuación para los valores propios de la segunda clase de un potencial de pozo cuadrado dado. [Solución de $-\epsilon \cot \epsilon = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \epsilon^2}$ o $r(\epsilon) = q(\epsilon)$.]

Para cualquier pozo que se tenga, observamos que es limitado el número de valores permitidos para la energía total $E < V_0$: éstos son los valores propios discretos de los estados ligados de la partícula. Por otra parte, sabemos que si $E > V_0$ están permitidos todos los valores de la energía total E: los valores propios para los estados no ligados forman un continuo. Si el pozo es poco profundo y/o muy angosto, sólo un estado de la primera clase estará ligado; al aumentar el valor de $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$ se ligará un estado de la segunda clase; para valores aún mayores de este parámetro se ligará otro estado de la primera clase; a continuación se ligará otro de la segunda clase, etc. Consideremos, como ejemplo $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 4$. En la figura 8–17 se ilustran a escala el potencial y los valores propios discretos y continuos. Los números cuánticos

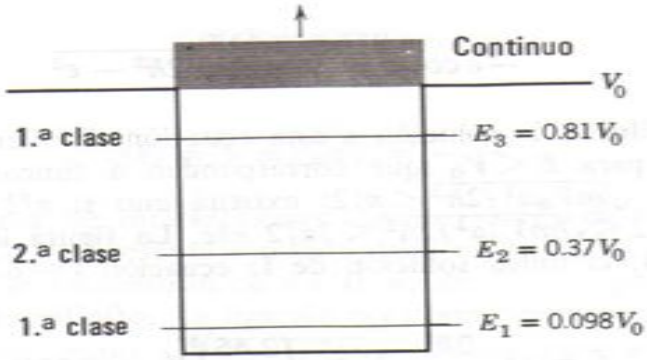

Figura 8-17. Los valores propios de un potencial de pozo cuadrado dado.

www.FreeLibros.me

$n = 1, 2, 3, 4, 5 \ldots$ se han empleado para designar los valores propios en el orden de energía creciente. Para este potencial sólo se encuentran ligados los tres primeros estados propios.

De las soluciones ϵ, de las ecuaciones (8–81) y (8–82) para un valor dado de $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$, se pueden encontrar las formas explícitas de las funciones propias (8–77′) y (8–78). Las relaciones necesarias son

$$K_{\mathrm{I}}\frac{a}{2} = \varepsilon \quad \text{y} \quad K_{\mathrm{II}}\frac{a}{2} = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \varepsilon^2} \tag{8–83}$$

El valor de las constantes A y B se debe ajustar de modo que la función propia satisfaga la condición de normalización (7–49). Si $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 4$, las tres funciones propias normalizadas correspondientes a los valores propios E_1, E_2 y E_3 son

$$\psi_1(x) = \begin{cases} 17.9\,\dfrac{1}{\sqrt{a}}\,e^{3.80\frac{x}{a/2}}, & x \leqslant -a/2 \\ 1.26\,\dfrac{1}{\sqrt{a}}\cos\left(1.25\,\dfrac{x}{a/2}\right), & -a/2 \leqslant x \leqslant a/2 \\ 17.9\,\dfrac{1}{\sqrt{a}}\,e^{-3.80\frac{x}{a/2}}, & x \geqslant a/2 \end{cases}$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} -18.6\,\dfrac{1}{\sqrt{a}}\,e^{3.16\frac{x}{a/2}}, & x \leqslant -a/2 \\ 1.23\,\dfrac{1}{\sqrt{a}}\,\mathrm{sen}\left(2.45\,\dfrac{x}{a/2}\right), & -a/2 \leqslant x \leqslant a/2 \\ 18.6\,\dfrac{1}{\sqrt{a}}\,e^{-3.16\frac{x}{a/2}}, & x \geqslant a/2 \end{cases}$$

$$\psi_3(x) = \begin{cases} -5.80\,\dfrac{1}{\sqrt{a}}\,e^{1.74\frac{x}{a/2}}, & x \leqslant -a/2 \\ 1.13\,\dfrac{1}{\sqrt{a}}\cos\left(3.60\,\dfrac{x}{a/2}\right), & -a/2 \leqslant x \leqslant a/2 \\ -5.80\,\dfrac{1}{\sqrt{a}}\,e^{-1.74\frac{x}{a/2}}, & x \geqslant a/2 \end{cases}$$

En la figura 8–18 se representan gráficamente las funciones propias, multiplicadas por $\sqrt{a}$, en función de $x/(a/2)$.

En esta figura resalta la diferencia esencial entre las dos clases de funciones propias. Las de la primera clase, $\psi_1(x)$ y $\psi_3(x)$ son *funciones pares de x*, esto es,

$$\psi(-x) = +\psi(x) \tag{8–84}$$

www.FreeLibros.me

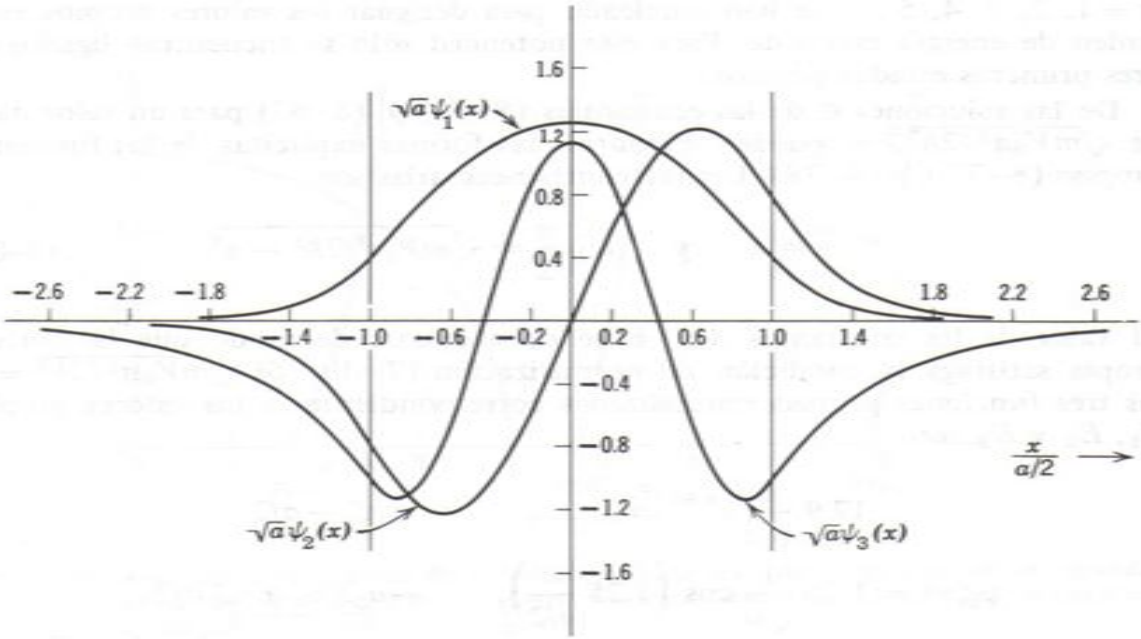

Figura 8-18. Las funciones propias para los estados propios ligados de un potencial de pozo cuadrado dado.

En la mecánica cuántica se dice que son de *paridad par.* La función propia de la segunda clase, $\psi_2(x)$, es una *función non de x,* esto es,

$$\psi(-x) = -\psi(x) \tag{8–85}$$

y se dice que es de *paridad non.* Una inspección de las ecuaciones (8–77′) y (8–78′) demostrará que, para cualquier valor de $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$, todas las funciones de la primera clase son de paridad par, y que las funciones de la segunda clase son de paridad non. Las ondas estacionarias del continuo también se dividen en dos clases, una de paridad par y otra de paridad non. Que todas las funciones de onda estacionaria posean una *paridad definida,* ya sea par o non, es una consecuencia de que se haya elegido el origen del eje x de manera que el potencial de pozo cuadrado $V(x)$ sea una función par de x.* Con esta elección del potencial es intuitivamente obvio que cualquier cantidad mensurable que describa el movimiento de la partícula en un estado propio ligado (o de un estado propio del continuo que corresponda a una onda estacionaria) será una función par de x. Observemos que esto es cierto para la función de densidad de probabilidad $P(x, t)$, tanto para los estados propios de paridad par como para los de paridad non, ya que

$$P(-x, t) = \psi^*(-x)\,\psi(-x) = [\pm\psi^*(x)][\pm\psi(x)] = \psi^*(x)\,\psi(x) = P(x, t) \tag{8–86}$$

* Si en la figura 8–18 se coloca el origen del eje x en $x = -a/2$, por ejemplo, es claro que las funciones propias no tendrán ya una paridad definida.

www.FreeLibros.me

No es cierto para la función de onda en sí cuando se trata de un estado propio de paridad non, ya que la función de onda es una función non de x. Por supuesto, lo anterior no es una contradicción, ya que la función de onda no es mensurable. Las funciones propias de onda viajera no poseen una paridad definida, ya que son combinaciones lineales de funciones propias de onda estacionaria de paridades opuestas. Que las funciones propias de onda estacionaria tengan una paridad definida en el caso unidimensional, si $V(-x) = V(x)$, es de importancia, principalmente porque permite simplificar las operaciones matemáticas en ciertos cálculos cuánticos. Sin embargo, en el problema tridimensional, esta propiedad adquiere un significado más profundo, como posteriormente podrá apreciarse.

En la figura 8–19 se hacen las gráficas, como funciones de $x(a/2)$, de las densidades de probabilidad, multiplicadas por a, para los tres estados propios ligados con $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 4$. También se ilustra en la figura la densidad de probabilidad normalizada predicha clásicamente para una partícula ligada que rebota en los puntos $-a/2$ y $+a/2$. Ya que clásicamente la partícula permanecería tiempos iguales en cada elemento del eje x en esta región la probabilidad de encontrarla en algún elemento sería independiente de su ubicación. La densidad de probabilidad predicha por la mecánica cuántica muestra que, en cada estado propio, existe una probabilidad distinta de cero de encontrar a la partícula en la región excluida clásicamente. El efecto es mayor para $n = 3$, que corresponde al menor valor para $(V_0 - E_n)$. También existen puntos de la región clásicamente permitida donde la densidad de probabilidad cuántica indica que no se puede hallar la partícula.

Si para un potencial dado, $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$ es suficientemente grande, de modo que sean posibles muchos estados propios ligados, la densidad de probabilidad cuántica oscila con mayor rapidez a medida que aumenta el valor de n. Para este potencial consideremos $a\psi_n^*(x)\,\psi_n(x)$, donde n es grande, aunque no tanto que se viole la condición

$$\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - mE_na^2/2\hbar^2} = K_{||}a/2 \gg 1 \qquad (8\text{–}87)$$

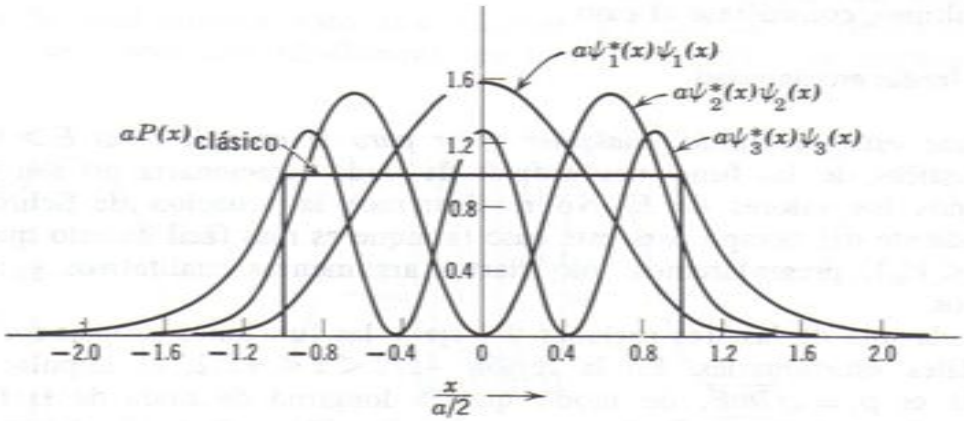

Figura 8-19. Las densidades de probabilidad para los estados propios ligados de un potencial de pozo cuadrado dado.

www.FreeLibros.me

En la figura 8–20 se indica la forma que tiene la densidad de probabilidad. La función $a\psi_n^*(x)\,\psi_n(x)$ oscila rápidamente y, en virtud de la condición (8–87), hay una posibilidad despreciable de encontrar la partícula en la región excluida clásicamente. Cuando $n \to \infty$, las oscilaciones de $a\psi_n^*(x)\psi_n(x)$ son tan rápidas que sólo el comportamiento promedio se podrá observar experimentalmente, y los resultados de la mecánica cuántica se aproximarán a los de la mecánica clásica.

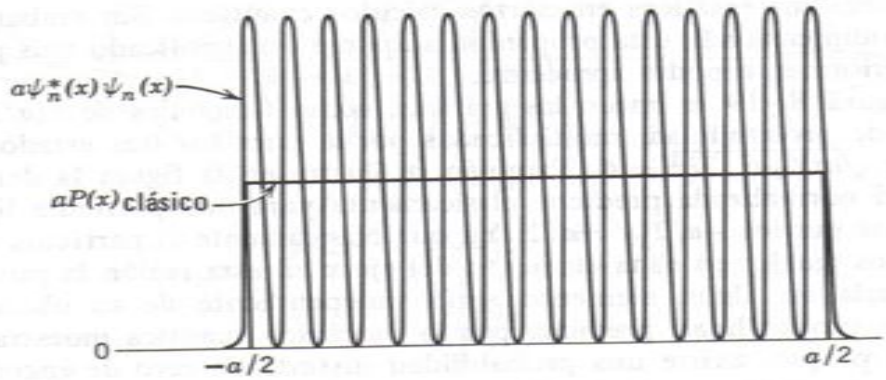

Figura 8-20. Ilustración del modo como se aproxima al límite clásico la densidad de probabilidad para un potencial de pozo cuadrado.

Es interesante observar que en este caso el límite clásico de la teoría de la mecánica cuántica se encuentra en el límite de los números cuánticos grandes, como lo predice el principio de correspondencia de la antigua teoría atómica. Sin embargo, se debe tomar en cuenta que es necesario aplicar la restricción (8–87), la cual no fue prevista por el anterior principio de correspondencia. Por otra parte, hemos visto que para los estados propios no ligados, el acercamiento al límite clásico no tiene relación alguna con la técnica de hacer $n \to \infty$.

Por último, considérese el caso

$E > V_0$ (ondas estacionarias)

Aunque *está permitido cualquier valor para la energía total* $E > V_0$, las características de las funciones propias de onda estacionaria no son iguales para todos los valores de E. No resolveremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este caso (aunque es más fácil hacerlo que en el caso $E < V_0$); presentaremos sólo ciertos argumentos cualitativos y algunos resultados.

En cada una de las tres regiones del eje x las funciones propias son ondas sinusoidales estacionarias. En la región $-a/2 < x < +a/2$, el impulso de la partícula es $p_| = \sqrt{2mE}$, de modo que la longitud de onda de la función propia es $\lambda_| = h/\sqrt{2mE}$. En las regiones $x < -a/2$ y $x > +a/2$, el impulso es $p_{||} = \sqrt{2m(E - V_0)}$ y la longitud de onda es $\lambda_{||} = h/\sqrt{2m(E - V_0)}$. La figura 8–21 describe la forma cualitativa de una función propia de paridad par

www.FreeLibros.me

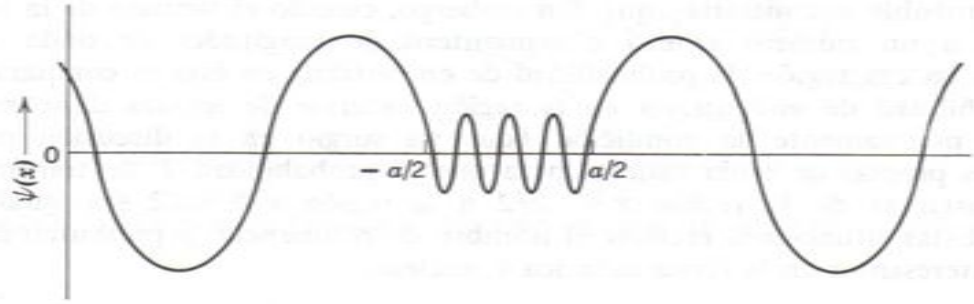

Figura 8-21. Una función propia de paridad par para un estado no ligado en un potencial de pozo cuadrado y un valor típico para la energía total.

para un valor típico de E. Puesto que $\lambda_{||} > \lambda_{|}$, es posible unir lisamente las soluciones sinusoidales de las tres regiones sólo si la amplitud en la región $-a/2 < x < +a/2$ es menor que en las dos exteriores. Sin embargo, cuando el valor de E es tal que un número entero de longitudes de onda caben en la región $-a/2 < x < +a/2$, la pendiente de la solución interior en la frontera es igual a cero, de modo que las soluciones interior y exterior tienen la misma amplitud. En la figura 8–22 se indica esta situación, donde la función propia corresponde a un valor de E ligeramente mayor que el correspondiente a la figura anterior. Para funciones propias de paridad non, la amplitud en la región interior es menor que la amplitud de la exterior, salvo para aquellos valores de E tales que un número semientero de longitudes de onda caben en la región interior. Para los dos tipos de funciones propias observamos que la probabilidad de encontrar a la partícula en la región interior,

$$\int_{-a/2}^{a/2} \psi^*(x)\, \psi(x)\, dx$$

es, en general, menor que la probabilidad de encontrarla en una región exterior de igual tamaño. Esto es el análogo de la afirmación clásica de que la partícula se mueve más rápidamente en la región interior, de manera que es

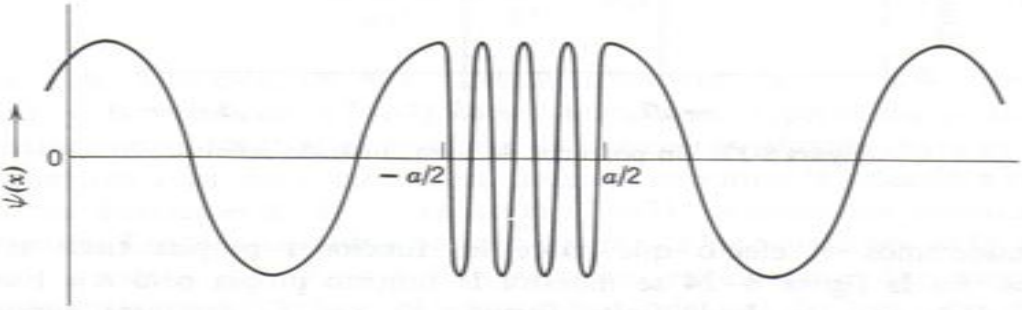

Figura 8-22. Una función propia de paridad par para un potencial de pozo cuadrado y una energía total en resonancia.

www.FreeLibros.me

menos probable encontrarla aquí. Sin embargo, cuando el tamaño de la región es igual a un número entero o semientero de longitudes de onda de la partícula en esa región, la probabilidad de encontrarla en ésta es comparable a la probabilidad de encontrarla en la región exterior de iguales dimensiones. Esta es precisamente la condición (que ya surgió en la discusión de las funciones propias de onda viajera) para que la probabilidad T de transmisión de la partícula de la región $x < -a/2$ a la región $x > +a/2$ sea igual a la unidad. Estas situaciones reciben el nombre de *resonancia*, y presentan condiciones interesantes en la física atómica y nuclear.

5. El potencial cuadrado infinito

Se tiene un importante caso especial cuando en el potencial de pozo cuadrado $V_0 \to \infty$, como se ilustra en la figura 8–23. Este potencial es

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -a/2 < x < a/2 \\ \infty, & x < -a/2, \quad x > a/2 \end{cases} \tag{8–88}$$

Veremos que es fácil obtener expresiones en forma cerrada para las funciones y los valores propios con este potencial. Para valores pequeños del número cuántico n, estos valores y funciones propios se pueden emplear frecuentemente para aproximar los valores y funciones propios (misma n) de un potencial de pozo cuadrado con V_0 grande, aunque finita. También se usa un potencial de pozo cuadrado infinito para discutir las propiedades cuánticas de un gas de moléculas (o de otras partículas) que están totalmente confinadas dentro de una caja. Además, este potencial también se usa en la técnica de normalización de la función propia de la partícula libre en una caja de paredes impenetrables.

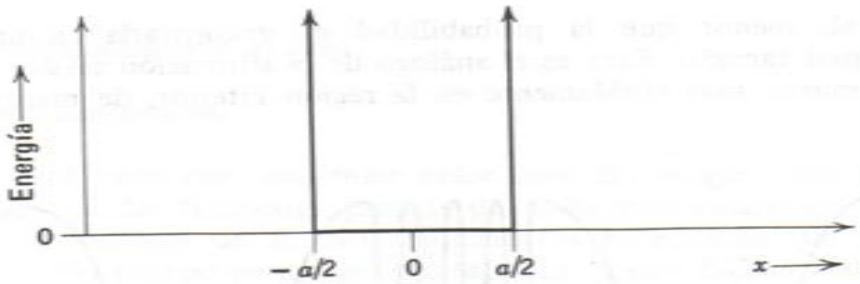

Figura 8-23. Un potencial de pozo cuadrado infinito.

Consideremos el efecto que sobre las funciones propias tiene el que $V_0 \to \infty$. En la figura 8–24 se muestra la función propia para $n = 1$ en un potencial de pozo cuadrado finito. Cuando $V_0 \to \infty$, E_1 cambiará, aunque lo hará lentamente en comparación con el cambio de V_0. Así, el coeficiente de x en la exponencial crecerá indefinidamente y el valor de $\psi_1(x)$ decrecerá

www.FreeLibros.me

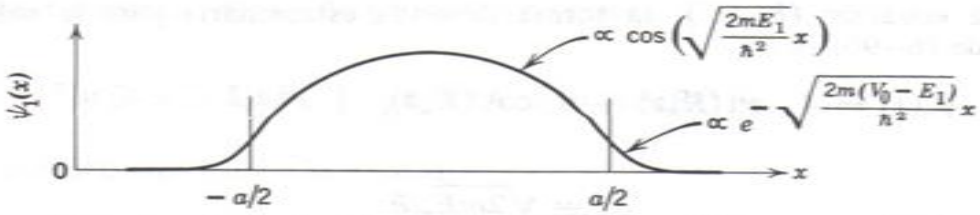

Figura 8-24. La primera función propia para un potencial de pozo cuadrado finito.

infinitamente rápido al aumentar x cuando $x > a/2$. En el límite $\psi_1(x)$ será igual a cero para toda $x > a/2$. Para que la función propia sea continua dondequiera es necesario que $\psi_1(x) = 0$ en $x = a/2$. Para un potencial de pozo cuadrado infinito $\psi_1(x)$ debe tener la forma indicada en la figura 8–25. Este argumento es válido para todas las funciones propias, esto es:

$$\psi_n(x) = 0, \qquad x \leqslant -a/2, \qquad x \geqslant a/2 \tag{8–89}$$

para toda n. La condición (8–89) se puede satisfacer sólo si deja de cumplir el requisito (7–38) que exige que la derivada $d\psi_n(x)/dx$ de una función propia sea continua dondequiera. Sin embargo, al revisar el argumento aducido para justificar este requisito, el lector encontrará que $d\psi_n(x)/dx$ deberá ser continua sólo cuando V_0 es finita.

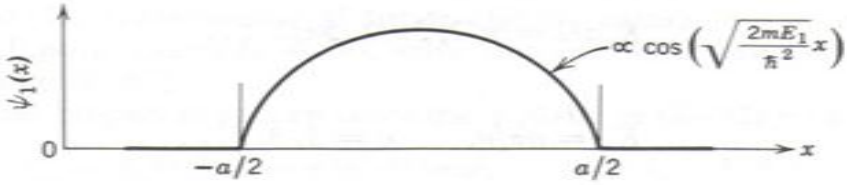

Figura 8-25. La primera función propia para un potencial de pozo cuadrado infinito.

Para el potencial de pozo cuadrado infinito, debemos encontrar la solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_n\psi_n(x) = 0 \tag{8–90}$$

sujeta a la condición (8–89). Comparándola con la ecuación diferencial (7–60) y la condición (7–63), observamos que el problema presente es matemáticamente idéntico al problema de una cuerda vibrante cuyos extremos se encuentran fijos. En consecuencia, podemos encontrar la solución a nuestro problema directamente de la ecuación (7–65) haciendo las substituciones pertinentes. También se podría obtener a partir de las ecuaciones de la sección anterior haciendo que $V_0 \to \infty$. Sin embargo, resolveremos directamente la ecuación para ilustrar cómo el conocimiento de que las funciones propias deben tener una paridad definida, ya que $V(-x) = V(x)$, se puede emplear para simplificar el cálculo.

www.FreeLibros.me

De la ecuación (8–16′), la forma de onda estacionaria para la solución general de (8–90) es

$$\psi_n(x) = A_n \operatorname{sen}(K_n x) + B_n \cos(K_n x), \qquad -a/2 \leqslant x \leqslant a/2$$

donde

$$K_n = \sqrt{2mE_n}/\hbar$$

Ya que $\cos(K_n x)$ es una función par de x y $\operatorname{sen}(K_n x)$ es una función non de x, las funciones propias de paridad par son

$$\psi_n(x) = B_n \cos(K_n x), \qquad -a/2 \leqslant x \leqslant a/2 \tag{8–91}$$

y las de paridad non,

$$\psi_n(x) = A_n \operatorname{sen}(K_n x), \qquad -a/2 \leqslant x \leqslant a/2 \tag{8–92}$$

En ambos casos los valores de K_n deben ser tales que se satisfagan las condiciones (8–89). En virtud de que las funciones propias tienen paridad definida, es necesario aplicar la condición (8–89) sólo en $x = +a/2$. A partir de las ecuaciones (8–91) tenemos

$$0 = B_n \cos(K_n a/2)$$

de modo que

$$K_n a/2 = \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \ldots$$

o sea

$$K_n = n\pi/a, \qquad n = 1, 3, 5, \ldots \tag{8–93}$$

Así, a las funciones propias de paridad par le corresponden los números cuánticos $n = 1, 3, 5, \ldots$. A continuación, apliquemos a (8–92) la condición (8–89) en $x = +a/2$:

$$0 = A_n \operatorname{sen}(K_n a/2)$$

de modo que

$$K_n a/2 = \pi, 2\pi, 3\pi, \ldots$$

o sea

$$K_n = n\pi/a, \qquad n = 2, 4, 6, \ldots^* \tag{8–94}$$

A las funciones propias de paridad non les corresponden los números cuánticos $n = 2, 4, 6, \ldots$.

Para normalizar las funciones propias debemos calcular la integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\, \psi_n(x)\, dx$$

* El valor $n = 0$ satisface la condición (8–89), pero conduce a una solución carente de interés, $\psi_0(x) = 0$ para toda x.

www.FreeLibros.me

Para las funciones propias de paridad par se tiene

$$B_n^2 \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2 (K_n x)\, dx = B_n^2 \frac{a}{2}$$

y ya que debe ser igual a la unidad,

$$B_n = \sqrt{2/a}$$

En forma análoga, se debe tener que

$$A_n = \sqrt{2/a}$$

Así, las funciones propias normalizadas son

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{2/a} \cos (n\pi x/a), & n = 1, 3, 5, \ldots, \quad -a/2 \leqslant x \leqslant a/2 \\ \sqrt{2/a} \operatorname{sen} (n\pi x/a), & n = 2, 4, 6, \ldots, \quad -a/2 \leqslant x \leqslant a/2 \\ 0, & x \leqslant -a/2, \quad x \geqslant a/2 \end{cases} \tag{8–95}$$

Apenas es necesario representar gráficamente $\psi_n(x)$ o $\psi_n^*(x)\, \psi_n(x)$. Salvo por el hecho de que no hay penetración en la región excluida clásicamente para un potencial de pozo cuadrado infinito, las funciones propias y las densidades de probabilidad son semejantes a las correspondientes al potencial de pozo cuadrado finito. La aproximación al límite clásico, cuando $n \to \infty$, es la misma que para el pozo cuadrado finito, salvo que no existe restricción sobre n, análoga a la de (8–87).

Los valores propios se pueden encontrar a partir de (8–93) y (8–94):

$$E_n = K_n^2 \hbar^2/2m = \pi^2 \hbar^2 n^2/2ma^2, \qquad n = 1, 2, 3, 4, 5, \ldots \tag{8–96}$$

En la figura 8–26 se ilustra el potencial $V(x)$ y algunos de los primeros valores propios. Por supuesto, para un potencial de pozo cuadrado infinito

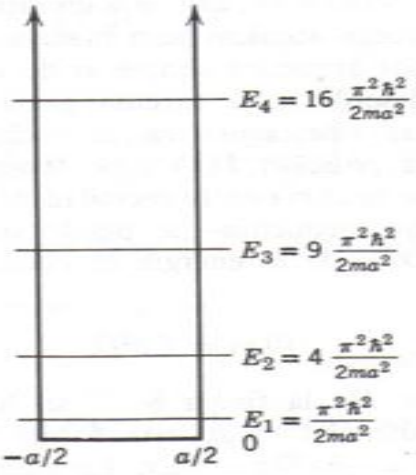

Figura 8-26. Los primeros valores propios para un potencial de pozo cuadrado infinito.

www.FreeLibros.me

todos los valores propios son discretos, puesto que la partícula está ligada para todo valor de la energía. Particularmente interesante es el primer valor propio

$$E_1 = \pi^2\hbar^2/2ma^2 \tag{8–97}$$

Este recibe el nombre de *energía del punto cero.* Es la mínima energía posible que puede tener una partícula si está confinada por un potencial de pozo cuadrado infinito a la región $-a/2 \leqslant x \leqslant +a/2$. La energía total de la partícula *no puede* ser igual a cero. Esta es una consecuencia del principio de incertidumbre. Si la partícula está confinada por el potencial, conocemos su coordenada con una incertidumbre $\Delta x = a$. En consecuencia, la incertidumbre en su impulso x será $\Delta p_x \geqslant \hbar/\Delta x = \hbar/a$. El principio de incertidumbre prohíbe que la energía total de una partícula confinada sea igual a cero, ya que esto implicaría que la incertidumbre en su impulso sería igual a cero. Para el estado propio de energía E_1, la magnitud del impulso es $p_1 = \sqrt{2mE_1} = \pi\hbar/a$. Puesto que una partícula, cuyo comportamiento está descrito por una función propia de onda estacionaria, se puede mover en cualquier dirección, la incertidumbre en el valor del impulso x es igual a $\Delta p_x = 2p_1 = 2\pi\hbar/a$. Lo anterior concuerda con el límite inferior impuesto por el principio de incertidumbre. La energía del punto cero explica varios fenómenos interesantes, en especial los relativos al comportamiento de la materia a temperaturas muy bajas.

6. El oscilador armónico simple

Hemos discutido la mayoría de los casos interesantes de potenciales que son funciones discontinuas de la posición y con valor constante entre discontinuidades vecinas. Consideremos ahora potenciales que son funciones continuas de la posición. Sólo un número reducido de ellos permite obtener una solución a la ecuación de Schrödinger en forma cerrada. Afortunadamente, entre éstos se encuentran los casos más importantes: por ejemplo, el potencial de Coulomb, $V(r) \propto r^{-1}$, que se discutirá en el capítulo 10, y el potencial de oscilador armónico simple, $V(x) \propto x^2$, que será discutido en esta sección. En el capítulo siguiente se discutirán técnicas para manejar potenciales más reacios.

El potencial de oscilador armónico simple es de una gran importancia, ya que puede usarse para describir una extensa gama de problemas donde la partícula ejecuta pequeñas vibraciones en la vecindad de la posición de equilibrio estable. En esta posición $V(x)$ debe tener un mínimo. Para toda $V(x)$ continua, la forma de la curva en la vecindad del mínimo —que es la que interesa para las vibraciones pequeñas— se puede aproximar a una parábola. Así, si los ceros del eje x y de la energía se encuentran en el mínimo, se puede escribir

$$V(x) = Cx^2/2 \tag{8–98}$$

donde C es una constante. En la figura 8–27 se ilustra este potencial. Una partícula cuya energía potencial tenga esta forma experimenta una fuerza armónica de restitución $F = -\partial V/\partial x = -Cx$. La mecánica clásica predice que si la partícula se desplaza una distancia x_0 del punto de equilibrio, al soltarla

www.FreeLibros.me

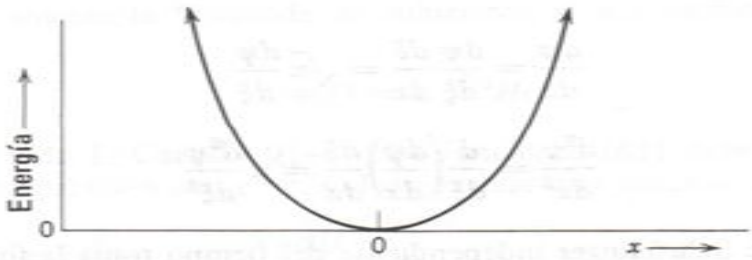

Figura 8-27. Un potencial de oscilador armónico simple.

oscilará sinusoidalmente alrededor de la posición de equilibrio, con una frecuencia

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{C}{m}} \tag{8–99}$$

donde m es la masa de la partícula. Además, la energía total de la partícula es proporcional a $x_0{}^2$ y puede tomar cualquier valor, ya que x_0 es arbitraria. Sin embargo, la antigua teoría cuántica (postulado de Planck) predice que E sólo puede tomar alguno de los valores

$$E_n = nh\nu, \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{8–100}$$

¿Cuáles son las predicciones de la mecánica cuántica?

Especifiquemos el potencial de oscilador armónico simple (8–98) en términos de la frecuencia clásica de oscilación (8–99). Tenemos que

$$V(x) = 2\pi^2 m\nu^2 x^2 \tag{8–101}$$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo correspondiente es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + 2\pi^2 m\nu^2 x^2\psi = E\psi$$

ó

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{2\pi m\nu}{\hbar}\right)^2 x^2\right]\psi = 0 \tag{8–102}$$

Definamos

$$\alpha \equiv 2\pi m\nu/\hbar, \qquad \beta \equiv 2mE/\hbar^2 \tag{8–103}$$

y la ecuación se puede escribir como

$$d^2\psi/dx^2 + (\beta - \alpha^2 x^2)\psi = 0 \tag{8–104}$$

Es conveniente expresarla en términos de la nueva variable

$$\xi \equiv \sqrt{\alpha}\, x \tag{8–105}$$

www.FreeLibros.me

Entonces

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{d\xi}\frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\alpha}\,\frac{d\psi}{d\xi}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{d\xi}\left(\frac{d\psi}{dx}\right)\frac{d\xi}{dx} = \alpha\,\frac{d^2\psi}{d\xi^2}$$

y la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo toma la forma

$$\alpha\,\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\beta - \alpha\xi^2)\psi = 0$$

ó

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - \xi^2\right)\psi = 0 \tag{8–106}$$

Debemos encontrar soluciones $\psi(\xi)$ que sean continuas y estén acotadas para toda ξ, desde $-\infty$ hasta $+\infty$. Las soluciones que obtendremos satisfarán automáticamente la primera condición. Por otra parte, se debe tener especial cuidado en que $\psi(\xi)$ esté acotada cuando $|\xi| \to \infty$. Para esto es conveniente considerar, en primer lugar, el comportamiento de $\psi(\xi)$ para valores muy grandes de $|\xi|$.

Para cualquier valor finito de la energía total E y para grandes valores de $|\xi|$, la cantidad β/α es despreciable en comparación con ξ^2. Podemos escribir

$$d^2\psi/d\xi^2 = \xi^2\psi, \qquad |\xi| \to \infty \tag{8–107}$$

La solución general de esta ecuación es

$$\psi = Ae^{\xi^2/2} + Be^{-\xi^2/2} \tag{8–108}$$

lo que podemos comprobar de la manera siguiente:

$$\begin{aligned} d\psi/d\xi &= A\xi e^{\xi^2/2} + B(-\xi)e^{-\xi^2/2} \\ d^2\psi/d\xi^2 &= A\xi^2 e^{\xi^2/2} + Ae^{\xi^2/2} + B\xi^2 e^{-\xi^2/2} - Be^{-\xi^2/2} \\ &= A(\xi^2 + 1)e^{\xi^2/2} + B(\xi^2 - 1)e^{-\xi^2/2} \end{aligned}$$

Pero para $|\xi| \to \infty$ ésta es, esencialmente,

$$d^2\psi/d\xi^2 = A\xi^2 e^{\xi^2/2} + B\xi^2 e^{-\xi^2/2}$$

ó

$$d^2\psi/d\xi^2 = \xi^2(Ae^{\xi^2/2} + Be^{-\xi^2/2}) \equiv \xi^2\psi; \quad \text{Q.E.D.}$$

Si la función (8–108) debe estar acotada cuando $|\xi| \to \infty$, se debe tomar

$$A = 0$$

Así, para $|\xi|$ muy grande, la función propia deberá tener la forma

$$\psi(\xi) = Be^{-\xi^2/2}, \qquad |\xi| \to \infty \tag{8–109}$$

www.FreeLibros.me

Lo anterior sugiere la búsqueda de soluciones a la ecuación (8–106) de la forma

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2}H(\xi) \tag{8–110}$$

válida para toda ξ. Cuando $|\xi| \to \infty$ las funciones $H(\xi)$ deberán variar lentamente en comparación con $e^{-\xi^2/2}$. Para evaluar esta función calculemos

$$\frac{d\psi}{d\xi} = -\xi e^{-\xi^2/2}H + e^{-\xi^2/2}\frac{dH}{d\xi}$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = -e^{-\xi^2/2}H + \xi^2 e^{-\xi^2/2}H - \xi e^{-\xi^2/2}\frac{dH}{d\xi} - \xi e^{-\xi^2/2}\frac{dH}{d\xi} + e^{-\xi^2/2}\frac{d^2H}{d\xi^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = e^{-\xi^2/2}\left[-H + \xi^2 H - 2\xi\frac{dH}{d\xi} + \frac{d^2H}{d\xi^2}\right]$$

Después de substituir ψ y $d^2\psi/d\xi^2$ en la ecuación (8–106) obtenemos

$$e^{-\xi^2/2}\left[-H + \xi^2 H - 2\xi\frac{dH}{d\xi} + \frac{d^2H}{d\xi^2}\right] + \frac{\beta}{\alpha}e^{-\xi^2/2}H - \xi^2 e^{-\xi^2/2}H = 0$$

Dividiendo entre $e^{-\xi^2/2}$ y cancelando los términos que contienen a $\xi^2 H$ queda

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH}{d\xi} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1\right)H = 0 \tag{8–111}$$

Esta ecuación determina la función $H(\xi)$.

Hagamos un resumen: partimos de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (8–106). Es imposible resolverla en forma cerrada tal como está. Sin embargo, al escribir la solución de la ecuación como un producto de la función $e^{-\xi^2/2}$, que es la forma de la solución cuando $|\xi| \to \infty$, y de la función $H(\xi)$, transformamos el problema al de resolver la ecuación (8–111), lo que puede hacerse en forma cerrada. De hecho, es idéntica con la ecuación diferencial de *Hermite*, cuyas soluciones son bien conocidas en la literatura matemática. Sin embargo, encontraremos explícitamente esa solución.

Seguiremos el procedimiento más general disponible para obtener una solución explícita a cualquier ecuación diferencial, que consiste en suponer que la solución tiene la forma de una serie de potencias en la variable independiente. Esto es,

$$H(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \equiv a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + a_3\xi^3 + \cdots \tag{8–112}$$

Se determinan los coeficientes a_0, a_1, $a_2, \ldots$ substituyendo la ecuación (8–112) en (8–111) y pidiendo que la ecuación resultante se satisfaga para todo valor de ξ. Calculemos

$$\frac{dH}{d\xi} = \sum_{k=1}^{\infty} k a_k \xi^{k-1} \equiv 1a_1 + 2a_2\xi + 3a_3\xi^2 + \cdots$$

www.FreeLibros.me

y

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} = \sum_{k=2}^{\infty}(k-1)ka_k\xi^{k-2} \equiv 1\cdot 2a_2 + 2\cdot 3a_3\xi + 3\cdot 4a_4\xi^2 + \cdots$$

Al substituir en la ecuación diferencial se obtiene

$$\begin{aligned} &1\cdot 2a_2 + 2\cdot 3a_3\xi + 3\cdot 4a_4\xi^2 + 4\cdot 5a_5\xi^3 + \cdots \\ &\quad - 2\cdot 1a_1\xi - 2\cdot 2a_2\xi^2 - 2\cdot 3a_3\xi^3 - \cdots \\ &+ (\beta/\alpha - 1)a_0 + (\beta/\alpha - 1)a_1\xi + (\beta/\alpha - 1)a_2\xi^2 + (\beta/\alpha - 1)a_3\xi^3 + \cdots = 0 \end{aligned}$$

Para que sea válida para todos los valores de ξ, se deben cancelar los coeficientes de todas las potencias de ξ, de modo que la expresión sea igual a cero para cualquier valor de ξ. Reuniendo los coeficientes de las diferentes potencias e igualándolos a cero se tiene

$$\begin{aligned} &\xi^0: && 1\cdot 2a_2 + (\beta/\alpha - 1)a_0 = 0 \\ &\xi^1: && 2\cdot 3a_3 + (\beta/\alpha - 1 - 2\cdot 1)a_1 = 0 \\ &\xi^2: && 3\cdot 4a_4 + (\beta/\alpha - 1 - 2\cdot 2)a_2 = 0 \\ &\xi^3: && 4\cdot 5a_5 + (\beta/\alpha - 1 - 2\cdot 3)a_3 = 0 \end{aligned}$$

Para el coeficiente de la k-ésima potencia de ξ se debe tener

$$\xi^k: \qquad (k+1)(k+2)a_{k+2} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1 - 2k\right)a_k = 0$$

de manera que

$$a_{k+2} = -\frac{\beta/\alpha - 1 - 2k}{(k+1)(k+2)}\,a_k \tag{8–113}$$

Esta relación recibe el nombre de *fórmula de recurrencia.* Permite calcular los coeficientes $a_2, a_4, a_6, \ldots$ en términos de a_0, y los coeficientes $a_3, a_5, a_7, \ldots$ en términos de a_1. Los coeficientes a_0 y a_1 no pueden evaluarse a partir de la ecuación (8–113); así debe ser, puesto que la solución general a la ecuación diferencial para $H(\xi)$ debe contener dos constantes arbitrarias. La solución general se separa en dos series independientes que se pueden escribir como

$$\begin{aligned} H(\xi) = a_0&\left(1 + \frac{a_2}{a_0}\xi^2 + \frac{a_4}{a_2}\frac{a_2}{a_0}\xi^4 + \frac{a_6}{a_4}\frac{a_4}{a_2}\frac{a_2}{a_0}\xi^6 + \cdots\right) \\ &+ a_1\left(\xi + \frac{a_3}{a_1}\xi^3 + \frac{a_5}{a_3}\frac{a_3}{a_1}\xi^5 + \frac{a_7}{a_5}\frac{a_5}{a_3}\frac{a_3}{a_1}\xi^7 + \cdots\right) \end{aligned} \tag{8–114}$$

La relación a_{k+2}/a_k está dada por la fórmula de recurrencia. La primera serie es una función par y la segunda una función non de ξ.

Para un valor arbitrario de β/α, tanto la serie par como la non contienen un número infinito de términos. Como veremos, esto conduce a soluciones

www.FreeLibros.me

inaceptables. Considere cualquiera de las series y calcule el cociente entre los coeficientes de potencias sucesivas de ξ para k grande:

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = -\frac{(\beta/\alpha - 1 - 2k)}{(k+1)(k+2)} \simeq \frac{2k}{k^2} = \frac{2}{k}$$

Comparemos este cociente con el correspondiente en el desarrollo en serie de la función e^{ξ^2}, que es

$$e^{\xi^2} = 1 + \xi^2 + \frac{\xi^4}{2!} + \frac{\xi^6}{3!} + \cdots + \frac{\xi^k}{(k/2)!} + \frac{\xi^{k+2}}{(k/2+1)!} + \cdots$$

Para k grande, el cociente entre los coeficientes de potencias sucesivas de ξ es

$$\frac{1/(k/2+1)!}{1/(k/2)!} = \frac{(k/2)!}{(k/2+1)!} = \frac{(k/2)!}{(k/2+1)(k/2)!} = \frac{1}{k/2+1} \simeq \frac{1}{k/2} = \frac{2}{k}$$

Observamos que los dos cocientes son iguales. Esto significa que los términos de potencias grandes de ξ en la serie para e^{ξ^2} sólo puede diferir de los términos correspondientes en la serie par de $H(\xi)$ por una constante K. En el caso de la serie non para $H(\xi)$ sólo podrá diferir en $K'\xi$, donde K' es otra constante. Pero cuando $|\xi| \to \infty$, las potencias de orden bajo en ξ no son importantes para determinar el valor de cualquiera de las series. En consecuencia, concluimos que

$$H(\xi) = a_0 K e^{\xi^2} + a_1 K' \xi e^{\xi^2}, \qquad |\xi| \to \infty$$

Ahora bien, de acuerdo con la ecuación (8–110), las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo son

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} H(\xi)$$

de manera que si la serie de $H(\xi)$ contuviera un número infinito de términos, el comportamiento de estas soluciones para $|\xi| \to \infty$ sería

$$e^{-\xi^2/2} H(\xi) = a_0 K e^{\xi^2/2} + a_1 K' \xi e^{\xi^2/2}, \qquad |\xi| \to \infty$$

Esta solución diverge cuando $|\xi| \to \infty$, comportamiento inaceptable para una función propia.

Sin embargo, se pueden obtener funciones propias aceptables para ciertos valores de β/α. Hagamos igual a cero alguna de las constantes a_0 o a_1. Para forzar a que la serie de $H(\xi)$ *termine* pongamos

$$\beta/\alpha = 2n + 1 \tag{8–115}$$

donde

$$n = 1, 3, 5, \ldots \quad \text{si } a_0 = 0$$
$$n = 0, 2, 4, 6, \ldots \quad \text{si } a_1 = 0$$

www.FreeLibros.me

De la ecuación (8–113) es claro que tal elección de β/α hará que la serie termine en el n-ésimo término ya que, para $k = n$, tendremos

$$a_{n+2} = -\frac{(\beta/\alpha - 1 - 2n)}{(n+1)(n+2)} a_n = -\frac{(2n + 1 - 1 - 2n)}{(n+1)(n+2)} a_n = 0 \cdot a_n = 0$$

Los coeficientes $a_{n+4}, a_{n+6}, a_{n+8}, \ldots$ también serán iguales a cero puesto que son proporcionales a a_{n+2}. Las soluciones resultantes, $H_n(\xi)$, son polinomios de orden n, llamados *polinomios de Hermite*. Con una solución de polinomio para la ecuación de Hermite, las funciones propias correspondientes

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \tag{8–116}$$

mostrarán el comportamiento aceptable de cancelarse cuando $|\xi| \to \infty$, ya que, para $|\xi|$ grande, la función $e^{-\xi^2/2}$ varía mucho más rápidamente que el polinomio $H_n(\xi)$, de manera que determina completamente el comportamiento de la función propia. De hecho

$$\psi(\xi) \propto e^{-\xi^2/2}, \qquad |\xi| \to \infty$$

en concordancia con la ecuación (8–109).

Existen soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger sólo para los valores de β/α dados por la ecuación (8–115). De acuerdo con (8–103), esta cantidad es igual a

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{\hbar}{2\pi m\nu} = \frac{2E}{h\nu}$$

De este modo, la ecuación (8–115) especifica los valores permitidos de la energía total E, que son

$$2E/h\nu = 2n + 1$$

o bien

$$E_n = (n + \tfrac{1}{2})h\nu, \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{8–117}$$

donde ν es la frecuencia clásica de oscilación de la partícula. Se ha empleado el número cuántico n para designar los valores propios. En la figura 8–28 se ilustran el potencial y los valores propios. Todos ellos son discretos para el potencial de oscilador armónico simple, ya que la partícula está ligada para cualquier valor propio finito. Al comparar la ecuación (8–117) con el postulado de Planck (8–100) sobre la cuantización de la energía, encontramos que los valores propios predichos por la mecánica cuántica están corridos por la cantidad $\frac{1}{2}h\nu$. Como consecuencia, la energía total mínima para una partícula ligada en un potencial es $E_0 = \frac{1}{2}h\nu$. Esta es la energía del punto cero para este potencial, cuya existencia es requerida por el principio de incertidumbre. Es interesante hacer notar que el postulado de cuantización de Planck para el oscilador armónico simple conducía a resultados erróneos por la constante aditiva $\frac{1}{2}h\nu$. Esta constante se cancela en la mayor parte de las aplicaciones del

www.FreeLibros.me

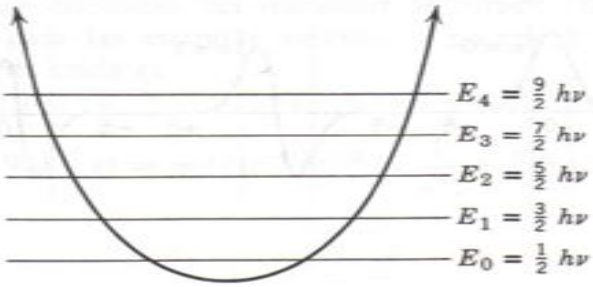

Figura 8-28. Los primeros valores propios para un potencial de oscilador armónico simple.

postulado, ya que sólo es necesario conocer la diferencia entre dos valores propios (véanse los argumentos de Einstein que conducen a la idea de cuanto). Sin embargo, se observaron discrepancias al intentar una explicación en términos de la antigua teoría cuántica, a ciertos fenómenos que ocurrían a bajas temperaturas.

A partir de la ecuación (8–114) se puede evaluar cada polinomio de Hermite $H_n(\xi)$, al calcular los coeficientes mediante (8–113), substituyendo β/α por su valor dado en (8–115), para el valor correspondiente de n. A continuación alistamos algunos:

$$\begin{aligned}
H_0(\xi) &= 1 \\
H_1(\xi) &= 2\xi \\
H_2(\xi) &= 2 - 4\xi^2 \\
H_3(\xi) &= 12\xi - 8\xi^3 \\
H_4(\xi) &= 12 - 48\xi^2 + 16\xi^4 \\
H_5(\xi) &= 120\xi - 160\xi^3 + 32\xi^5 \\
H_6(\xi) &= 120 - 720\xi^2 + 480\xi^4 - 64\xi^6
\end{aligned} \tag{8–118}$$

Las constantes a_0 y a_1 se eligieron de manera que la función propia normalizada esté dada por

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}\right)^{1/2} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \tag{8–119}$$

Las funciones propias se pueden expresar en términos de x mediante la substitución $\xi = \sqrt{\alpha x}$, aunque ordinariamente conviene dejarlas tal como están. Ya que $e^{-\xi^2/2}$ es una función par, la paridad de la función propia coincide con la del polinomio de Hermite: par para n par y non para n non. La función propia correspondiente a la mínima energía tiene paridad par, como también es el caso para el potencial de pozo cuadrado. En la figura 8–29 se representan las primeras funciones propias. Las líneas verticales indican, en cada caso, los límites de la región permitida clásicamente. La densidad de

www.FreeLibros.me

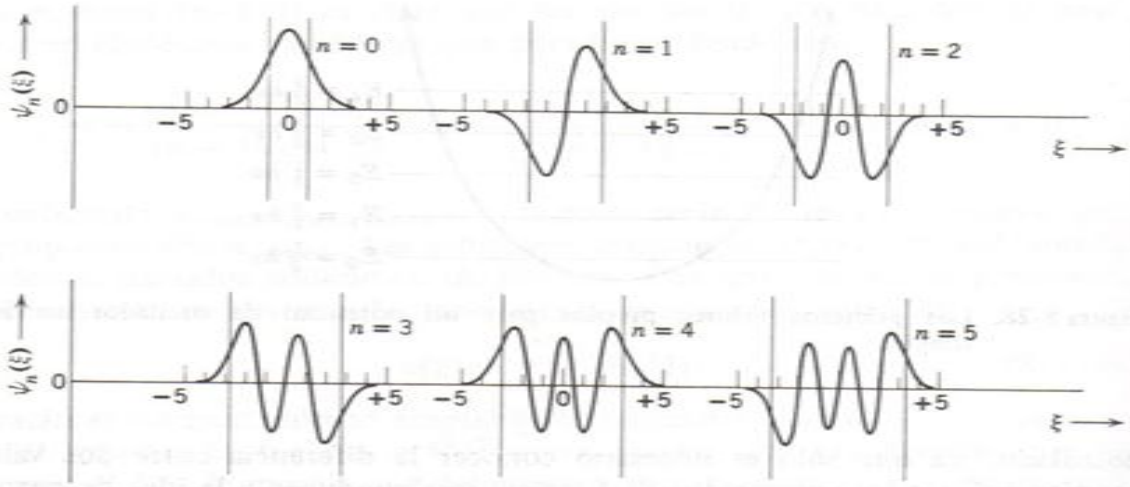

Figura 8-29. Las primeras funciones propias para un potencial de oscilador armónico simple.

probabilidad cuántica para $n = 10$, así como la densidad de probabilidad predicha clásicamente para una partícula con energía total E_{10} se muestran en la figura 8–30. De acuerdo con la mecánica clásica, la velocidad de una partícula que efectúa oscilaciones armónicas simples se hace igual a cero en los extremos de su movimiento. En consecuencia, la partícula pasa la mayor parte del tiempo en la vecindad de los límites de la región permitida clásicamente, y la probabilidad clásica de encontrarla en un elemento del eje ξ se comporta como lo indica la figura. Destaca inmediatamente la naturaleza de la correspondencia entre las probabilidades cuántica y clásica cuando $n \to \infty$.

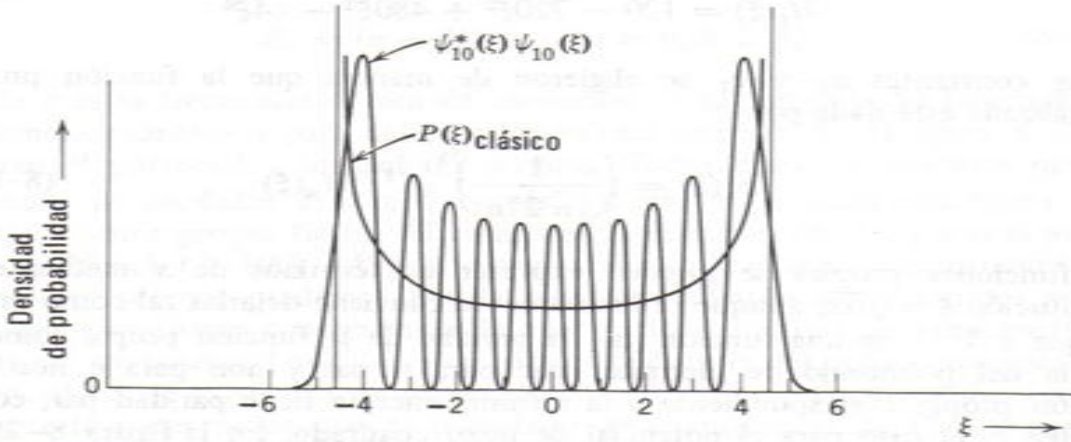

Figura 8-30. Ilustración de cómo se acerca al límite clásico la densidad de probabilidad con un potencial de oscilador armónico simple. (Tomada de la referencia 2.)

www.FreeLibros.me

Para terminar la discusión del oscilador armónico simple, calculemos los valores esperados para las energías cinética y potencial $\bar{T}$ y $\bar{V}$, en el estado $n = 0$. La función de onda es

$$\Psi_0(\xi, t) = \psi_0(\xi)e^{-iE_0t/\hbar} = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\xi^2/2} e^{-iE_0t/\hbar}$$

Puesto que

$$T = \frac{p^2}{2m}$$

de acuerdo con la ecuación (7–80)

$$\bar{T} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^* \left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2\right] \Psi_0 \, d\xi$$

Expresando el operador derivada en función de ξ se tiene

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sqrt{\alpha} \frac{\partial}{\partial \sqrt{\alpha} x} = \sqrt{\alpha} \frac{\partial}{\partial \xi}$$

con lo cual

$$\bar{T} = -\frac{\hbar^2 \alpha}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^* \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial \xi^2} \, d\xi$$

La derivada es

$$\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial \xi^2} = \frac{1}{\pi^{1/4}} (\xi^2 e^{-\xi^2/2} - e^{-\xi^2/2}) e^{-iE_0t/\hbar}$$

El complejo conjugado de la función propia es

$$\Psi_0^* = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\xi^2/2} e^{+iE_0t/\hbar}$$

de manera que

$$\bar{T} = \frac{\hbar^2 \alpha}{2m\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2}(e^{-\xi^2/2} - \xi^2 e^{-\xi^2/2}) \, d\xi$$

$$\bar{T} = \frac{\hbar^2 \alpha}{m\sqrt{\pi}} \left[\int_0^{\infty} e^{-\xi^2} \, d\xi - \int_0^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} \, d\xi\right]$$

Las integrales definidas se pueden hallar en cualquier tabla, obteniendo

$$\bar{T} = \frac{\hbar^2 \alpha}{m\sqrt{\pi}} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} - \frac{\sqrt{\pi}}{4}\right] = \frac{\hbar^2 \alpha}{4m}$$

Evaluando α se tiene

$$\bar{T} = \frac{\hbar^2 2\pi m\nu}{4m\hbar} = \frac{h\nu}{4}$$

De acuerdo con la ecuación (8–117),

$$\bar{T} = E_0/2$$

www.FreeLibros.me

A partir de (8–101), (8–103) y (8–105), la energía potencial se puede escribir como

$$V = \hbar\pi\nu\xi^2$$

y conforme a (7–80)

$$\bar{V} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^*[\hbar\pi\nu\xi^2]\Psi_0\, d\xi$$

$$\bar{V} = \frac{\hbar\pi\nu}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2}\xi^2 e^{-\xi^2/2}\, d\xi$$

$$\bar{V} = 2\nu\hbar\sqrt{\pi}\int_0^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2}\, d\xi = 2\nu\hbar\pi/4 = h\nu/4 = E_0/2$$

se puede demostrar que la relación

$$\bar{T} = \bar{V} = E_n/2 \tag{8–120}$$

es cierta para cualquier valor del número cuántico. Además, la misma relación será válida clásicamente si $\bar{T}$ y $\bar{V}$ se interpretan como los valores de T y V promediados sobre un período de oscilación.

BIBLIOGRAFIA

Bohm, D., *Quantum Theory,* Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1951.

Pauling, L., y E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics,* McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1935.

Schiff, L. I., *Quantum Mechanics,* McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

EJERCICIOS

1. Derive la ecuación (8–53) y verifique (8–54).
2. Derive la ecuación (8–55).
3. Considere el potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_1, & 0 < x < a \\ V_2, & x > a \end{cases}$$

donde

$$0 < V_1 < V_2$$

y una partícula con energía total $E > V_2$ que se aproxima a $x = 0$ en el sentido positivo del eje x. Muestre que la probabilidad de pasar a la región $x > a$ es máxima cuando a es igual a un número entero o semientero de longitudes de onda de De Broglie en la región $0 < x < a$.

4. Obtenga el factor de transmisión para un potencial de pozo cuadrado redefiniendo los términos de la ecuación (8–55), como fue sugerido al principio de la sección 4.

www.FreeLibros.me

5. Calcule cuantitativamente las soluciones de onda estacionaria para el potencial de pozo cuadrado de la sección 4 cuando $E > V_0$. Use estas soluciones para verificar las conclusiones cualitativas que se obtuvieron al final de esa sección.

6. Obtenga una solución analítica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial indicado en el ejercicio 4 del capítulo 7, y determine el primer valor propio E_1. Compare este valor con los resultados de la integración numérica efectuada en ese ejercicio.

7. Mediante las ecuaciones (8–113), (8–114) y (8–115), calcule varios de los polinomios $H_n(\xi)$. Compárelos con las formas presentadas en (8–118) y verifique, en algunos casos, que las funciones (8–119) están convenientemente normalizadas.

8. Verifique la ecuación (8–120) para $n = 1$.

www.FreeLibros.me

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 9

Teoría de la perturbación

1. Introducción

La técnica empleada para resolver la ecuación de Schrödinger con un potencial de oscilador armónico simple no es útil, en general, en el caso de un potencial de forma arbitraria $V(x)$. Sabemos que la fórmula de recurrencia contiene más de dos coeficientes, haciendo imposible encontrar la solución de la ecuación diferencial en forma cerrada. En tales casos, la ecuación siempre se puede resolver por integración numérica del modo descrito en la sección 5 del capítulo 7. Si el cálculo, se efectúa "manualmente" el método es tedioso; sin embargo, con la ayuda de las computadoras de gran velocidad esta integración es realizable; debido a esto se usa ampliamente. Por otra parte, existen técnicas de aproximación muy útiles en el tratamiento de ciertos problemas en los que la ecuación de Schrödinger no se puede resolver en forma cerrada. La *teoría de la perturbación* estudia una de estas técnicas, y a ella está dedicado el presente capítulo.

2. Las perturbaciones independientes del tiempo

Considere un potencial $V'(x)$, con el que es difícil o imposible resolver la ecuación de Schrödinger en forma cerrada, pero que se puede descomponer en la forma

$$V'(x) = V(x) + v(x) \tag{9-1}$$

donde $V(x)$ es un potencial con el cual ya se ha resuelto la ecuación de Schrödinger y $v(x)$ un potencial pequeño comparado con $V(x)$. Encontraremos expresiones con las que se pueden obtener aproximaciones razonables a las funciones y los valores propios del *potencial perturbado* $V'(x)$, en términos de la *perturbación* $v(x)$ y de las funciones y los valores propios, previamente conocidos, con el *potencial no perturbado* $V(x)$. En la figura 9–1 se ilustra un ejemplo de la ecuación (9–1). El potencial $V'(x)$ ha sido descompuesto en un potencial de pozo cuadrado $V(x)$ y una perturbación $v(x)$ pequeña en comparación con $V(x)$.

www.FreeLibros.me

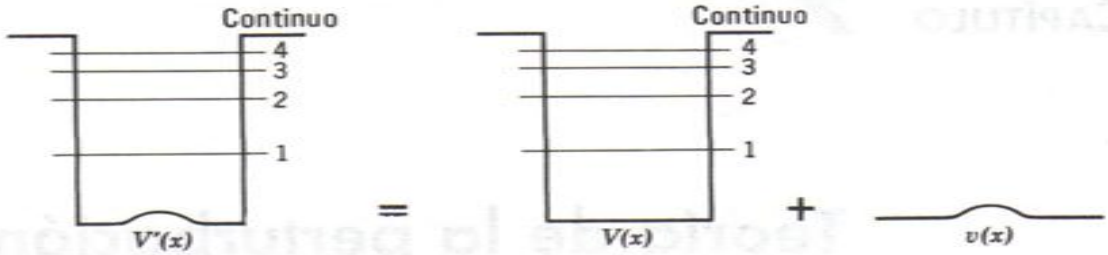

Figura 9-1. Ilustración de la descomposición de un potencial perturbado en un potencial no perturbado y una perturbación.

En varias ocasiones y en el capítulo 7 escribimos una función de x como la suma de un cierto conjunto de funciones propias (vea las ecuaciones 7–56 y 7–70). Hagamos lo mismo para una función propia perturbada $\psi_n(x)$. Esto es,*

$$\psi'_n(x) = \sum_l a_{nl}\psi_l(x) \tag{9–2}$$

Las $\psi_l(x)$ son funciones propias no perturbadas y los coeficientes a_{nl} especifican en qué proporción la función $\psi'_n(x)$ contiene a la función $\psi_l(x)$. La suma se extiende a todos los valores del número cuántico l, incluyendo aquellos del continuo. Las funciones propias no perturbadas son soluciones propias de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con el potencial V, o sea,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_l}{dx^2} + V\psi_l = E_l\psi_l \tag{9–3}$$

Las funciones perturbadas son soluciones de la misma ecuación con el potencial V',

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi'_n}{dx^2} + V'\psi'_n = E'_n\psi'_n$$

Empleando la ecuación (9–1), se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi'_n}{dx^2} + V\psi'_n + v\psi'_n = E'_n\psi'_n \tag{9–4}$$

donde E_l y E_n son los valores propios no perturbados y perturbados, respectivamente. Substituyendo (9–2) en (9–4) se tiene:

$$\sum_l a_{nl}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_l}{dx^2} + V\psi_l\right] + \sum_l a_{nl}v\psi_l = \sum_l a_{nl}E'_n\psi_l$$

* Se puede demostrar que cada conjunto de funciones propias $\psi_l(x)$ forma un "conjunto completo" en términos del cual se puede desarrollar casi toda función de x (esto es, expresarla en la forma 9–2).

www.FreeLibros.me

De acuerdo con (9–3) la cantidad dentro del paréntesis es igual a $E_l\psi_l$. Así,

$$\sum_l a_{nl}E_l\psi_l + \sum_l a_{nl}v\psi_l = \sum_l a_{nl}E'_n\psi_l$$

o sea

$$\sum_l a_{nl}(E'_n - E_l)\psi_l = \sum_l a_{nl}v\psi_l$$

Multiplicando por el complejo conjugado de alguna función propia no perturbada ψ_m, e integrando sobre todos los valores de x se tiene

$$\sum_l a_{nl}(E'_n - E_l)\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*\psi_l\, dx = \sum_l a_{nl}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* v\psi_l\, dx$$

Por supuesto, las funciones propias no perturbadas son ortogonales. Suponiendo que se han normalizado,* la ecuación (7–54) muestra que la integral de la izquierda será igual a cero para $l \neq m$, e igual a uno para $l = m$. La suma del miembro izquierdo contendrá un solo término distinto de cero. En consecuencia

$$a_{nm}(E'_n - E_m) = \sum_l a_{nl}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* v\psi_l\, dx \tag{9–5}$$

Definiendo

$$v_{ml} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\, v(x)\, \psi_l(x)\, dx \tag{9–6}$$

la ecuación (9–5) toma la forma

$$a_{nm}(E'_n - E_m) = \sum_l a_{nl}v_{ml} \tag{9–7}$$

Esta ecuación es exacta, aunque no muy útil. Sin embargo, puede prestarnos algún servicio si tomamos en cuenta que la perturbación $v(x)$ es pequeña en comparación con el potencial no perturbado $V(x)$, de manera que el potencial perturbado $V'(x)$ difiere muy poco de $V(x)$. De este modo, es razonable suponer que las funciones propias perturbadas difieran muy poco de las no perturbadas. En términos de la ecuación (9–2) esto significa que *suponemos*

$$a_{nl} \begin{array}{ll} \ll 1, & l \neq n \\ \simeq 1, & l = n \end{array} \tag{9–8}$$

Si *pedimos* que $v(x)$ sea pequeño respecto a los valores propios correspondientes a $V(x)$, es claro que todas las v_{ml} deben ser pequeñas respecto a los valores propios ya que, de acuerdo con (9–6), estas cantidades son precisa-

* Esto implica la normalización en una caja de las funciones propias del continuo. Con esto, los valores propios del continuo se hacen discretos (aunque su separación es pequeña), lo cual elimina toda dificultad en la interpretación de la suma $\sum_l$ para los valores continuos de l.

www.FreeLibros.me

mente ciertos promedios de $v(x)$. Dividiendo ambos miembros de la ecuación (9–7) por el valor propio no perturbado E_m, se tiene

$$a_{nm}\frac{(E'_n - E_m)}{E_m} = \sum_l a_{nl}\frac{v_{ml}}{E_m}$$

Excepto para $l = n$, cada término de la suma es el producto de dos cantidades pequeñas a_{nl} y v_{ml}/Em. Despreciaremos tales términos, conservando sólo el término $l = n$. Entonces,

$$a_{nm}\frac{(E'_n - E_m)}{E_m} \simeq a_{nn}\frac{v_{mn}}{E_m}$$

o sea

$$a_{nm}(E'_n - E_m) \simeq a_{nn}v_{mn} \tag{9–9}$$

Al tomar $m = n$ obtenemos

$$a_{nn}(E'_n - E_n) \simeq a_{nn}v_{nn}$$

de modo que

$$E'_n - E_n \simeq v_{nn} \tag{9–10}$$

Para $m \neq n$, obtenemos

$$a_{nm} \simeq a_{nn}\frac{v_{mn}}{E'_n - E_m}$$

Cuando $a_{nn} = 1$, debido a (9–8), la expresión anterior toma la forma

$$a_{nm} \simeq \frac{v_{mn}}{E'_n - E_m} \tag{9–11}$$

Al emplear (9–10) para evaluar E'_n, encontramos que

$$a_{nm} \simeq \frac{v_{mn}}{E_n - E_m + v_{nn}} = \frac{v_{mn}}{(E_n - E_m)\left(1 + \dfrac{v_{nn}}{E_n - E_m}\right)}$$

$$= \frac{v_{mn}}{E_n - E_m}\left(1 + \frac{v_{nn}}{E_n - E_m}\right)^{-1} \simeq \frac{v_{mn}}{E_n - E_m}\left(1 - \frac{v_{nn}}{E_n - E_m}\right)$$

Hemos tomado el primer término del desarrollo binomial de 1 más la cantidad $v_{nn}/(E_n - E_m)$. Ignoraremos también el término que corresponde al producto de las dos cantidades $v_{mn}/(E_n - E_m)$ y $v_{nn}/(E_n - E_m)$. La validez de estos dos pasos depende del *requisito adicional* de que $v(x)$ sea pequeño aun comparado con la diferencia entre E_n y cualquier otro valor propio E_m. De este modo

$$a_{nm} \simeq \frac{v_{mn}}{E_n - E_m} \tag{9–12}$$

www.FreeLibros.me

Las ecuaciones (9–10) y (9–12) dan una buena aproximación a las funciones y los valores propios correspondientes al potencial perturbado $V'(x)$. Consideremos (9–10) y evaluemos v_{nn} a partir de (9–6). Así

$$E'_n - E_n \simeq v_{nn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\, v(x)\, \psi_n(x)\, dx \tag{9–13}$$

Esta expresión da una aproximación al n-ésimo valor propio perturbado en términos del n-ésimo valor propio no perturbado y una cierta integral que contiene a la función propia no perturbada y la perturbación $v(x)$. Esta integral es el valor esperado para $v(x)$ en el n-ésimo estado propio no perturbado. Para ver que esto es cierto, considere (7–4) con $V(x, t) = v(x)$ y $\Psi(x, t) = \Psi_n(x, t) = e^{-iE_n t/\hbar}\, \psi_n(x)$. La ecuación toma la forma

$$\overline{v(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iE_n t/\hbar}\, \psi_n^*(x)\, v(x)\, e^{-iE_n t/\hbar}\, \psi_n(x)\, dx$$

o sea

$$\overline{v(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\, v(x)\, \psi_n(x)\, dx$$

Así, la teoría de la perturbación ofrece el resultado sumamente razonable de que el corrimiento en la energía del n-ésimo valor propio, debido a la presencia del potencial perturbador $v(x)$, es aproximadamente igual al valor promedio de $v(x)$ sobre el n-ésimo estado propio no perturbado, con un factor de peso igual a la densidad de probabilidad $\psi_n^*(x)\psi_n(x)$ para ese estado.

Consideremos ahora (9–11) y calculemos el valor de v_{mn}. Obtenemos

$$a_{nm} \simeq \frac{1}{E_n - E_m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\, v(x)\, \psi_n(x)\, dx, \qquad m \neq n \tag{9–14}$$

Esta ecuación da el valor aproximado de los coeficientes a_{nm}, que especifican en qué proporción cada una de las funciones propias no perturbadas $\psi_m(x)$ se mezcla con la dominante no perturbada $\psi'_n(x)$ para formar la función propia perturbada $\psi'_n(x)$. Entonces, en la serie (9–2), con l reemplazada por m,

$$\psi'_n(x) = \sum_m a_{nm} \psi_m(x) \tag{9–15}$$

podemos emplear (9–14) para calcular todos los coeficientes salvo a_{nn}. Por (9–8) sabemos que $a_{nn} \simeq 1$. Se puede encontrar su valor exacto demandando que $\psi'_n(x)$ esté normalizada. Observemos que a_{nm} es proporcional a $1/(E_n - E_m)$. Entonces, la perturbación $v(x)$ mezclará con la función propia no perturbada $\psi_n(x)$ sólo una cantidad pequeña de cualquier otra función propia no perturbada $\psi_m(x)$ cuyo valor propio E_m sea muy diferente del valor propio E_n. Una consecuencia importante de lo anterior es que se puede obtener una buena aproximación a la serie (9–15) al tomar sólo el término $m = n$, y algunos más cuya m no difiera mucho de n. El coeficiente a_{nm} también es proporcional a la cantidad

$$v_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\, v(x)\, \psi_n(x)\, dx$$

www.FreeLibros.me

Esta es un cierto promedio de $v(x)$, con un factor de peso $\psi_m^*(x)\psi_n(x)$, que depende de las funciones propias de los estados no perturbados m y n.

Las cantidades v_{mn}, tanto para $m = n$ como para $m \neq n$, reciben el nombre de *elementos de la matriz de la perturbación y tomados entre el estado n y el estado m.* Esta terminología se emplea ya que en tratamientos avanzados en la mecánica cuántica es conveniente considerar una matriz cuyos elementos sean las cantidades v_{mn}. Esta matriz,

$$\begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} & v_{13} & \cdot & \cdot & \cdot & v_{1n} & \cdot & \cdot & \cdot \\ v_{21} & v_{22} & v_{23} & \cdot & \cdot & \cdot & v_{2n} & \cdot & \cdot & \cdot \\ v_{31} & v_{32} & v_{33} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ v_{m1} & v_{m2} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}$$

contiene toda la información relativa a la perturbación aplicada a un sistema cuyas funciones de onda no perturbadas son $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, $\psi_3(x)$, $\psi_4(x)$, ...

3. Un ejemplo

Ilustremos el empleo de (9–13) y (9–14) haciendo un cálculo simple de perturbación. Evaluaremos el primer valor y la primera función propios del potencial que se indica en la figura 9–2, cuya expresión analítica es

$$V'(x) = \begin{cases} \delta \dfrac{|x|}{a/2}, & -\dfrac{a}{2} < x < \dfrac{a}{2} \\ \infty, & x < -\dfrac{a}{2},\ x > \dfrac{a}{2} \end{cases} \tag{9–16}$$

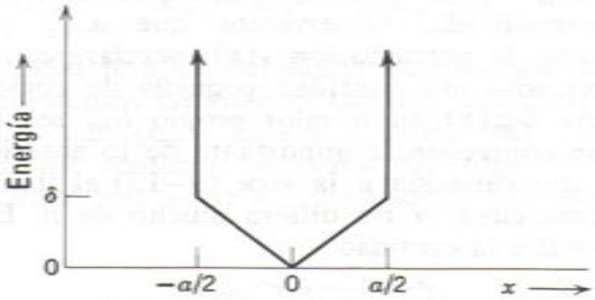

Figura 9-2. Un potencial de lápiz.

www.FreeLibros.me

Lo consideraremos como la suma de un potencial no perturbado

$$V(x) = \begin{matrix} 0, & -a/2 < x < a/2 \\ \infty, & x < -a/2,\ x > a/2 \end{matrix}$$

que es un pozo cuadrado infinito, y la perturbación

$$v(x) = \delta \frac{|x|}{a/2}$$

De acuerdo con (8–95), las funciones propias normalizadas no perturbadas son

$$\psi_m(x) = \begin{matrix} \sqrt{2/a}\cos(m\pi x/a), & m = 1, 3, 5, \ldots \\ \sqrt{2/a}\,\mathrm{sen}\,(m\pi x/a), & m = 2, 4, 6, \ldots \end{matrix}$$

Conforme a (8–96), los valores propios no perturbados son

$$E_m = \pi^2\hbar^2 m^2/2Ma^2, \qquad m = 1, 2, 3, 4, \ldots$$

donde M es la masa de la partícula. Si δ es pequeña comparada con el primer valor propio

$$E_1 = \pi^2\hbar^2/2Ma^2$$

debe ser aplicable la técnica de perturbación.

Para evaluar $\psi_1'(x)$ tomamos $n = 1$ en (9–14). Así,

$$a_{1m} = \frac{1}{E_1 - E_m}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\, v(x)\, \psi_1(x)\, dx, \qquad m \neq 1$$

que es igual a

$$a_{1m} = \begin{matrix} \dfrac{8M\delta}{\pi^2\hbar^2}\dfrac{1}{(1-m^2)}\displaystyle\int_{-a/2}^{a/2} \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right)|x|\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx, & m = 3, 5, 7, \ldots \\ \dfrac{8M\delta}{\pi^2\hbar^2}\dfrac{1}{(1-m^2)}\displaystyle\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{sen}\left(\frac{m\pi x}{a}\right)|x|\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx, & m = 2, 4, 6, \ldots \end{matrix}$$

Para $m = 2, 4, 6, \ldots$, el integrando es una función non de x. La integral será igual a cero debido a que el intervalo de integración es simétrico respecto a $x = 0$. De este modo

$$a_{1m} = 0, \qquad m = 2, 4, 6, \ldots$$

Para $m = 3, 5, 7, \ldots$ el integrando es una función par de x. Entonces

$$a_{1m} = \frac{16M\delta}{\pi^2\hbar^2}\frac{1}{(1-m^2)}\int_0^{a/2} \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right) x\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx, \qquad m = 3, 5, 7, \ldots$$

www.FreeLibros.me

Si ponemos $Z = \pi x/a$, tenemos

$$a_{1m} = \frac{8}{\pi^2}\frac{\delta}{E_1}\frac{1}{(1-m^2)}\int_0^{\pi/2}\cos(mZ)\,Z\cos Z\,dZ$$

donde $\delta/E_1 = 2Ma^2\delta/\pi^2\hbar^2$ es un parámetro sin dimensiones. La integral se puede evaluar fácilmente escribiendo $\cos(mZ) = \frac{1}{2}(e^{+imZ} + e^{-imZ})$, etc. El resultado final es

$$a_{1m} = \frac{8}{\pi^2}\frac{\delta}{E_1}\frac{1}{(1-m^2)}\left\{\frac{\cos[(m+1)\pi/2]-1}{2(m+1)^2} + \frac{\cos[(m-1)\pi/2]-1}{2(m-1)^2}\right\},$$

$$m = 3, 5, 7, \ldots$$

Algunos de los primeros coeficientes diferentes de cero son

$$a_{13} = \frac{1}{32}\frac{8}{\pi^2}\frac{\delta}{E_1}$$

$$a_{15} = \frac{1}{864}\frac{8}{\pi^2}\frac{\delta}{E_1}$$

$$a_{17} = \frac{1}{1728}\frac{8}{\pi^2}\frac{\delta}{E_1}$$

$$a_{19} = \frac{1}{8000}\frac{8}{\pi^2}\frac{\delta}{E_1}$$

No es sorprendente que $a_{1m} = 0$ para $m = 2, 4, 6, \ldots$. El potencial perturbado $V'(x)$ es simétrico respecto al origen y, por tanto, la paridad de su primer estado propio debe ser par. En consecuencia, no deberán mezclarse funciones propias no perturbadas, de paridad impar, en la primera función propia perturbada, y las primeras corresponden a $m = 2, 4, 6, \ldots$. La función propia perturbada $\psi_1'(x)$ se obtiene al substituir a_{1m} en la serie (9–15). Ya que a_{1m} disminuye rápidamente al aumentar m [debido en parte a $1/(E_1 - E_m)$, y en parte al término ν_{m1}], es claro que obtenemos una muy buena aproximación si se toman sólo los términos $m = 1$ y $m = 3$. De este modo,

$$\psi_1'(x) \simeq a_{11}\psi_1(x) + \frac{1}{32}\frac{8}{\pi^2}\frac{\delta}{E_1}\psi_3(x) \tag{9–17}$$

Finalmente, el coeficiente a_{11} debe ajustarse de modo que $\psi_1'(x)$ esté normalizada, lo que el lector puede efectuar como ejercicio.

En la figura 9–3 se ilustra la función (9–17). Para mayor claridad, se ha exagerado la contribución relativa de $\psi_3(x)$. Al comparar $\psi_1'(x)$ con $\psi_1(x)$, observamos que la segunda derivada de la función propia perturbada es relativamente pequeña cerca de los extremos de la región $-a/2$ a $+a/2$, y relativamente grande en la vecindad del centro, en comparación con la segunda derivada de la función propia no perturbada. El porqué de este comportamiento se puede explicar al comparar la forma de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con los potenciales perturbado y no perturbado.

www.FreeLibros.me

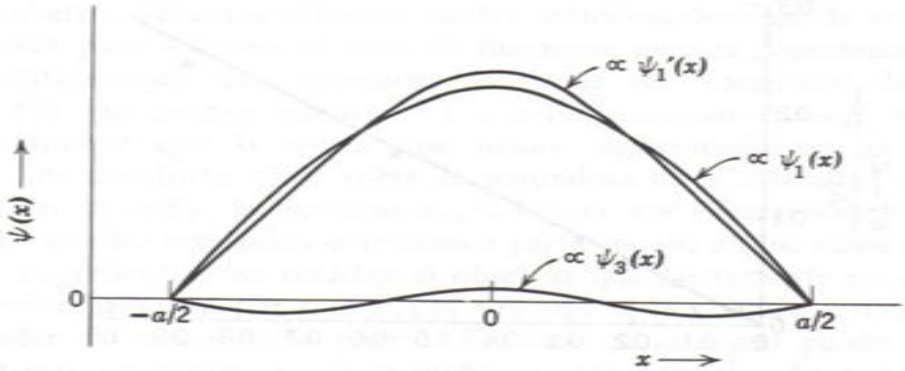

Figura 9-3. Ilustración de la composición de la primera función propia para un potencial de lápiz.

Calculemos ahora $E_1' - E_1$. Tomemos $n = 1$ en la ecuación (9–13) y substituyamos la correspondiente función propia no perturbada:

$$E_1' - E_1 = \frac{4\delta}{a^2} \int_{-a/2}^{a/2} |x| \cos^2 \left(\frac{\pi x}{a}\right) dx$$

$$E_1' - E_1 = \frac{8\delta}{a^2} \int_{0}^{a/2} x \cos^2 \left(\frac{\pi x}{a}\right) dx$$

$$E_1' - E_1 = \frac{8\delta}{\pi^2} \int_{0}^{\pi/2} Z \cos^2 Z \, dZ$$

$$E_1' - E_1 = \frac{8\delta}{\pi^2} \left(\frac{\pi^2}{16} - \frac{1}{4}\right)$$

lo que es igual a

$$E_1' - E_1 = 0.297\delta$$

La figura 9–4 muestra el valor propio perturbado E_1' en términos del cociente adimensional $(E_1' - E_1)/E_1$, representado en función del cociente adimensional δ/E_1. La teoría de la perturbación predice una línea recta de pendiente 0.297. Los puntos proporcionan la respuesta correcta; fueron calculados a partir de los valores de E_1' obtenidos a partir de una solución exacta (por integración numérica) de la ecuación de Schrödinger para los cuatro potenciales $V'(x)$ correspondientes a los valores que se indican para δ/E_1. Se encuentra que el corrimiento en la energía para el primer valor propio, predicho por la teoría de la perturbación, tiene un error de aproximadamente 10 por ciento para $\delta/E_1 \simeq 0.9$, lo que corresponde a $(E_1' - E_1)/E_1 \simeq 0.25$. Para $(E_1' - E_1)/E_1 \simeq 0.05$ el error es de aproximadamente 0.5 por ciento. Es claro que el error cometido en el cálculo perturbativo que hemos efectuado es del orden del cuadrado de una cantidad pequeña, puesto que en el desarrollo siempre se han despreciado los cuadrados de cantidades pequeñas. Los números que hemos citado indican que, en el presente caso, una medida aproximada del tamaño de esta pequeña cantidad es el cociente $(E_1' - E_1)/E_1$. Observemos, además, que el valor propio E_1' predicho por la teoría de la perturbación es siempre demasiado grande. Se puede demostrar que éste es el

www.FreeLibros.me

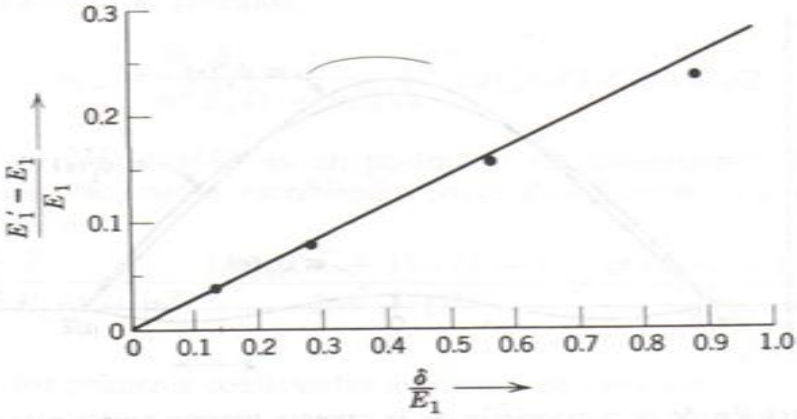

Figura 9-4. Una comparación entre el cálculo de perturbación y la solución exacta para los tres primeros valores propios de la ecuación de Schrödinger con un potencial de lápiz.

caso para cualquier forma de la perturbación $v(x)$ y es fácil ver por qué. La teoría de la perturbación emplea la función propia no perturbada $\psi_1(x)$ para evaluar $E_1' - E_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x)v(x)\psi_1(x)\,dx$. Al comparar las representaciones de $\psi_1(x)$ y $\psi_1'(x)$, observamos que este procedimiento concede un peso excesivo a los valores de $v(x)$ cerca de los extremos de la región. Pero es ahí donde $v(x)$ es mayor y, por esto, se sobreestima la contribución de $v(x)$ al valor propio perturbado.

Una comparación de la forma exacta de la función propia $\psi_1'(x)$ para el potencial $V'(x)$ con la forma (9–17) predicha por la teoría de la perturbación, lleva a la conclusión de que el error que se comete al calcular el coeficiente a_{13} es también del orden del cuadrado de la cantidad $(E_1' - E_1)/E_1$.

Si son necesarias estimaciones más precisas para E_n' y $\psi_n'(x)$, es posible extender la teoría de la perturbación de modo que el error en las expresiones sea del orden del cubo, o aún del de una potencia superior, de una cantidad pequeña apropiada. Sin embargo, en la práctica se considera normalmente que las ecuaciones (9–13) y (9–14) son aceptables.

4. El tratamiento de las degeneraciones

Considere el caso de dos funciones propias distintas no perturbadas, $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$, cuyos valores propios E_1, y E_2 son exactamente iguales. Se dice que estas funciones propias están degeneradas. Veremos posteriormente que un número considerable de ejemplos importantes de esta situación se presentan en la física atómica y nuclear. Por ejemplo, casi todas las funciones propias de un electrón ligado al átomo de hidrógeno por un potencial de Coulomb $1/r$ están degeneradas. Cuando éste es el caso nos interesa, frecuentemente, estudiar el efecto de una pequeña perturbación que cambie el potencial de tal manera que elimine la degeneración.

www.FreeLibros.me

Sin embargo, debemos efectuar ciertas modificaciones en la teoría de la perturbación para aplicarla al caso de funciones propias degeneradas. El que estas modificaciones sean necesarias se puede ver claramente de la ecuación (9–11), que predice que $a_{12} \sim 1$ y $a_{21} \sim 1$ cuando $E_1 = E_2$.* Esto nos indica solamente que la teoría que hemos desarrollado no es adecuada. También nos da alguna clave sobre la naturaleza de la dificultad mostrando que, cuando $E_1 = E_2$, la hipótesis $a_{nl} \ll 1$ para $n \neq l$ (ecuación 9–8) no es consistente con los resultados obtenidos a partir de ella en los casos $n = 1, 2$ y $l = 1, 2$. La dificultad se resuelve al observar que ciertamente no existe una base *a priori* para suponer que $a_{12} \ll 1$ y $a_{21} \ll 1$. Cuando $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$ corresponden al mismo valor propio. En estas condiciones puede muy bien acontecer que, en contraste con la hipótesis, una perturbación pequeña tenga un efecto grande y mezcle completamente las dos funciones propias degeneradas.

Para tomar en cuenta esta situación, modifiquemos el procedimiento en la siguiente forma. Consideremos, en primer lugar, el efecto que tiene la perturbación $\nu(x)$ sobre la mezcla de las dos funciones propias no perturbadas degeneradas, $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$. Al hacerlo, ignoramos la mezcla de $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$ con las demás funciones propias no perturbadas, $\psi_3(x)$, $\psi_4(x)$, $\psi_5(x)$, ... De este cálculo encontraremos las funciones propias

$$\begin{aligned} \psi_1^0(x) &= a_{11}\psi_1(x) + a_{12}\psi_2(x) \\ \psi_2^0(x) &= a_{21}\psi_1(x) + a_{22}\psi_2(x) \end{aligned} \tag{9–18}$$

y los valores propios

$$E_1^0, \quad E_2^0$$

Excepto en casos excepcionales se tendrá que $E_1^0 \neq E_2^0$; esto es, *la perturbación elimina la degeneración.* El error en las funciones propias ψ_1^0 y ψ_2^0 es del orden de la primera potencia de una cantidad pequeña (los a_{nl} para $n = 1$, 2 y $l = 3, 4, 5, \ldots$, que se han despreciado), aunque el error en los valores propios E_1^0 y E_2^0 es sólo del orden de la segunda potencia de las cantidades pequeñas. Ya que normalmente sólo es necesario conocer los valores propios, el cálculo se termina al encontrar E_1^0 y E_2^0. Sin embargo, si también es necesario conocer las funciones propias, debemos tomar el conjunto de funciones y valores propios

$$\begin{gathered} \psi_1^0(x), \psi_2^0(x), \psi_3^0(x), \psi_4^0(x), \ldots \\ E_1^0, E_2^0, E_3^0, E_4^0, \ldots \end{gathered} \tag{9–19}$$

donde

$$\begin{array}{lcl} \psi_3^0(x) = \psi_3(x) & \text{y} & E_3^0 = E_3 \\ \psi_4^0(x) = \psi_4(x) & \text{y} & E_4^0 = E_4 \\ \cdot \quad \cdot & & \cdot \quad \cdot \\ \cdot \quad \cdot & & \cdot \quad \cdot \\ \cdot \quad \cdot & & \cdot \quad \cdot \end{array}$$

* La ecuación (9–11) afirma que $a_{12} \simeq \nu_{21}/(E_1' - E_2)$. Haciendo $E_1 = E_2$ y empleando la ecuación (9–10), se tiene que $a_{12} \simeq \nu_{21}/(E_1' - E_1) \simeq \nu_{21}/\nu_{11} \sim 1$, en general. Observe que este resultado es independiente del "requisito adicional" de que $\nu(x)$ sea pequeña comparada con la diferencia entre dos valores propios no perturbados.

www.FreeLibros.me

y aplicar la teoría de la perturbación en el caso no degenerado para obtener el conjunto de funciones y valores propios

$$\begin{gathered}\psi_1'(x),\ \psi_2'(x),\ \psi_3'(x),\ \psi_4'(x),\ \ldots \\ E_1',\ E_2',\ E_3',\ E_4',\ \ldots\end{gathered} \tag{9–20}$$

donde

$$E_1' = E_1^0 \quad \text{y} \quad E_2' = E_2^0$$

Todas estas funciones y valores propios contienen un error del orden del cuadrado de una cantidad pequeña.

Evaluemos ahora ψ_1^0, ψ_2^0, E_1^0, y E_2^0. Supongamos que $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$ son ortogonales tanto mutuamente como a los demás $\psi_3(x)$, $\psi_4(x)$, $\psi_5(x)\ldots$*, y que todas las funciones propias están normalizadas. Es claro que podemos escribir una ecuación idéntica con (9–7), reemplazando E_n' por E_n^0. Esto es

$$a_{nm}(E_n^0 - E_m) = \sum_l a_{nl}v_{ml}$$

Hagamos toda $a_{nl} = 0$ salvo para $n = 1, 2$ y $l = 1, 2$. Obtenemos dos ecuaciones, una para $m = 1$ y otra para $m = 2$:

$$a_{n1}(E_n^0 - E_1) = \sum_{l=1,2} a_{nl}v_{1l}, \qquad n = 1, 2$$

$$a_{n2}(E_n^0 - E_2) = \sum_{l=1,2} a_{nl}v_{2l}, \qquad n = 1, 2$$

Escribiendo explícitamente las sumas, tenemos

$$a_{n1}(E_n^0 - E) = a_{n1}v_{11} + a_{n2}v_{12}, \qquad n = 1, 2 \tag{9–21}$$

$$a_{n2}(E_n^0 - E) = a_{n1}v_{21} + a_{n2}v_{22}, \qquad n = 1, 2 \tag{9–22}$$

donde hemos puesto $E_1 = E_2 = E$. Escribamos las ecuaciones en la forma

$$(E_n^0 - E - v_{11})a_{n1} + (-v_{12})a_{n2} = 0, \qquad n = 1, 2$$

$$(-v_{21})a_{n1} + (E_n^0 - E - v_{22})a_{n2} = 0, \qquad n = 1, 2$$

Es claro que son un par de ecuaciones lineales homogéneas en las incógnitas a_{n1} y a_{n2}. Para que exista una solución distinta de la trivial, es necesario que el determinante del sistema de ecuaciones sea igual a cero. Esto es, se debe tener

$$\begin{vmatrix} (E_n^0 - E - v_{11}) & -v_{12} \\ -v_{21} & (E_n^0 - E - v_{22}) \end{vmatrix} = 0, \qquad n = 1, 2 \tag{9–23}$$

* Que esto es posible se muestra en la nota al pie de la página 193.

www.FreeLibros.me

Efectuando las operaciones,

$$(E_n^0 - E - v_{11})(E_n^0 - E - v_{22}) - v_{21}v_{12} = 0, \qquad n = 1, 2 \quad (9\text{–}24)$$

En muchos casos de interés físico resulta que $v_{11} = v_{22}$, y que v_{12} y v_{21} son reales. Para simplificar la discusión supondremos que esto es válido. La definición (9–6) muestra que siempre $v_{21} = v_{12}^*$, de manera que $v_{21} = v_{12}$, y también $v_{11} = v_{22}$. La ecuación (9–24) se puede escribir como

$$(E_n^0 - E - v_{11})^2 - v_{12}^2 = 0, \qquad n = 1, 2$$

Esta es una ecuación cuadrática en E_n^0, cuyas soluciones son

$$E_n^0 - E - v_{11} = \pm v_{12}, \qquad n = 1, 2$$

una para cada valor de n. Arbitrariamente tomamos para $n = 1$ el signo + y para $n = 2$ el signo −. Así

$$\begin{aligned} E_1^0 &= E + v_{11} + v_{12} \\ E_2^0 &= E + v_{11} - v_{12} \end{aligned} \qquad (9\text{–}25)$$

Consideremos ahora la ecuación (9–21) con $n = 1$

$$a_{11}(E_1^0 - E) = a_{11}v_{11} + a_{12}v_{12}$$

Substituyendo E_1^0 dado por (9–25) y transponiendo, se tiene que

$$a_{11}(v_{11} + v_{12} - v_{11}) = a_{12}v_{12}$$

Por consiguiente

$$a_{11} = a_{12}$$

La función propia perturbada que corresponde al valor propio perturbado E_1^0, es igual a

$$\psi_1^0(x) = a_{11}[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$$

Se debe ajustar el coeficiente a_{11} de manera que $\psi_1^0(x)$ resulte normalizada. Fácilmente se encuentra $a_{11} = 1/\sqrt{2}$. Así

$$\psi_1^0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x) + \psi_2(x)] \qquad (9\text{–}26)$$

y también tenemos

$$E_1^0 = E + v_{11} + v_{12} \qquad (9\text{–}26')$$

Consideremos la ecuación (9–21) con $n = 2$

$$a_{21}(E_2^0 - E) = a_{21}v_{11} + a_{22}v_{12}$$

www.FreeLibros.me

Calculando E_2^0, tenemos

$$a_{21}(v_{11} - v_{12} - v_{11}) = a_{22}v_{12}$$

de manera que

$$-a_{21} = a_{22}$$

y

$$\psi_2^0(x) = a_{22}[\psi_1(x) - \psi_2(x)]$$

Al normalizar obtenemos

$$\psi_2^0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x) - \psi_2(x)] \tag{9–27}$$

También

$$E_2^0 = E + v_{11} - v_{12} \tag{9–27'}$$

Salvo el caso inusitado cuando el elemento de matriz es igual a cero, las ecuaciones (9–26′) y (9–27′) muestran que la perturbación $\nu(x)$ ha eliminado la degeneración. Los dos valores propios perturbados E_1^0 y E_2^0 están separados por la energía

$$E_1^0 - E_2^0 = 2v_{12} \tag{9–28}$$

Entonces $\psi_1^0(x)$, $\psi_2^0(x)$, E_1^0 y E_2^0, junto con las funciones propias $\psi_3(x)$, $\psi_4(x), \ldots$ y los valores propios $E_3, E_4, \ldots$, no degenerados, proporcionan un conjunto completo no degenerado de funciones y valores propios (9–19) a los que es posible aplicar la teoría normal de la perturbación y obtener (9–20). Observe que las ecuaciones (9–26) y (9–27) ciertamente confirman nuestra sospecha de que aun una perturbación arbitrariamente pequeña producirá una mezcla grande de las funciones propias degeneradas $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$, ya que tanto $\psi_1^0(x)$ como $\psi_2^0(x)$ contienen iguales cantidades de estas funciones propias, independientemente de la magnitud de $\nu(x)$.

Cuando $\nu_{12} \neq \nu_{21}$, y/o $\nu_{11} \neq \nu_{22}$, el procedimiento es esencialmente el mismo, aunque más laborioso. Si el número de funciones propias degeneradas es α, todo permanece invariante salvo que en (9–23) aparece un determinante de orden α. El grado de la ecuación análoga a la (9–24) para E_n^0 será igualmente α. Para α grande su solución presentará alguna dificultad, aunque frecuentemente es posible llevarla a una forma cuyas raíces se puedan encontrar fácilmente.

Además, a menudo es posible eliminar todo el procedimiento de la teoría de la perturbación en el caso degenerado y emplear, en su lugar, la teoría en el caso no degenerado, si mediante algún argumento físico se puede encontrar una combinación lineal de las funciones propias degeneradas de tal naturaleza que no se mezclen al aplicar la perturbación. Consideremos el problema que hemos venido tratando, y supongamos que ψ_1^0 y ψ_2^0 se conocen *a priori*. Al aplicar la ecuación (9–13) de la teoría de la perturbación en el caso no

www.FreeLibros.me

degenerado, es posible encontrar E_1^0 y E_2^0, cuyo conocimiento es realmente lo que nos interesa. Esto es, si se aplica la ecuación (9–13) a ψ_1^0, obtenemos

$$E_1^0 - E = \int \psi_1^{0*} v \psi_1^0 \, dx = \int \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1^* + \psi_2^*] v \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1 + \psi_2] \, dx$$

$$= \frac{1}{2}\left[\int \psi_1^* v \psi_1 \, dx + \int \psi_1^* v \psi_2 \, dx + \int \psi_2^* v \psi_1 \, dx + \int \psi_2^* v \psi_2 \, dx\right]$$

$$= \tfrac{1}{2}[v_{11} + v_{12} + v_{21} + v_{22}]$$

$$= v_{11} + v_{12}$$

en concordancia con las ecuaciones (9–25). Aplicando la misma ecuación a ψ_2^0 obtenemos

$$E_2^0 - E = \int \psi_2^{0*} v \psi_2^0 \, dx = \int \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1^* - \psi_2^*] v \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1 - \psi_2] \, dx$$

$$= \frac{1}{2}\left[\int \psi_1^* v \psi_1 \, dx - \int \psi_1^* v \psi_2 \, dx - \int \psi_2^* v \psi_1 \, dx + \int \psi_2^* v \psi_2 \, dx\right]$$

$$= \tfrac{1}{2}[v_{11} - v_{12} - v_{21} + v_{22}]$$

$$= v_{11} - v_{12}$$

también en concordancia con la ecuación (9–25).

Se puede aplicar la teoría de la perturbación en el caso no degenerado con las combinaciones lineales ψ_1^0 y ψ_2^0 de las funciones propias degeneradas ψ_1 y ψ_2, ya que estas combinaciones particulares no se mezclan al aplicar la perturbación. Esto se puede ver evaluando las integrales para los coeficientes que, de acuerdo con la ecuación (9–14) en el caso no degenerado, determina la mezcla. Por ejemplo

$$\int \psi_1^{0*} v \psi_2^0 \, dx = \int \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1^* + \psi_2^*] v \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1 - \psi_2] \, dx$$

$$= \frac{1}{2}\left[\int \psi_1^* v \psi_1 \, dx - \int \psi_1^* v \psi_2 \, dx + \int \psi_2^* v \psi_1 \, dx - \int \psi_2^* v \psi_2 \, dx\right]$$

$$= \tfrac{1}{2}[v_{11} - v_{12} + v_{21} - v_{22}] = 0$$

De manera semejante

$$\int \psi_2^{0*} v \psi_1^0 \, dx = 0$$

www.FreeLibros.me

La perturbación no mezcla a ψ_1^0 con ψ_2^0, y se *puede aplicar directamente la teoría de la perturbación en el caso no degenerado a estas combinaciones lineales particulares, aun cuando se encuentren degeneradas antes de aplicar la perturbación.*

En capítulos ulteriores consideraremos varios ejemplos de argumentos físicos que se emplean en los sistemas cuánticos para hallar la combinación lineal adecuada de las funciones propias degeneradas, de manera que no se mezclen al aplicar la perturbación (vea los capítulos 11, 12 y 13). Consideraremos ahora un ejemplo de argumento físico aplicable a un sistema clásico: uno de los modos de vibración de alta frecuencia de la cabeza de un tambor posee sólo una línea nodal que coincide con un diámetro. Este modo de vibración está degenerado, ya que la orientación de la línea nodal es arbitraria. Sin embargo, la degeneración es solamente doble: existen únicamente dos vibraciones independientes, cuyas líneas nodales son perpendiculares entre sí. En la figura 9–5 se indican estas vibraciones degeneradas; todas las demás se obtienen como combinaciones lineales de estas dos. En particular, mediante una combinación lineal apropiada, se pueden construir otros pares independientes de vibraciones degeneradas, cuyas líneas nodales mutuamente perpendiculares tengan otra orientación. En ausencia de perturbación, todos estos conjuntos son equivalentes.

Imagine que aplicamos una perturbación al fijar una masa pequeña sobre la cabeza del tambor en una posición que no sea su centro, como se indica en la figura 9–6. En virtud de la asimetría producida por la perturbación, las dos vibraciones, que anteriormente eran independientes, se mezclan y forman dos nuevas vibraciones. Tanto las formas de estas vibraciones como sus frecuencias se pueden encontrar mediante el procedimiento de la teoría clásica de la perturbación en el caso degenerado. La figura 9–7 indica las vibraciones encontradas. Observamos que la perturbación elimina la degeneración, puesto que la masa se encuentra sobre la línea nodal de una de las vibraciones y, por esto, no tiene efecto alguno sobre la frecuencia de esa vibración, mientras que la frecuencia de la otra vibración sí varía.

Después de adquirir alguna experiencia con este tipo de problema es posible saber, a partir de argumentos físicos, cuál debe ser la forma de las vibraciones perturbadas. Esto permite eliminar el procedimiento complicado de la teoría clásica de la perturbación en el caso degenerado, al tomar el conjunto de vibraciones no perturbadas y degeneradas de modo que una de sus líneas nodales pase por la masa. Al aplicar la perturbación no se mezclan las vibraciones, ya que su forma antes de la aplicación es igual a la que tiene después y puede usarse la teoría de la perturbación en el caso no degenerado. Esto simplifica considerablemente el cálculo del corrimiento de la frecuencia producido por la perturbación, que es la única cantidad que ordinariamente interesa.

5. Teoría de la perturbación dependiente del tiempo

Desarrollaremos una teoría para las perturbaciones que dependan tanto de la posición como del tiempo. Este es un caso importante por varias razones.

www.FreeLibros.me

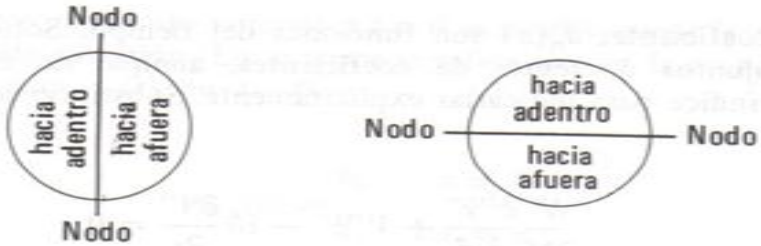

Figura 9-5. Dos vibraciones degeneradas independientes para una cabeza circular de tambor.

Figura 9-6. Aplicando una perturbación a una cabeza circular de tambor.

Figura 9-7. El resultado de aplicar una perturbación a una cabeza circular de tambor.

Una de ellas es que proporciona un método para resolver la ecuación de Schrödinger con un potencial $V(x, t)$ dependiente del tiempo.* Consideremos un potencial de este tipo, que se puede descomponer en la forma

$$V'(x, t) = V(x) + v(x, t) \tag{9–29}$$

donde $V(x)$ es un potencial no perturbado independiente del tiempo y $v(x, t)$ es una perturbación pequeña dependiente del tiempo. Las soluciones a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con el potencial $V(x)$ son las funciones no perturbadas

$$\Psi_n(x, t) = e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x) \tag{9–30}$$

donde E_n y $\psi_n(x)$ son los valores y las funciones propios no perturbados. Supongamos que una solución a la ecuación de Schrödinger con $V'(x, t)$ se puede escribir como

$$\Psi'(x, t) = \sum_n a_n(t)\Psi_n(x, t) \tag{9–31}$$

* Un caso excepcional se presenta con el potencial del tipo $V(x, t) = V_1(x) + V_2(t)$. Solamente para esta forma es posible separar la ecuación de Schrödinger en la manera descrita en la sección 4 del capítulo 7, al suponer una solución $\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$.

www.FreeLibros.me

donde los coeficientes $a_n(x)$ son funciones del tiempo. Soluciones distintas tendrán conjuntos diferentes de coeficientes, aunque no empleáramos un segundo subíndice para indicarlas explícitamente. Substituyamos (9–31) en la ecuación

$$\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\Psi'}{\partial x^2} + V'\Psi' - i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t} = 0$$

que es la que tiene que satisfacer. Obtenemos

$$\sum_n a_n\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\Psi_n}{\partial x^2} + V\Psi_n - i\hbar\frac{\partial\Psi_n}{\partial t}\right] + \sum_n a_n v\Psi_n - i\hbar\sum_n \frac{da_n}{dt}\Psi_n = 0$$

El paréntesis se cancela puesto que Ψ_n es una solución a la ecuación de Schrödinger con el potencial V. Multipliquemos los términos restantes por el complejo conjugado de alguna función no perturbada $\Psi_m = e^{-iE_m t/\hbar}\,\psi_m$, e integremos sobre toda x. Al substituir el valor de Ψ_n, obtenemos

$$\sum_n a_n e^{-i(E_n-E_m)t/\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^* v\psi_n\,dx = i\hbar\sum_n\frac{da_n}{dt}\,e^{-i(E_n-E_m)t/\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\psi_n\,dx$$

Puesto que las funciones ψ_n son ortonormales

$$\frac{da_m(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\sum_n a_n(t)e^{-i(E_n-E_m)t/\hbar}v_{mn} \tag{9–32}$$

donde hemos extendido la definición del elemento de matriz v_{mn} (ecuación 9–6) para incluir las perturbaciones dependientes del tiempo. La ecuación (9–36) representa un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, una para cada m, que determina las $a_n(t)$. Los detalles de la solución a estas ecuaciones dependen del problema que se esté tratando. Consideremos aquí un caso simple pero muy ilustrativo.

Supongamos una perturbación de la forma

$$v(x,t) = \begin{matrix} 0, & t<0 \\ v(x), & t>0 \end{matrix} \tag{9–33}$$

Esto es, al tiempo $t=0$ se "conecta" la perturbación $v(x)$. En este caso, el conjunto de funciones de onda (9–30) son soluciones exactas para $t<0$. Supongamos que para $t<0$ la función de onda de la partícula es igual a alguna de las funciones de onda, por ejemplo, $\Psi_k(x,t)$. Esto quiere decir que para $t<0$ se sabe que la energía de la partícula es precisamente igual a E_k. Esto no se encuentra en conflicto con el principio de incertidumbre

$$\Delta\tau\,\Delta E \gtrsim \hbar \tag{9–34}$$

www.FreeLibros.me

ya que en el tiempo infinito anterior a $t = 0$ es posible medir la energía de la partícula con toda precisión. Lo anterior significa que en la ecuación (9–31) se debe tener, para $a_n(t)$ en $t = 0$.

$$a_n(0) = \begin{matrix} 0, & n \neq k \\ 1, & n = k \end{matrix} \tag{9–35}$$

[Suponemos que las $a_n(t)$ no cambian abruptamente en $t = 0$, lo que se justificará por los resultados del cálculo.] Deseamos encontrar la función de onda perturbada $\Psi'(x, t)$ al tiempo $t > 0$. Por consiguiente, debemos, evaluar $a_n(t)$ para $t > 0$.

Para una perturbación $v(x)$ suficientemente pequeña, o para tiempos t suficientemente pequeños de modo que

$$a_n(t) \begin{matrix} \ll 1, & n \neq k, \\ \simeq 1, & n = k, \end{matrix} \quad t > 0 \tag{9–36}$$

podemos despreciar todos los términos del miembro derecho de la ecuación (9–32) salvo el $n = k$:

$$\frac{da_m(t)}{dt} \simeq -\frac{i}{\hbar} a_k(t) e^{-i(E_k - E_m)t/\hbar} v_{mk} \tag{9–37}$$

Si $m = k$, tenemos

$$\frac{da_k(t)}{dt} \simeq -\frac{i}{\hbar} a_k(t) v_{kk}$$

o sea

$$\frac{da_k(t)}{a_k(t)} \simeq -\frac{i}{\hbar} v_{kk}\, dt$$

Al integrar ambos miembros desde $t' = 0$, hasta $t' > 0$, y recordando que todas las v_{mk} son independientes del tiempo para $t > 0$, se tiene

$$\Big[\ln a_k(t)\Big]_0^{t'} \simeq \left[-\frac{i}{\hbar} v_{kk} t\right]_0^{t'}$$

lo que es igual a

$$\ln\left[\frac{a_k(t')}{a_k(0)}\right] \simeq -\frac{i}{\hbar} v_{kk} t', \quad t' > 0$$

www.FreeLibros.me

Hemos supuesto en (9–35) que $a_k(0) = 1$, de modo que

$$a_k(t) \simeq e^{-iv_{kk}t/\hbar}, \qquad t > 0 \tag{9–38}$$

donde hemos eliminado las primas para simplificar la notación.

Calculemos ahora $a_n(t)$, para $n \neq k$ poniendo en (9–37) $m = n$; suponemos además que $a_k(t) = 1$. Tenemos

$$\frac{da_n(t)}{dt} \simeq -\frac{i}{\hbar} e^{-i(E_k - E_n)t/\hbar} v_{nk}, \qquad n \neq k$$

o sea

$$da_n(t) \simeq -\frac{i}{\hbar} v_{nk} e^{-i(E_k - E_n)t/\hbar}\, dt, \qquad n \neq k$$

Integrando desde 0 hasta $t' > 0$, obtenemos

$$\Big[a_n(t)\Big]_0^{t'} \simeq \left[\frac{v_{nk}}{E_k - E_n} e^{-i(E_k - E_n)t/\hbar}\right]_0^{t'}$$

Puesto que, de (9–35), $a_n(0) = 0$,

$$a_n(t) \simeq \frac{v_{nk}}{E_k - E_n}\left[e^{-i(E_k - E_n)t/\hbar} - 1\right], \qquad n \neq k \tag{9–39}$$

donde nuevamente hemos eliminado las primas. A partir de (9–31), (9–38) y (9–39) encontramos que

$$\Psi'(x, t) \simeq e^{-i(E_k + v_{kk})t/\hbar}\, \psi_k(x) + \sum_{\substack{n \\ n \neq k}} \frac{v_{nk}}{E_k - E_n}\left[e^{-i(E_k - E_n)t/\hbar} - 1\right] e^{-iE_n t/\hbar}\, \psi_n(x) \tag{9–40}$$

Observemos que la energía $E_k + v_{kk}$, que aparece en la exponencial del primer término, es igual a la energía perturbada $E_k' = E_k + v_{kk}$, que correspondería a una perturbación $v(x)$ independiente del tiempo.

Interesa estudiar la cantidad $a_n^*(t)a_n(t)$. Esta función real de t es el cuadrado del módulo del coeficiente $a_n(t)$. Si multiplicamos (9–39) por su complejo conjugado tenemos que

$$a_n^*(t)\, a_n(t) \simeq \frac{v_{nk}^* v_{nk}}{\hbar^2} \frac{\operatorname{sen}^2\left[\dfrac{(E_n - E_k)}{2\hbar} t\right]}{\left(\dfrac{E_n - E_k}{2\hbar}\right)^2} \tag{9–41}$$

Esta cantidad oscila en el tiempo entre cero y $4v_{nk}^* v_{nk}/(E_n - E_k)^2$, con frecuencia $\nu = (E_n - E_k)/h$. En la figura 9–8 se muestra la gráfica del factor

www.FreeLibros.me

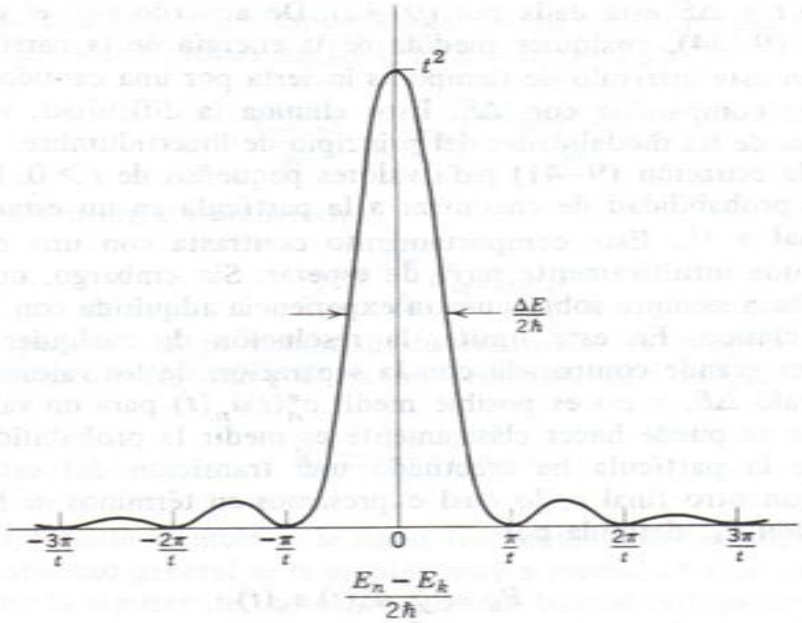

Figura 9-8. Gráfica de una función que surge en la teoría de la perturbación dependiente del tiempo.

$\text{sen}^2[(E_n - E_k)t/2\hbar]/[(E_n - E_k)/2\hbar]^2$ en función de $(E_n - E_k)/2\hbar$ para una t dada. La función de onda que describe inicialmente a la partícula sólo contiene la función $\Psi_k(x, t)$, que corresponde al estado propio $\Psi_k(x, t)$. La perturbación $v(x, t)$ tiene el efecto de mezclar las contribuciones provenientes de otros estados propios sobre todo el intervalo del número cuántico n. Observamos que la contribución más importante proviene de aquellas n correspondientes a valores propios E_n que se encuentran dentro de un intervalo centrado en E_k y de longitud ΔE, de manera que

$$\Delta E/2\hbar \sim \pi/t$$

o sea

$$\Delta E \sim 2\pi\hbar/t \tag{9–42}$$

En la sección 8 del capítulo 7 mostramos que el valor de $a_n^*(t)a_n(t)$ es igual a la probabilidad de encontrar a la partícula en el estado propio n al tiempo t. (En realidad, el argumento considera que las a_n son constantes, aunque es fácil convencerse que es igualmente válido cuando son funciones del tiempo.) Así, al tiempo t, existe una cierta probabilidad de encontrar a la partícula en el estado propio final n, distinto del estado propio inicial k y con una energía total E_n distinta de la inicial E_k. Aparentemente se viola la ley de la conservación de la energía por la cantidad $E_n - E_k$, que puede ser grande respecto a la energía v_{kk} proporcionada por la perturbación. Sin embargo, en el intervalo de tiempo entre 0 y t, la probabilidad de encontrar a la partícula con energía E_n es importante sólo si $E_n - E_k$ es del orden de ΔE, donde la

www.FreeLibros.me

relación entre t y ΔE está dada por (9–42). De acuerdo con el principio de incertidumbre (9–34), cualquier medida de la energía de la partícula que se lleva a cabo en este intervalo de tiempo es incierta por una cantidad del orden de $\hbar/t$, que es comparable con ΔE. Esto elimina la dificultad, y nos da un ejemplo de una de las modalidades del principio de incertidumbre.

Considere la ecuación (9–41) para valores pequeños de $t > 0$. La ecuación afirma que la probabilidad de encontrar a la partícula en un estado propio n es proporcional a t^2. Este comportamiento contrasta con una dependencia lineal con t, que intuitivamente sería de esperar. Sin embargo, nuestra intuición física se basa siempre sobre nuestra experiencia adquirida con los sistemas en el límite clásico. En este límite, la resolución de cualquier dispositivo experimental es grande comparada con la separación de los valores propios, o aun del intervalo ΔE, y no es posible medir $a_n^*(t)a_n(t)$ para un valor dado de n. Lo más que se puede hacer clásicamente es medir la probabilidad total de encontrar que la partícula ha efectuado una transición del estado propio inicial k a algún otro final n, lo cual expresamos en términos de la *probabilidad de transición* P_k, definida por

$$P_k \equiv \sum_{\substack{n \\ n \neq k}} a_n^*(t)\, a_n(t) \tag{9–43}$$

Para evaluarla supongamos que existen en el intervalo ΔE un número grande de estados propios finales sumamente próximos entre sí; si dN_n es el número de ellos dentro del intervalo de energía dE_n, la densidad de estados propios finales es $\rho_n = dN_n/dE_n$. Entonces, la suma sobre n se puede aproximar por una integral sobre dN_n, esto es

$$P_k \simeq \int_{-\infty}^{\infty} a_n^*(t)\, a_n(t)\, dN_n = \int_{-\infty}^{\infty} a_n^*(t)\, a_n(t) \frac{dN_n}{dE_n}\, dE_n$$

Si se substituye el valor de $a_n^*(t)a_n(t)$, dado por (9–41) tenemos

$$P_k \simeq \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} v_{nk}^* v_{nk}\, \rho_n \frac{\operatorname{sen}^2 \left[\dfrac{(E_n - E_k)}{2\hbar} t \right]}{\left(\dfrac{E_n - E_k}{2\hbar} \right)^2} dE_n$$

Debido al factor $\operatorname{sen}^2 [(E_n - E_k)t/2\hbar]/[(E_n - E_k)/2\hbar]^2$, la contribución mayor a la integral proviene del intervalo ΔE. Si suponemos que en este intervalo tanto el elemento de matriz v_{nk} como la densidad de estados finales ρ_n son aproximadamente constantes, podemos escribir

$$P_k \simeq \frac{v_{nk}^* v_{nk}}{\hbar^2} \rho_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sen}^2 \left[\dfrac{(E_n - E_k)}{2\hbar} t \right]}{\left(\dfrac{E_n - E_k}{2\hbar} \right)^2} dE_n$$

www.FreeLibros.me

El número cuántico n corresponde ahora a un estado propio final típico en la vecindad del estado propio inicial k. Si $Z = (E_n - E_k)t/2\hbar$.

$$P_k \simeq \frac{v_{nk}^* v_{nk}}{\hbar^2} \rho_n \, 2\hbar t \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sen}^2 Z}{Z^2} \, dZ$$

y efectuando la integral obtenemos

$$P_k \simeq \frac{2\pi}{\hbar} v_{nk}^* v_{nk} \rho_n t \tag{9-44}$$

Como se esperaba, la probabilidad de transición es proporcional a t. La *rapidez de transición* $R_k \equiv dP_k/dt$ es independiente de t ya que

$$R_k \simeq \frac{2\pi}{\hbar} v_{nk}^* v_{nk} \rho_n \tag{9-45}$$

A esta importante fórmula se le llama frecuentemente la *regla de oro N.° 2*. Por su aplicabilidad general se la emplea muy a menudo.* Con esta fórmula se puede calcular la rapidez de transición cuando, bajo el influjo de una perturbación constante, se efectúa una transición a un intervalo esencialmente continuo de estados finales. Observe que tenemos aquí un buen ejemplo del empleo de la mecánica cuántica en la evaluación de la rapidez de transición, lo que constituye una ventaja indiscutible sobre la antigua teoría cuántica.

BIBLIOGRAFIA

Bohm, D., *Quantum Theory*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1951.

Pauling, L., y E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1935.

Schiff, L. I., *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

Sherwin, C. W., *Introduction to Quantum Mechanics*, Henry Holt and Co., Nueva York, 1959.

EJERCICIOS

1. Mediante la teoría de la perturbación calcule el primer valor propio E_1 y la primera función propia $\psi_1(x)$ para el potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < -a/2, \; x > a/2 \\ \delta \dfrac{x}{a/2}, & -a/2 < x < a/2 \end{cases}$$

donde δ es pequeña respecto a E_1. Compare estos resultados con los del cálculo de la sección 3.

* La emplearemos en los capítulos 15 y 16, y una fórmula muy parecida en el capítulo 13.

www.FreeLibros.me

2. Use la teoría de la perturbación para calcular el primer valor propio E_1 con el potencial del ejercicio 4 del capítulo 7. Compare los resultados con los obtenidos mediante la integración numérica llevada a cabo en ese ejercicio y también con los resultados del tratamiento analítico del ejercicio 6 del capítulo 8.

3. Salvo en ciertos casos patológicos, no surgen degeneraciones en los problemas que consideran el movimiento de una partícula en una sola dimensión. Para tener un ejemplo sencillo de la aplicación de la teoría de la perturbación en el caso degenerado, considere una partícula que se mueve en un pozo de potencial infinito de dos dimensiones,

$$V(x, y) = \begin{matrix} \infty, & x < -a/2, x > a/2, y < -a/2, y > a/2 \\ 0, & -a/2 < x < a/2, -a/2 < y < a/2 \end{matrix}$$

Después de consultar la primera sección del capítulo próximo, considere la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con este potencial. Separe la ecuación diferencial en derivadas parciales en dos ecuaciones diferenciales ordinarias por el método usual, aprovechando que $V(x, y)$ se puede escribir como $V(x) + V(y)$. Las soluciones se pueden escribir inmediatamente ya que tanto las ecuaciones como las condiciones que satisface ψ a la frontera son las mismas que para un pozo cuadrado infinito en una dimensión. Observe que casi todos los estados están degenerados. Supongamos ahora que se aplica la perturbación

$$v(x, y) = \begin{matrix} \delta, & x > a/4, y > a/3 \\ 0, & \text{de otra manera} \end{matrix}$$

Efectúe un cálculo rutinario de perturbación para investigar su efecto sobre los dos primeros estados propios degenerados.

4. Tome las combinaciones lineales de las funciones propias degeneradas no perturbadas que se encontraron en el ejercicio 3 y demuestre que, si se emplean en una teoría de la perturbación en el caso no degenerado, el corrimiento calculado en la energía es igual al que se obtiene en ese ejercicio. Demuestre, asimismo, que en esta teoría no se mezclan las combinaciones lineales de las funciones propias no perturbadas aunque estén degeneradas antes de aplicar la perturbación.

5. Se sabe que para $t > 0$ un electrón se encuentra en el estado $n = 1$ de un potencial de pozo cuadrado infinito de una dimensión que se extiende desde $x = -a/2$ hasta $x = a/2$. En $t = 0$ se aplica un campo eléctrico constante E en la dirección positiva del eje x. Después del tiempo τ el campo eléctrico desaparece. Calcule, mediante la teoría de la perturbación dependiente del tiempo, la probabilidad de que para $t > \tau$ el electrón se encuentre en los estados propios $n = 2$, 3, o 4. Haga la gráfica de estas probabilidades en función de τ. *Nota:* Se pueden emplear algunos de los resultados del ejercicio 1.

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 10

Atomos con un electrón

1. La mecánica cuántica en varias dimensiones y para muchas partículas

Hasta ahora hemos restringido el estudio de la mecánica cuántica a una sola partícula que se mueve en una dimensión. Para preparar el estudio de los átomos, debemos generalizarla al caso de un sistema de partículas que se mueven en un espacio tridimensional.

Consideremos N partículas cuyas posiciones están definidas por un conjunto de coordenadas rectangulares x, y, z. Primero desarrollaremos la ecuación de Schrödinger para este caso empleando la misma técnica que en la sección 8 del capítulo 7. Escribimos la expresión clásica que define la energía total del sistema como

$$\sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2m_j}(p_{x_j}^2 + p_{y_j}^2 + p_{z_j}^2) + V(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_j, y_j, z_j, \ldots, x_N, y_N, z_N, t) = E \quad (10\text{–}1)$$

La cantidad p_{x_j} es la componente x del impulso de la j-ésima partícula, p_{y_j} y p_{z_j} sus componentes y y z, m_j su masa. Así, el j-ésimo término de la suma es la energía cinética de la j-ésima partícula, y el valor de toda la suma es la energía cinética del sistema. La energía total de la partícula depende, en general, de las coordenadas de cada partícula al tiempo t. Las cantidades x_j, y_j, z_j son las tres coordenadas de la j-ésima partícula. Reemplacemos las cantidades dinámicas p_{x_j}, p_{y_j}, p_{z_j} y E por sus operadores diferenciales asociados (vea 7–77), de manera que

$$\sum_{j=1}^{N} -\frac{\hbar^2}{2m_j}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2}\right) + V(x_1, \ldots, z_N, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad (10\text{–}2)$$

Multiplicando esta ecuación entre operadores por los miembros de la identidad

$$\Psi(x_1, \ldots, z_N, t) = \Psi(x_1, \ldots, z_N, t) \quad (10\text{–}3)$$

www.FreeLibros.me

obtenemos la ecuación de Schrödinger para el sistema

$$\sum_{j=1}^{N} -\frac{\hbar^2}{2m_j}\nabla_j^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{10–4}$$

donde el símbolo

$$\nabla_j^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} \tag{10–5}$$

representa el *operador de Laplace* en coordenadas rectangulares para la j-ésima partícula.

La función de onda para el sistema, $\Psi(x_1, \ldots, z_N, t)$ es una función de $3N + 1$ variables—3 coordenadas espaciales para cada una de las N partículas y una para el tiempo. Una extensión natural de los postulados (7–21), (7–31) y (7–80) nos da el significado de esta función de onda. Por ejemplo, al establecer el *postulado*

Si, al tiempo t, se efectúa una medida para localizar las partículas en el sistema asociado con la función de onda $\Psi(x_1, \ldots, z_N, t)$, la probabilidad $P(x_1, \ldots, z_N, t)dx_1 \cdots dz_N$ de que la coordenada x de la primera partícula se encuentre entre x_1 y $x_1 + dx_1$, etc., y la coordenada z de la N-ésima partícula se encuentre entre z_N y $z_N + dz_N$, es igual a

$$P(x_1, \ldots, z_N, t)\, dx_1 \cdots dz_N = \Psi^*(x_1, \ldots, z_N, t)\, \Psi(x_1, \ldots, z_N, t)\, dx_1 \cdots dz_N$$

Esencialmente, todas las propiedades de la ecuación de Schrödinger (10–4) y de la función de onda (10–3) se pueden encontrar al efectuar extensiones obvias de las propiedades consideradas en los capítulos 7, 8 y 9. Por ejemplo, se puede demostrar fácilmente por el método usual que, cuando el potencial V es independiente del tiempo, existen soluciones a la ecuación de Schrödinger de la forma

$$\Psi(x_1, \ldots, z_N, t) = \psi(x_1, \ldots, z_N)\, \phi(t) \tag{10–6}$$

donde

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar} \tag{10–7}$$

y $\psi(x_1, \ldots, z_N)$ es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\sum_{j=1}^{N} -\frac{\hbar^2}{2m_j}\nabla_j^2\psi + V\psi = E\psi \tag{10–8}$$

Observemos que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es, en el caso general que ahora discutimos, una ecuación diferencial en derivadas parciales. Asimismo, la función de onda $\Psi(x_1, \ldots, z_N, t)$ está definida en un

www.FreeLibros.me

espacio no físico de más de tres dimensiones. Es claro que esta función es sólo un instrumento de cálculo.

2. El átomo con un electrón

Las operaciones que hay que efectuar para resolver la ecuación de Schrödinger (10–8) se ilustran mejor considerando un ejemplo específico. En esta sección estudiaremos uno de los ejemplos más simples: el átomo con un electrón. Posiblemente también sea el ejemplo más interesante a causa del lugar destacado que ocupa en la teoría atómica el átomo con un electrón. Recordemos que éste fue el objeto del estudio más importante en la antigua teoría cuántica; veremos que el átomo con un electrón es igualmente importante en la mecánica cuántica. Por encima, y más allá de su interés intrínseco, la teoría de este sistema simple es fundamental, puesto que es la base del tratamiento cuántico de los átomos con varios electrones.

El átomo con un electrón es un sistema en tres dimensiones formado por dos partículas ligadas, un núcleo y un electrón, que se mueven bajo la atracción mutua de una fuerza de Coulomb. El núcleo tiene una masa m_1 y una carga $+Ze(Z = 1$ para el hidrógeno neutro, $Z = 2$ para el helio ionizado una vez, etc.) Sea la masa del electrón m_2 y $-e$ su carga. La energía potencial (de Coulomb) del sistema es

$$V(x_1, \ldots, z_2) = -\frac{Ze^2}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}} \tag{10–9}$$

donde x_1, y_1, z_1 son las coordenadas rectangulares del núcleo, y x_2, y_2, z_2 las del electrón. El denominador de la ecuación (10–9) es la distancia entre las dos partículas. La ecuación de Schrödinger para este caso es

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\left(\frac{\partial^2\psi_T}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2\psi_T}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2\psi_T}{\partial z_1^2}\right) - \frac{\hbar^2}{2m_2}\left(\frac{\partial^2\psi_T}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2\psi_T}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2\psi_T}{\partial z_2^2}\right)$$
$$+ V(x_1, \ldots, z_2)\psi_T = E_T\psi_T \tag{10–10}$$

Posteriormente se pondrá de manifiesto la razón de emplear el subíndice T.

Mediante un cambio de variables, la ecuación toma una forma que se puede separar en dos partes. Una de ellas representa el movimiento de translación del centro de masa del sistema, mientras que la otra corresponde al movimiento relativo de las dos partículas. Las nuevas variables son

$$x = \frac{m_1x_1 + m_2x_2}{m_1 + m_2}$$

$$y = \frac{m_1y_1 + m_2y_2}{m_1 + m_2} \tag{10–11}$$

$$z = \frac{m_1z_1 + m_2z_2}{m_1 + m_2}$$

www.FreeLibros.me

las coordenadas rectangulares del centro de masa del sistema y

$$r, \theta, \phi$$

las coordenadas esféricas del electrón respecto al núcleo.

En la figura 10–1 se ilustran estas coordenadas. Fácilmente se puede encontrar la relación entre ellas

$$\begin{aligned} r \operatorname{sen}\theta \cos\phi &= x_2 - x_1 \\ r \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi &= y_2 - y_1 \\ r \cos\theta &= z_2 - z_1 \end{aligned} \tag{10–12}$$

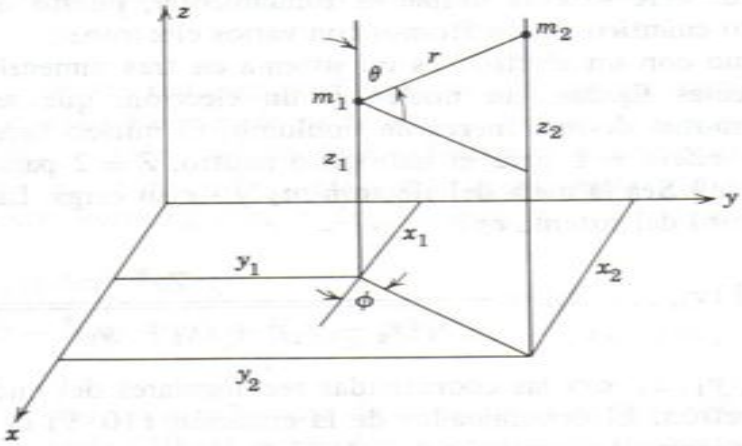

Figura 10-1. El átomo con un electrón descrito en coordenadas rectangulares y esféricas.

Mediante las relaciones (10–11) y (10–12), la ecuación (10–10) se puede transformar a las nuevas variables. Puesto que el cálculo es engorroso, presentaremos solamente los resultados:

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\left(\frac{\partial^2\psi_T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi_T}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi_T}{\partial z^2}\right)-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi_T}{\partial r}\right)\right.$$
$$\left.+\frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\psi_T}{\partial\phi^2}+\frac{1}{r^2\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\psi_T}{\partial\theta}\right)\right\}+V(r)\psi_T=E_T\psi_T \tag{10–13}$$

donde

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2} \quad \text{y} \quad V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

La cantidad μ es la masa reducida.

www.FreeLibros.me

La separación de esta ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se lleva a cabo mediante soluciones de la forma

$$\psi_T(x, y, z, r, \theta, \phi) = \psi_{CM}(x, y, z)\, \psi(r, \theta, \phi) \qquad (10\text{–}14)$$

Substituyéndola en la ecuación (10–13) y dividiendo entre $\psi_T = \psi_{CM}\psi$ se obtiene

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\frac{1}{\psi_{CM}}\left(\frac{\partial^2\psi_{CM}}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi_{CM}}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi_{CM}}{\partial z^2}\right)\right]$$
$$+\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)\right.\right.$$
$$\left.\left.+\frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}+\frac{1}{r^2\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)\right\}+V(r)\right]=E_T$$

El primer término es una función de x, y, z solamente, mientras que el segundo sólo lo es de r, θ, ϕ. Ya que la suma de los dos términos es igual a la constante E_T aun cuando las variables x, y, z son independientes de las variables r, θ, ϕ, es claro que cada término por separado debe ser igual a una constante. De este modo obtenemos dos ecuaciones

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\frac{1}{\psi_{CM}}\left(\frac{\partial^2\psi_{CM}}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi_{CM}}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi_{CM}}{\partial z^2}\right)=E_{CM}$$

y

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}+\frac{1}{r^2\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)\right\}+V(r)=E$$

donde

$$E_{CM}+E=E_T$$

Considere la primera ecuación, que escribimos como

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\left(\frac{\partial^2\psi_{CM}}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi_{CM}}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi_{CM}}{\partial z^2}\right)=E_{CM}\psi_{CM}$$

Esta es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula de masa m_1+m_2, cuyas coordenadas son las del centro de masa del átomo que se mueve con energía total E_{CM} en una región donde el potencial es igual a cero. La ecuación describe el movimiento de translación del átomo. Considere ahora la segunda ecuación, que escribimos como

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right.$$
$$\left.+\frac{1}{r^2\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)\right\}+V(r)\psi=E\psi \qquad (10\text{–}15)$$

www.FreeLibros.me

La cantidad encerrada en las llaves es $\nabla^2\psi$, donde ∇^2 es el operador de Laplace en las coordenadas esféricas r, θ, ϕ. Esta es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que describe el movimiento del electrón respecto al núcleo. Puesto que $E = E_T - E_{CM}$ donde E_T es la energía total de átomo y E_{CM} es la del movimiento de translación, E es la energía total del movimiento relativo, esto es, la energía total del átomo en un marco de referencia donde el centro de masa se encuentra en reposo. La ecuación (10–15) es formalmente idéntica a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un electrón de masa μ, en lugar de masa m_2, y coordenadas r, θ, ϕ, en movimiento alrededor de un núcleo de masa infinita que, en consecuencia, está en reposo (vea la sección 4 del capítulo 5).

Es evidente que en la ecuación (10–14) hemos descompuesto la función propia total ψ_T en el producto de una función propia ψ_{CM}, que especifica el movimiento del centro de masa del átomo, y de una función propia ψ que describe el movimiento del electrón respecto al núcleo. *Esta descomposición sólo es posible si el potencial V depende exclusivamente de las coordenadas de una partícula respecto a la otra.*

3. Separación y solución de la ecuación del movimiento relativo

No nos interesa ahora el movimiento de translación del átomo. En consecuencia, describiremos al átomo en un marco de referencia en el cual el centro de masa se encuentra en reposo; de este modo sólo necesitamos considerar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (10–15). Para el caso del potencial de Coulomb $V = -Ze^2/r$ y de hecho, *siempre que el potencial V sea una función de la coordenada radial exclusivamente, es posible separar la ecuación en tres ecuaciones diferenciales ordinarias.* Para esto, proponemos soluciones de la forma

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \tag{10–16}$$

Substituyéndola en (10–15) y dividiendo entre $-R\Theta\Phi\hbar^2/2\mu$, obtenemos

$$\frac{1}{r^2R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}\theta\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)] = 0$$

Multiplicando por $r^2 \operatorname{sen}^2\theta$ y transponiendo

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -\frac{\operatorname{sen}^2\theta}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{\operatorname{sen}\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) - \frac{2\mu}{\hbar^2}r^2\operatorname{sen}^2\theta[E - V(r)]$$

www.FreeLibros.me

Puesto que el miembro izquierdo sólo depende de ϕ y el derecho solamente de r y θ, ambos deben ser iguales a una constante que denotaremos por $-m^2$. De este modo obtenemos dos ecuaciones

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2\Phi \tag{10–17}$$

y

$$-\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{1}{\operatorname{sen}\theta\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) - \frac{2\mu}{\hbar^2}r^2[E - V(r)] = -\frac{m^2}{\operatorname{sen}^2\theta}$$

Por transposición, esta última se puede escribir como

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}[E - V(r)] = \frac{m^2}{\operatorname{sen}^2\theta} - \frac{1}{\operatorname{sen}\theta\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)$$

Por el argumento usual, ambos miembros de la ecuación deben ser iguales a una constante α. En consecuencia

$$-\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \frac{m^2\Theta}{\operatorname{sen}^2\theta} = \alpha\Theta \tag{10–18}$$

y

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)]R = \alpha\frac{R}{r^2} \tag{10–19}$$

El problema se ha reducido al de resolver las tres ecuaciones diferenciales ordinarias (10–17), (10–18) y (10–19). Finalmente encontraremos que la ecuación (10–17) tendrá soluciones aceptables sólo para ciertos valores de m. Al substituir estos valores en la ecuación (10–18), resulta que ésta tendrá soluciones aceptables sólo para ciertos valores de α. Al substituir estos valores de α en (10–19), sólo para ciertos valores de E corresponderán soluciones aceptables. Así, la energía está cuantizada.

Considere la ecuación (10–17). El lector puede verificar fácilmente que tiene una solución de la forma

$$\Phi(\phi) = e^{im\phi}$$

Por primera vez, debemos ahora considerar explícitamente el requisito de que la densidad y el flujo de probabilidad tengan valores definidos, esto es, que sean funciones *uniformes* para todos los valores de sus variables. Así debe ser, puesto que son cantidades mensurables que describen el comportamiento de una partícula con realidad física. Para que se cumpla lo anterior es necesario que *la función propia ψ sea uniforme*. En consecuencia, la función $\Phi(\phi)$ debe ser uniforme, lo que es necesario considerar explícitamente. Ya que los ángulos azimutales 0 y 2π son, de hecho, el mismo ángulo, debemos exigir que

$$\Phi(0) = \Phi(2\pi)$$

www.FreeLibros.me

Esto es

$$e^{im0} = e^{im2\pi}$$

o sea

$$1 = \cos m2\pi + i \operatorname{sen} m2\pi$$

lo cual es cierto sólo si

$$|m| = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{10–20}$$

esto es, si m es un entero.* El conjunto de funciones que son soluciones aceptables a la ecuación (10–17) son

$$\Phi_m(\phi) = e^{im\phi} \tag{10–21}$$

donde m toma los valores especificados en (10–20). Se ha empleado el *número cuántico m* como subíndice para indicar la forma de una solución particular.

Para manejar la ecuación (10–18) es conveniente cambiar la variable θ en ξ, donde

$$\xi = \cos\theta \tag{10–22}$$

La ecuación toma la forma

$$\frac{d}{d\xi}\left\{(1-\xi^2)\frac{d\Theta(\xi)}{d\xi}\right\} + \left\{\alpha - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right\}\Theta(\xi) = 0 \tag{10–23}$$

Esta ecuación diferencial no se puede resolver directamente por el método de series de potencias, puesto que la fórmula de recurrencia contiene más de dos términos (vea la sección 6 del capítulo 8). Pero, al considerar el comportamiento de la ecuación diferencial para los valores extremos de la variable, $\xi = \pm 1$, se encuentra que es posible una solución en series de potencias para la función $F(\xi)$ definida por

$$\Theta(\xi) = (1-\xi^2)^{|m|/2} F(\xi)$$

Después de resolver la ecuación para $F(\xi)$ se observa que las soluciones $\Theta(\xi)$, que deben ser finitas para todos los valores de la variable, existen sólo si $F(\xi)$ es un polinomio. Esto es posible sólo si α toma el valor

$$\alpha = l(l+1) \tag{10–24}$$

* Un tratamiento más riguroso no necesitará que ψ sea uniforme, sino que lo sea la cantidad mensurable $\psi^*\psi$. Es claro que pedir lo segundo permitirá que m pudiera tener valores enteros o semienteros. Sin embargo, en nuestra presentación pueden eliminarse los valores semienteros, puesto que para ellos la solución de la ecuación para $\Theta(\theta)$ conduciría a un flujo de probabilidad físicamente inaceptable. Valores semienteros para m se originan en relación con funciones $\Phi(\phi)$, y describen el "spin", lo que discutiremos en el capítulo siguiente.

www.FreeLibros.me

donde l es uno de los enteros

$$l = |m|, |m| + 1, |m| + 2, |m| + 3, \ldots \tag{10–25}$$

Para cada valor del *número cuántico* l existe una solución aceptable $F_l(\xi)$. Para identificar las soluciones particulares a la ecuación (10–18), que se escribe como

$$\Theta_{lm}(\xi) = (1 - \xi^2)^{|m|/2} F_l(\xi) \tag{10–26}$$

es necesario designarlas por dos números cuánticos l y m. En la literatura matemática a las funciones $\Theta_{lm}(\xi)$ se las conoce con el nombre de *funciones asociadas de Legendre*. Algunos ejemplos de ellas se presentarán en la sección 5.

Substituyendo (10–24) en (10–19) obtenemos

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left\{-\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)]\right\} R = 0 \tag{10–27}$$

En términos de la nueva variable

$$\rho = 2\beta r \tag{10–28}$$

donde

$$\beta^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} \tag{10–29}$$

y definiendo

$$\gamma = \frac{\mu Z e^2}{\hbar^2 \beta} \tag{10–30}$$

la ecuación (10–27) se puede escribir

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR(\rho)}{d\rho}\right) + \left\{-\frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\gamma}{\rho}\right\} R(\rho) = 0 \tag{10–31}$$

Nuevamente se tiene que la solución a la ecuación diferencial no se puede dar directamente por el método de series de potencias. Sin embargo, al considerar el comportamiento de la ecuación cuando $\rho \to \infty$, se encuentra que es posible una solución en series de potencias para la función $G(\rho)$ definida por

$$R(\rho) = e^{-\rho/2}\rho^l G(\rho)$$

Para que $G(\rho)$ sea un polinomio, cosa necesaria para evitar que $R(\rho)$ diverja cuando $\rho \to \infty$, es necesario que γ tenga el valor

$$\gamma = n \tag{10–32}$$

donde n es cualquiera de los enteros

$$n = l + 1, l + 2, l + 3, \ldots \tag{10–33}$$

www.FreeLibros.me

Las funciones que son soluciones aceptables a la ecuación (10–19), que se pueden escribir como

$$R_{nl}(\rho) = e^{-\rho/2}\rho^{l}G_{n}(\rho) \tag{10–34}$$

se designan por el *número cuántico* n y por el número cuántico l. En la sección 5 se darán ejemplos de estas *funciones asociadas de Laguerre*.*

El lector observará que el procedimiento seguido en la solución de las ecuaciones (10–18) y (10–19) es esencialmente el mismo que el que se emplea en la solución de la ecuación del oscilador armónico simple. De este modo, no debió haberle sido difícil el completar los detalles siguiendo el esbozo presentado anteriormente.

4. Números cuánticos, valores propios y degeneración

De acuerdo con la ecuación (10–16), las funciones propias son

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)\,\Theta_{lm}(\theta)\,\Phi_{m}(\phi) \tag{10–35}$$

Los tres números cuánticos son necesarios para identificar las funciones propias, ya que su forma matemática depende de los valores de cada uno de ellos. Estos surgen debido a que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo contiene tres variables independientes. Agrupando las condiciones que deben satisfacer los números cuánticos, tenemos

$$\begin{aligned} |m| &= 0, 1, 2, 3, \ldots \\ l &= |m|, |m| + 1, |m| + 2, \ldots \\ n &= l + 1, l + 2, l + 3, \ldots \end{aligned} \tag{10–36}$$

Estas condiciones se pueden expresar en una forma más cómoda

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, 4, \ldots \\ l &= 0, 1, 2, \ldots, n - 1 \\ m &= -l, -l + 1, \ldots, 0, \ldots, +l - 1, +l \end{aligned} \tag{10–37}$$

Observe que las ecuaciones (10–36) y (10–37) son equivalentes.**

* Observe que para un conjunto dado de números cuánticos sólo existe una solución aceptable $R_{nl}(\rho)$ a la ecuación (10–31), aunque toda ecuación de segundo grado tenga dos soluciones particulares; una de ellas no es aceptable, puesto que no es finita sobre todo el intervalo de variación de la variable ρ. El mismo argumento es válido para aceptar sólo una de las soluciones $\Theta_{lm}(\xi)$ de (10–23).

** Conforme a las ecuaciones (10–36), el valor mínimo de l es $|m|$; el valor mínimo de $|m|$ es 0. Así el valor mínimo de l es 0 y el de n, que es igual a $l + 1$, es $0 + 1 = 1$. Puesto que el valor de n es cualquier entero, sólo puede tomar los valores $n = 1, 2, 3, 4, \ldots$. Para un valor dado de n, el valor máximo de l es cualquiera que satisfaga la relación $n = l + 1$, esto es, $l = n - 1$. Así, los valores posibles de l son $l = 0, 1, 2, \ldots, n - 1$. Finalmente, para un valor de l, el valor máximo que $|m|$ puede tomar es $|m| = l$. De esta manera, el valor máximo de m es $+l$, y el mínimo $-l$, y solo puede tomar los valores $m = -l, -l + 1, \ldots, 0, \ldots, +l - 1, +l$.

www.FreeLibros.me

Combinemos ahora las ecuaciones (10–29), (10–30) y (10–32) con el objeto de obtener una expresión para los valores permitidos de la energía total de un átomo que contiene un electrón *ligado*. Esto es,

$$E = -\frac{\hbar^2\beta^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mu^2 Z^2 e^4}{\hbar^4\gamma^2} = -\frac{\hbar^2\mu^2 Z^2 e^4}{2\mu\hbar^4 n^2}$$

o sea

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}, \qquad n = 1, 2, 3, 4, \ldots \tag{10–38}$$

Al comparar esta ecuación con la (5–14), observamos que los valores propios que se predicen por la mecánica cuántica coinciden con los que predice la teoría de Bohr.* La derivación de esta ecuación por Schrödinger (1926) aporta la primera verificación convincente de la validez de la teoría de la mecánica cuántica.

Es conveniente observar que, si bien la forma de las funciones propias depende de los valores de los tres números cuánticos n, l, m, los *valores propios dependen sólo del número cuántico n*. Ya que para un valor dado de n hay, en general, diferentes valores posibles para l y m, se presentarán situaciones en las que dos o más funciones propias totalmente distintas estén degeneradas puesto que corresponden al mismo valor propio. Se presenta la degeneración respecto a m siempre que el potencial dependa exclusivamente de r, mientras que la degeneración respecto a l es una consecuencia de la forma como el potencial de Coulomb $V = -Ze^2/r$ depende de r (vea la

TABLA 10–1
Valores posibles de l y m, para $n = 1, 2, 3$

n	1	2		3			
l	0	0	1	0	1	2	
m	0	0	−1, 0, +1	0	−1, 0, +1	−2, −1, 0, +1, +2	
Número de funciones propias degeneradas para cada l	1	1	3	1	3	5	
Número de funciones propias degeneradas para cada n	1	4		9			

* Recuerde que m, en (5–14) se reemplazará por μ al tomar en cuenta que la masa del núcleo es finita.

www.FreeLibros.me

sección 7 del capítulo 5). A partir de las ecuaciones (10–37) se puede calcular el número de funciones propias degeneradas que corresponden a un valor propio particular E_n. En la tabla 10–1 se muestran estos valores para $n = 1$, 2 y 3. De esta tabla, o de las ecuaciones (10–37), es evidente que:

1. Para cada valor de n existen n valores posibles para l.
2. Para cada valor de l existen $(2l + 1)$ valores posibles para m.
3. Para cada valor de n, existen un total de n^2 funciones propias degeneradas.

5. Funciones propias y densidades de probabilidad

Las funciones propias son

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)\, \Theta_{lm}(\theta)\, \Phi_m(\phi)$$

Además, sabemos que

$$\Phi_m(\phi) = e^{im\phi}$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = (\text{polinomio en } \cos\theta)$$

$$R_{nl}(r) = e^{-(\text{constante})r}\ (\text{polinomio en } r)$$

Todas las funciones propias para estados ligados tienen, básicamente, la misma estructura, excepto que a medida que aumentan los valores de n y l se complican cada vez más los polinomios en r y $\cos\theta$. Además existen funciones propias para estados no ligados (esto es, un átomo de hidrógeno ionizado más un electrón no ligado con $E > 0$) que tienen una estructura diferente; por ahora no necesitaremos de este tipo de funciones. Damos a continuación las funciones propias para estado ligado correspondientes a los tres primeros valores de n:

$$\begin{aligned}
\psi_{100} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \\
\psi_{200} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} \\
\psi_{210} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0}\, e^{-Zr/2a_0} \cos\theta \\
\psi_{21\pm1} &= \frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0}\, e^{-Zr/2a_0} \operatorname{sen}\theta\, e^{\pm i\phi} \\
\psi_{300} &= \frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0} \\
\psi_{310} &= \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right)\frac{Zr}{a_0}\, e^{-Zr/3a_0} \cos\theta
\end{aligned} \tag{10–39}$$

www.FreeLibros.me

$$\psi_{31\pm1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right)\frac{Zr}{a_0}\, e^{-Zr/3a_0} \operatorname{sen}\theta\, e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\, e^{-Zr/3a_0}(3\cos^2\theta - 1)$$

$$\psi_{32\pm1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\, e^{-Zr/3a_0} \operatorname{sen}\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{32\pm2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\, e^{-Zr/3a_0} \operatorname{sen}^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}$$

Están escritas en términos del parámetro

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = 0.529 \times 10^{-8}\ \text{cm} \tag{10–40}$$

que, según recordará el lector, es el radio de la órbita más pequeña del átomo de hidrógeno de Bohr.

Las funciones propias (10–39) están normalizadas, esto es,

$$\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} \psi^*_{nlm}(r,\theta,\phi)\,\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi = 1 \tag{10–41}$$

donde $r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$ es el elemento de volumen en un sistema de coordenadas esféricas y la integral se extiende a todo el espacio. También las funciones propias son ortogonales, de manera que

$$\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} \psi^*_{n'l'm'}(r,\theta,\phi)\,\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi = 0 \tag{10–42}$$

excepto cuando $n' = n$, $l' = l$, y $m' = m$.

La mejor manera de interpretar las funciones propias es considerar la forma de la densidad de probabilidad $\psi^*_{nlm}\psi_{nlm} = R^*_{nl}\Theta^*_{lm}\Phi^*_m R_{nl}\Theta^*_{lm}\Phi_m$. Puesto que son funciones de tres variables, no podemos hacer la gráfica directamente. Sin embargo, se pueden entender adecuadamente al discutir separadamente su dependencia respecto a cada variable. Consideremos, en primer lugar, la dependencia de r en términos de la *densidad radial de probabilidad* $P_{nl}(r)$, dada por

$$\begin{aligned} P_{nl}(r)\, dr &\equiv \int_0^\pi\int_0^{2\pi} \psi^*_{nlm}\psi_{nlm} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi \\ &= r^2 R^*_{nl}(r)\, R_{nl}(r)\, dr \int_0^\pi\int_0^{2\pi} \Theta^*_{lm}\Theta_{lm}\Phi^*_m\Phi_m \operatorname{sen}\theta\, d\theta\, d\phi \end{aligned}$$

La integral sobre θ y ϕ es igual a la unidad, ya que cada una de las funciones R_{nl}, Θ_{lm}, y Φ_m están normalizadas por separado. (También son ortogonales por separado.) De este modo

$$P_{nl}(r)\, dr = r^2 R^*_{nl}(r)\, R_{nl}(r)\, dr \tag{10–43}$$

www.FreeLibros.me

Ahora bien, $\psi^*_{nlm}\psi_{nlm}r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$ es la probabilidad de encontrar el electrón en el elemento de volumen $r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$. Puesto que $P_{nl}(r)\, dr$ se obtiene a partir de esta cantidad al integrar sobre todos los valores de θ y ϕ, $P_{nl}(r)\, dr$ será igual a la probabilidad de que la coordenada radial del electrón r esté comprendida entre r y $r + dr$. En la figura 10–2 se muestra la gráfica de $P_{nl}(r)$ en unidades de Z/a_0 como función de $r/(a_0/Z)$ para $n = 1$, 2 y 3 y todos los valores posibles de l compatibles con los valores correspondientes de n. La densidad radial de probabilidad no depende del número cuántico m.

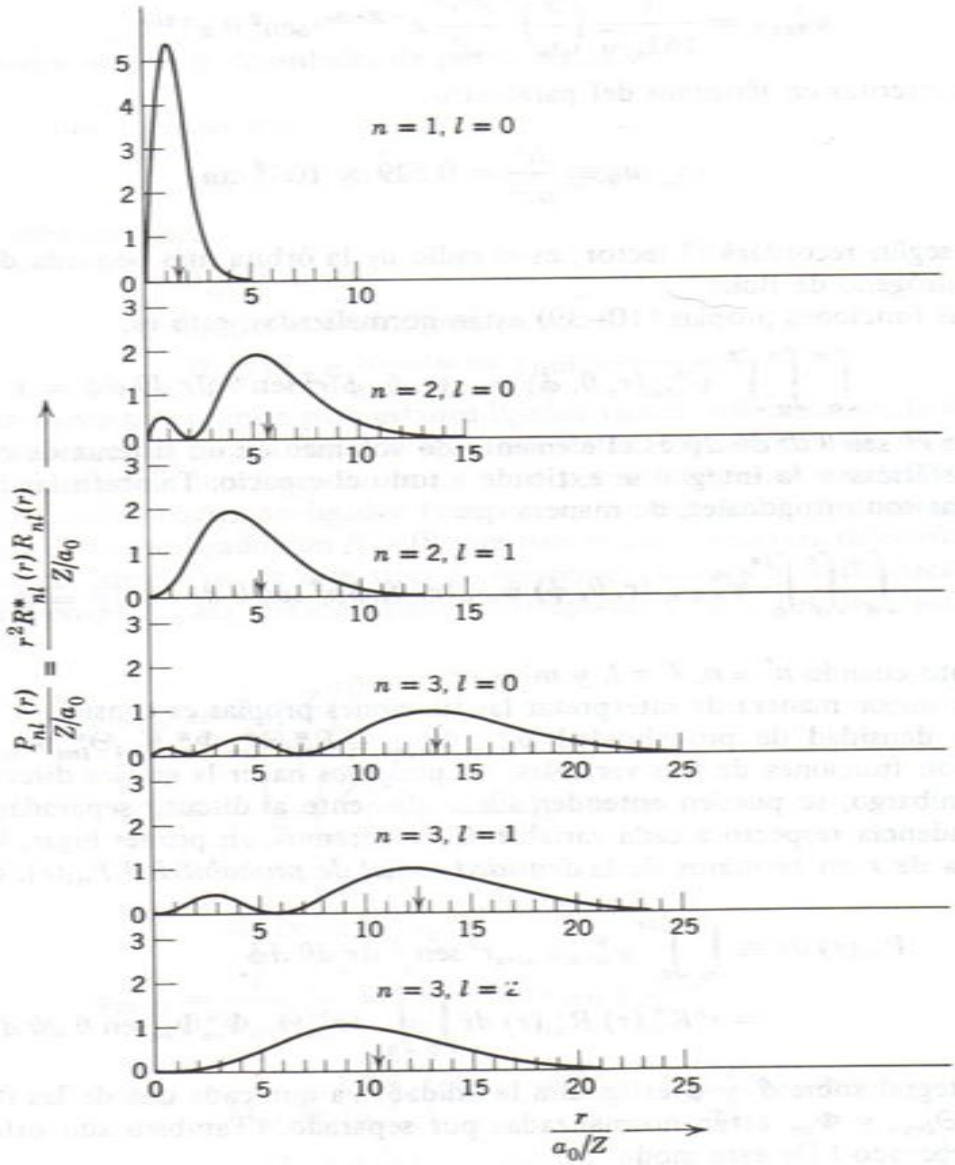

Figura 10-2. Las densidades de probabilidad radiales del átomo con un electrón para $n = 1, 2, 3$.

www.FreeLibros.me

Observamos que el valor de las densidades radiales de probabilidad para cada estado propio es apreciable sólo en un intervalo restringido del eje r. Es muy probable que, cuando el electrón se encuentra en un estado propio, el valor de su coordenada se encuentre dentro de un intervalo razonablemente bien definido; o sea, que es bastante probable que el electrón se encuentre dentro de una *capa* limitada por dos superficies esféricas centradas en el núcleo. Al estudiar estas figuras se inferirá que el radio característico de estas capas está determinado, fundamentalmente, por el número cuántico n, aunque existe una dependencia respecto a l, aunque de poca importancia. Esto se puede ver en una forma cuantitativa, calculando el valor esperado para la coordenada radial del electrón que caracteriza el radio de la capa. El valor esperado se obtiene calculando la integral

$$\overline{r_{nl}} = \int_0^\infty rP_{nl}(r)\,dr = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^*_{nlm}\, r\, \psi_{nlm} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

o sea

$$\overline{r_{nl}} = \frac{n^2 a_0}{Z}\left\{1 + \tfrac{1}{2}\left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2}\right]\right\} \tag{10–44}$$

En la figura 10–2 se indican los valores de $\overline{r_{nl}}$ mediante flechas pequeñas. Es obvio que $\overline{r_{nl}}$ depende fundamentalmente de n ya que la dependencia respecto a l se atenúa por el factor 1/2 y el factor $1/n^2$. Es interesante comparar esta expresión con (5–12), que da el valor del radio de las órbitas circulares del átomo de Bohr. La ecuación es

$$r_{\text{Bohr}} = \frac{n^2 a_0}{Z}$$

La mecánica cuántica muestra que el valor de $\overline{r_{nl}}$ es aproximadamente igual, al *radio* r de las órbitas circulares de Bohr y tiene la misma dependencia respecto a n.

Todos los electrones que se encuentren en estados propios con el mismo valor de n tienen densidades radiales de probabilidad semejantes y, aproximadamente, el mismo valor esperado para la coordenada radial, independientemente de los valores de l o m. De acuerdo con la terminología en uso, se dice que los electrones se encuentran en la misma capa.* Además, las funciones propias asociadas a cada capa corresponden al mismo valor de E_n.

Hasta cierto punto se puede entender por qué los valores propios dependen sólo de n al calcular el valor esperado para la energía potencial del átomo. Este es

$$\bar{V} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^*_{nlm}\left(\frac{-Ze^2}{r}\right)\psi_{nlm} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi = -Ze^2\overline{\left(\frac{1}{r}\right)}$$

* Ya que por ahora sólo consideramos átomos con un electrón, esta terminología se aplica a dos o mas átomos diferentes en cada uno de los cuales el electrón se encuentra en la misma capa. Sin embargo, también se emplea esta terminología en átomos con varios electrones cuando dos o más electrones se encuentran en la misma capa.

www.FreeLibros.me

El valor de $\overline{(1/r)}$ está dado por

$$\overline{\left(\frac{1}{r}\right)} = \frac{Z}{a_0 n^2} = \frac{\mu Z e^2}{\hbar^2 n^2}$$

Puesto que no depende de l o m, el valor esperado para la energía potencial

$$\bar{V} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{\hbar^2 n^2}$$

tampoco muestra dependencia respecto a ellos. Lo anterior se refleja en el comportamiento de la energía total E, ya que es una propiedad característica de cualquier potencial de la forma $V(r) \propto 1/r$ que la energía total de una partícula con este potencial es igual a la mitad de su energía potencial promedio.

Finalmente, fijemos la atención en un punto que posteriormente será de considerable importancia. Un análisis de las funciones propias (10–39) nos indica que para valores pequeños de r respecto a a_0/Z (donde la exponencial varía lentamente), la dependencia radial de las funciones propias está dada por

$$\psi_{nlm} \propto r^l, \qquad r \to 0 \tag{10–45}$$

De este modo, la dependencia radial de la densidad de probabilidad, para r pequeña, es

$$\psi^*_{nlm}\psi_{nlm} \propto r^{2l}, \qquad r \to 0 \tag{10–45'}$$

En consecuencia, el valor de $\psi^*_{nlm}\psi_{nlm}$ en un elemento de volumen próximo a $r = 0$ será relativamente grande sólo para $l = 0$ y decrecerá muy rápidamente al aumentar l.

Considere nuevamente la densidad de probabilidad

$$\psi^*_{nlm}\psi_{nlm} = R^*_{nl} R_{nl} \Theta^*_{lm} \Theta_{lm} \Phi^*_m \Phi_m$$

Por la ecuación (10–21), tenemos

$$\Phi^*_m(\phi)\,\Phi_m(\phi) = e^{-im\phi} e^{im\phi} = 1$$

Entonces, la densidad de probabilidad es independiente de la coordenada ϕ. El comportamiento en tres dimensiones de $\psi^*_{nlm}\psi_{nlm}$ está completamente especificado por el producto de la cantidad $R^*_{nl}(r)R_{nl}(r) = P_{nl}(r)/r^2$ y la cantidad $\Theta^*_{lm}(\theta)\Theta_{lm}(\theta)$, que es un factor de modulación que depende de la dirección. En los diagramas polares de la figura 10–3 se representa la forma de $\Theta^*_{lm}(\theta)\Theta_{lm}(\theta)$. El origen del diagrama se encuentra en $r = 0$ (el núcleo), y el ángulo θ se mide a partir de la dirección de z. Para un ángulo θ, la distancia desde el origen a la curva es igual al valor de $\Theta^*_{lm}(\theta)\Theta_{lm}(\theta)$. Este diagrama representa la dependencia direccional completa de $\psi^*_{nlm}\psi_{nlm}$ al considerar la superficie que se genera en tres dimensiones al girar el diagrama en torno del eje z sobre un ángulo de 360° que corresponde a ϕ. Para θ y ϕ dados, la distancia desde el origen al punto de la superficie es igual a $\Theta^*_{lm}(\theta)\Theta_{lm}(\theta)$

www.FreeLibros.me

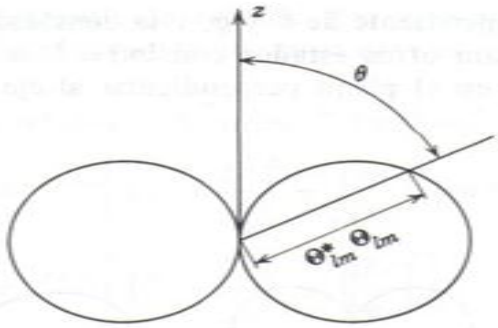

Figura 10-3. Un diagrama polar para el factor de modulación direccional de la densidad de probabilidad.

$\Phi^*_m(\phi)\Phi_m(\phi)$. En la figura 10–4 ilustramos un ejemplo típico de cómo depende la forma de la función $\Theta^*_{lm}(\theta)\Theta_{lm}(\theta)$ respecto al número cuántico m, mediante un conjunto de diagramas polares para $l = 3$ y los siete valores de m compatibles con este valor de l, esto es, $|m| = 0, \pm1, \pm2, \pm3$. Observe que la región donde está concentrada $\Theta^*_{lm}\Theta_{lm}$ (y, por ende, $\psi^*_{nlm}\psi_{nlm}$) se desplaza, a medida que aumenta m, desde el eje z a un plano perpendicular a éste. Es posible ilustrar algunas de las características importantes de la dependencia de $\Theta^*_{lm}(\theta)\Theta_{lm}(\theta)$ respecto al número cuántico l por una serie de diagramas polares con $|m| = l$, $l = 0, 1, 2, 3, 4$, como se ilustra en la figura 10–5. Para el estado propio con $n = 1$, $l = m = 0$, que corresponde al estado base del

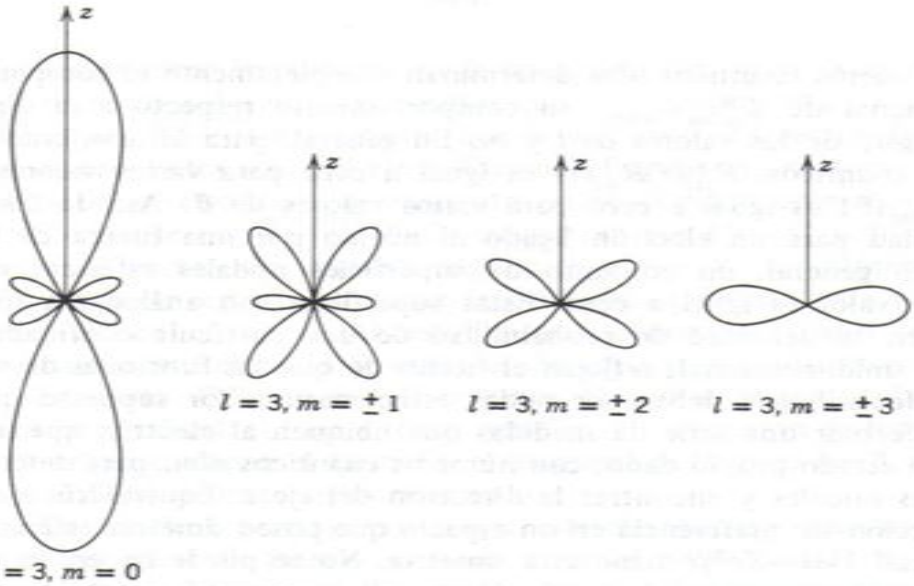

Figura 10-4. Diagramas polares para los factores de modulación direccional de la densidad de probabilidad para $l = 3$; $m = 0, \pm1, \pm2, \pm3$. Conforme a L. Pauling y E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1935.

www.FreeLibros.me

átomo, $\psi^*_{nlm}\psi^*_{nlm}$ es independiente de θ y ϕ, y la densidad de probabilidad es esféricamente simétrica. Para otros estados con $|m| = l$, la concentración de la densidad de probabilidad en el plano perpendicular al eje z se hace mayor a medida que l aumenta.

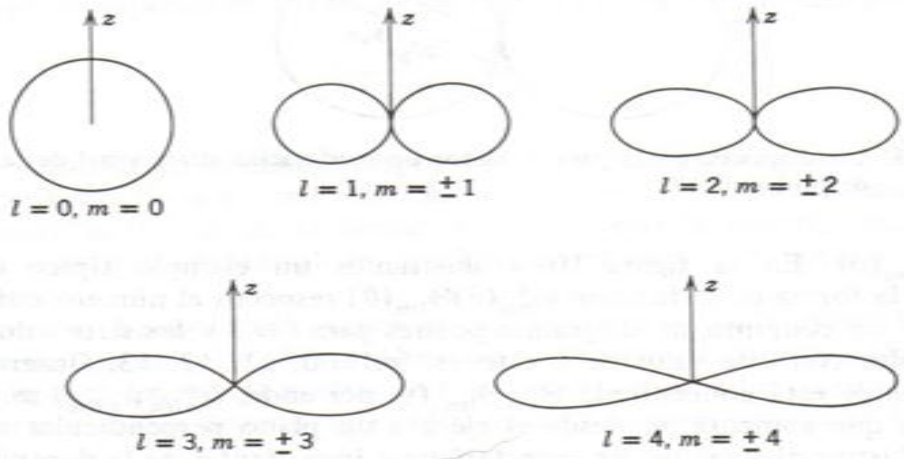

Figura 10-5. Diagramas polares para los factores de modulación direccional de la densidad de probabilidad para $l = 0, 1, 2, 3, 4$; $|m| = \pm l$. Conforme a L. Pauling y E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1935.

Los números cuánticos nlm determinan completamente el comportamiento tridimensional de $\psi^*_{nlm}\psi_{nlm}$; su comportamiento respecto a la dirección z depende sólo de los valores de l y m. En general, para un conjunto dado de números cuánticos, $R^*_{nl}(r)R_{nl}(r)$ es igual a cero para varios valores de r, y $\Theta^*_{lm}(\theta)\Theta_{lm}(\theta)$ es igual a cero para varios valores de θ. Así, la densidad de probabilidad para un electrón ligado al núcleo por una fuerza de Coulomb tendrá, en general, un conjunto de superficies nodales esféricas y cónicas donde su valor es igual a cero. Estas superficies son análogas a los puntos nodales en la densidad de probabilidad de una partícula confinada por un potencial unidimensional, reflejan el hecho de que las funciones de onda para una partícula ligada deben ser ondas estacionarias. Por supuesto que no es posible efectuar una serie de medidas que ubiquen al electrón que se encuentra en un estado propio dado, con números cuánticos nlm, para determinar las superficies nodales y encontrar la dirección del eje z. Equivaldría a establecer una dirección de preferencia en un espacio que posee simetría esférica, ya que el potencial $V = -Ze^2/r$ tiene esta simetría. No se puede hacer, ya que todo estado propio, excepto el $n = 1$, $l = m = 0$, que tiene simetría esférica, se encuentra degenerado con los otros estados propios que corresponden al mismo valor de n y, por consiguiente, no se pueden investigar por separado. Lo más que se puede medir experimentalmente es la densidad de probabilidad

www.FreeLibros.me

promedio para el conjunto de estados. Por ejemplo, sería posible medir la densidad de probabilidad para átomos cuya energía es E_2 y se obtendría

$$\tfrac{1}{4}[\psi^*_{200}\psi_{200} + \psi^*_{21-1}\psi_{21-1} + \psi^*_{210}\psi_{210} + \psi^*_{211}\psi_{211}]$$

$$= \frac{1}{128\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 e^{-Zr/a_0}\left[\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)^2 + \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2(\tfrac{1}{2}\operatorname{sen}^2\theta + \tfrac{1}{2}\operatorname{sen}^2\theta + \cos^2\theta)\right]$$

$$= \frac{1}{128\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 e^{-Zr/a_0}\left[\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)^2 + \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] \tag{10–46}$$

Esta es una distribución con simetría esférica, que no se puede emplear para determinar la dirección del eje z. Así, esta dirección se elegirá arbitrariamente. Por el contrario, considere una situación en donde la orientación del eje z no es arbitraria, ya que un campo magnético o eléctrico externo aplicado sobre el átomo establece una dirección preferente en el espacio. En esta situación, como veremos más adelante, no se presenta degeneración en los estados propios, y se pueden efectuar medidas de la densidad de probabilidad para el electrón en un estado propio particular. Estas medidas se podrían emplear para determinar la dirección del campo externo.

Dentro de poco mostraremos que los números cuánticos l y m están relacionados también con el módulo del impulso angular orbital L del electrón y con su componente z, L_z, por las ecuaciones

$$\begin{aligned} L &= \sqrt{l(l+1)}\,\hbar \\ L_z &= m\hbar \end{aligned} \tag{10–47}$$

Esto nos da una clave importante en la interpretación de la dependencia de $\psi^*_{nlm}\psi_{nlm}$ respecto a l y m. Supongamos que $m = l$, entonces $L_z = l\hbar$, que es casi igual a $L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$, de modo que la dirección del vector de impulso orbital casi se encuentra sobre el eje z. Esto significaría, en un átomo de Bohr, que la órbita del electrón casi se encuentra sobre el plano normal al eje z. Al aumentar el valor de l, $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar \to l\hbar$ de manera que $L_z \to L$, y disminuye el ángulo entre el vector de impulso angular y el eje z. En términos de la descripción de Bohr, esto implica que la órbita se aproxima cada vez más al plano perpendicular al eje z. Al estudiar los diagramas polares se verá la correspondencia entre estas características de $\psi^*_{nlm}\psi_{nlm}$ y la descripción de Bohr para la órbita. Cuando $m = 0$ tenemos $L_z = 0$ y el vector de impulso angular será perpendicular al eje z. Esto significa, en un átomo de Bohr, que el plano de la órbita contiene el eje z. En el diagrama polar para $l = 3$, $m = 0$, se reconoce un indicio de este comportamiento.

Aunque en muchos puntos existe una estrecha correspondencia entre la teoría cuántica para el átomo con un electrón y la teoría de Bohr, se presentan notables diferencias. En ambas teorías le corresponde $n = 1$ al estado base. Pero mientras que en la teoría de Bohr el impulso orbital es $L = n\hbar = \hbar$ en la teoría cuántica $L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar = 0$, puesto que $l = 0$ cuando $n = 1$. Un número grande de pruebas experimentales muestran que la predic-

www.FreeLibros.me

ción cuántica es la correcta. Sería muy difícil modificar la teoría de Bohr para incluir los estados con impulso angular igual a cero ya que, para ellos, el electrón oscilaría radialmente pasando por el núcleo. Por el contrario, en la mecánica cuántica no surge este problema, ya que de acuerdo con ella el electrón no se mueve en una órbita bien definida.

6. Los operadores de impulso angular

En las secciones siguientes discutiremos el impulso angular orbital de los estados propios del átomo con un electrón. Comenzaremos simplemente calculando el valor esperado para esta cantidad, aunque veremos que es posible evaluarlo con una precisión mayor. En el transcurso de esta discusión obtendremos una visión nueva y más amplia de las características generales de la teoría de la mecánica cuántica.

En la mecánica clásica, el impulso angular de una partícula, respecto al origen de algún sistema de coordenadas, es un vector **L** igual a

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \tag{10–48}$$

donde **r** es el vector de posición de la partícula respecto al origen y el vector **p** su impulso lineal. En la figura 10–6 se indican estos vectores. El "producto vectorial" $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ se define como el vector **L** perpendicular al plano definido por los vectores **r** y **p**; su dirección es tal que **r**, **p** y **L** tengan la misma orientación relativa que los ejes x, y, z de un sistema derecho de coordenadas; el módulo de **L** es igual a

$$L = rp \operatorname{sen} \theta \tag{10–49}$$

donde r y p son, respectivamente, los módulos de los vectores **r** y **p**; θ es el ángulo que forman estos vectores. A partir de la definición para $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ se puede mostrar que las tres componentes rectangulares de **L** son

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y \\ L_y &= zp_x - xp_z \\ L_z &= xp_y - yp_x \end{aligned} \tag{10–50}$$

donde x, y, z son las componentes de **r** y p_x, p_y, p_z las componentes de **p**.

Para discutir el operador asociado con el impulso angular en la mecánica cuántica, reemplazamos p_x, p_y, p_z por sus operadores cuánticos $-i\hbar\,\partial/\partial x$, $-i\hbar\,\partial/\partial y$, $-i\hbar\,\partial/\partial z$ (vea 7–77). Así, los operadores para las tres componentes del impulso angular son

$$\begin{aligned} L_{x_{op}} &= -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ L_{y_{op}} &= -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ L_{z_{op}} &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \end{aligned} \tag{10–51}$$

www.FreeLibros.me

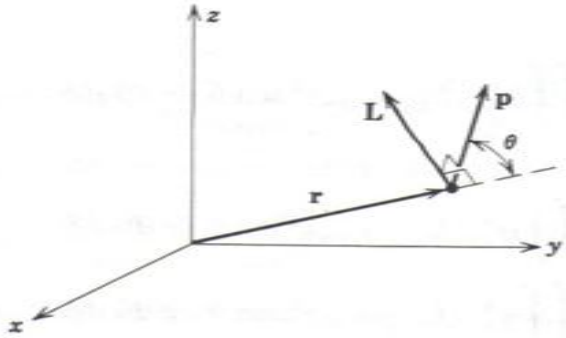

Figura 10-6. La posición y los impulsos lineales y angulares de una partícula en movimiento.

Es deseable transformar estas expresiones a las coordenadas esféricas r, θ, ϕ. Se encuentra que

$$L_{x_{op}} = i\hbar\left(\operatorname{sen}\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$L_{y_{op}} = i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\operatorname{sen}\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{10–52}$$

$$L_{z_{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

Nos interesa también conocer el cuadrado del módulo de **L**, o sea,

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \tag{10–53}$$

En coordenadas esféricas, el operador asociado es

$$L^2_{op} = -\hbar^2\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{d\phi^2}\right] \tag{10–54}$$

Calculemos los valores esperados para las componentes de **L** y del cuadrado de su módulo, para un electrón que se encuentra en el estado propio nlm en un átomo con un electrón.* Conforme a la ecuación (7–80), generalizada a tres dimensiones, los valores esperados son

$$\overline{L_x} = \iiint \Psi^* L_{x_{op}} \Psi r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

$$= \iiint e^{iE_n t/\hbar}\psi^*_{nlm} L_{x_{op}} e^{-iE_n t/\hbar}\psi_{nlm} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

* En rigor, calcularemos las componentes y el cuadrado de la magnitud de un vector **L** que es la suma de los impulsos angulares orbitales del electrón y del núcleo, respecto al centro de masa del átomo. Esto es cierto ya que las funciones propias ψ_{nlm} describen, en realidad, un electrón de masa μ que se mueve alrededor de un núcleo fijo, de manera que el impulso angular orbital del electrón con masa reducida es igual al impulso angular orbital del átomo. Véase la sección 2.

www.FreeLibros.me

Así,

$$\overline{L_x} = \iiint \psi^*_{nlm} L_{x_{op}} \psi_{nlm} r^2 \operatorname{sen}\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

Igualmente,

$$\overline{L_y} = \iiint \psi^*_{nlm} L_{y_{op}} \psi_{nlm} r^2 \operatorname{sen}\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

$$\overline{L_z} = \iiint \psi^*_{nlm} L_{z_{op}} \psi_{nlm} r^2 \operatorname{sen}\theta \, dr \, d\theta \, d\phi \qquad (10\text{–}55)$$

$$\overline{L^2} = \iiint \psi^*_{nlm} L^2_{op} \psi_{nlm} r^2 \operatorname{sen}\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

donde las integrales se extienden a todo el intervalo de variación de las variables. Para calcular estas integrales, debemos evaluar previamente

$$L_{x_{op}}\psi_{nlm}, \quad L_{y_{op}}\psi_{nlm}, \quad L_{z_{op}}\psi_{nlm}, \quad L^2_{op}\psi_{nlm}$$

Encontraremos que las dos últimas conducen a resultados interesantes. Considere la cantidad

$$L_{z_{op}}\psi_{nlm} = -i\hbar \frac{\partial \psi_{nlm}}{\partial \phi}$$

Ya que

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\, \Theta_{lm}(\theta)\, \Phi_m(\phi)$$

obtenemos

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_{nlm}}{\partial \phi} = R_{nl}(r)\, \Theta_{lm}(\theta) \left[-i\hbar \frac{d\Phi_m(\phi)}{d\phi} \right]$$

Conforme la ecuación (10–21)

$$\Phi_m(\phi) = e^{im\phi}$$

se tiene que

$$\frac{d\Phi_m(\phi)}{d\phi} = ime^{im\phi} = im\Phi_m(\phi)$$

En esta forma,

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_{nlm}}{\partial \phi} = R_{nl}(r)\, \Theta_{lm}(\theta)[-i\hbar im\Phi_m(\phi)]$$
$$= m\hbar R_{nl}(r)\, \Theta_{lm}(\theta)\, \Phi_m(\phi)$$

y

$$L_{z_{op}}\psi_{nlm} = m\hbar\psi_{nlm} \qquad (10\text{–}56)$$

Calcule a continuación

$$L^2_{op}\psi_{nlm} = R_{nl}(r)(-\hbar^2)\left[\frac{\Phi_m(\phi)}{\operatorname{sen}\theta} \frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta \frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{\Theta_{lm}(\theta)}{\operatorname{sen}^2\theta} \frac{d^2\Phi_m(\phi)}{d\phi^2} \right]$$

Derivando la ecuación (10–21) respecto a ϕ, se tiene

$$\frac{d^2\Phi_m(\phi)}{d\phi^2} = -m^2\Phi_m(\phi)$$

www.FreeLibros.me

de manera que

$$L^2_{\text{op}}\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\,\Phi_m(\phi)(-\hbar^2)\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\,\frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta}\right) - \frac{m^2}{\operatorname{sen}^2\theta}\,\Theta_{lm}(\theta)\right]$$

Ahora bien, $\Theta_{lm}(\theta)$ es solución a la ecuación (10–18), o sea,

$$\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\,\frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta}\right) - \frac{m^2}{\operatorname{sen}^2\theta}\,\Theta_{lm}(\theta) = -l(l+1)\Theta_{lm}(\theta)$$

donde hemos substituido el valor de α dado por (10–24). Así,

$$\begin{aligned} L^2_{\text{op}}\psi_{nlm} &= R_{nl}(r)\,\Phi_m(\phi)(-\hbar^2)[-l(l+1)\Theta_{lm}(\theta)] \\ &= l(l+1)\hbar^2 R_{nl}(r)\,\Theta_{lm}(\theta)\,\Phi_m(\phi) \end{aligned}$$

de modo que

$$L^2_{\text{op}}\psi_{nlm} = l(l+1)\hbar^2\psi_{nlm} \tag{10–57}$$

En la ecuación (10–56) vemos que $L_{z_{\text{op}}}\psi_{nlm}$ es igual a $m\hbar\psi_{nlm}$. Entonces, el resultado de operar sobre la función propia de un electrón ψ_{nlm} con el operador $L_{z_{\text{op}}}$ es equivalente a multiplicarla por la constante $m\hbar$. De manera semejante, la ecuación (10–57) muestra que el resultado de operar sobre la función propia de un electrón ψ_{nlm} con el operador L^2_{op} es equivalente a multiplicarla por la constante $l(l+1)\hbar^2$. Estos resultados no es un comportamiento típico de los operadores diferenciales: si aplicamos el operador d/dx a la función $f(x) = x^2$, obtenemos la función $f'(x) = 2x$, que es distinta a la anterior. Como el lector puede verificar, se tienen otros ejemplos de lo anterior al aplicar los operadores $L_{x_{\text{op}}}$ o $L_{y_{\text{op}}}$ sobre ψ_{nlm}; encontrará que en las funciones resultantes las variables r, θ, ϕ intervienen en una forma distinta a la que intervienen en la función ψ_{nlm}. Esto es,

$$\begin{aligned} L_{x_{\text{op}}}\psi_{nlm} &\neq (\text{constante})\psi_{nlm} \\ L_{y_{\text{op}}}\psi_{nlm} &\neq (\text{constante})\psi_{nlm} \end{aligned} \tag{10–58}$$

Empleando las ecuaciones (10–56) y (10–57), se pueden evaluar trivialmente $\overline{L_z}$ y $\overline{L^2}$ a partir de (10–55):

$$\begin{aligned} \overline{L_z} &= \iiint \psi^*_{nlm} L_{z_{\text{op}}}\psi_{nlm} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi \\ \overline{L_z} &= m\hbar \iiint \psi^*_{nlm}\psi_{nlm} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi \\ \overline{L_z} &= m\hbar \end{aligned} \tag{10–59}$$

y

$$\begin{aligned} \overline{L^2} &= \iiint \psi^*_{nlm} L^2_{\text{op}}\psi_{nlm} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi \\ \overline{L^2} &= l(l+1)\hbar^2 \iiint \psi^*_{nlm}\psi_{nlm} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi \\ \overline{L^2} &= l(l+1)\hbar^2 \end{aligned} \tag{10–60}$$

www.FreeLibros.me

donde hemos empleado la condición de normalización (10–41). Comparemos estos resultados con las relaciones (10–47), enunciadas en la sección anterior sin demostración previa

$$L_z = m\hbar \tag{10–61}$$

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2 \tag{10–62}$$

Es claro que las ecuaciones (10–59) y (10–60) son consistentes con (10–61) y (10–62), aunque no prueban su validez, puesto que la afirmación contenida en las últimas sobre los valores de L_z y L^2, para el estado propio nlm, es mucho más fuerte que la hecha por las primeras. Para completar la prueba de la validez de las ecuaciones (10–61) y (10–62), haremos una pequeña digresión sobre las características generales de la mecánica cuántica.

7. Ecuaciones de valores propios

Considere una partícula que se mueve en una dimensión; su potencial no depende del tiempo. Sea f alguna cantidad dinámica que describa el movimiento de la partícula. Entonces, el valor promedio de f, obtenido en una serie de medidas efectuadas cuando el estado de movimiento de la partícula está dado por la función de onda Ψ, es el valor esperado $\bar{f}$. Conforme a la ecuación (7–80),

$$\bar{f} = \int \Psi^* f_{op} \Psi \, dx$$

donde la integral se extiende sobre todos los valores de la variable. La cantidad $\bar{f}$ especifica sólo parcialmente al comportamiento de f. Obtenemos una mejor especificación al conocer las *fluctuaciones* de f, $\overline{(\Delta f)^2}$, que es el valor esperado para el cuadrado de la diferencia entre el resultado f de una medida particular y el promedio $\bar{f}$ de todas las medidas, o sea,

$$\overline{\Delta f^2} \equiv \overline{(f - \bar{f})^2} \tag{10–63}$$

Es claro que $\overline{(\Delta f)^2}$ contiene la información relativa a las fluctuaciones de f. Por ejemplo, suponga que f sólo puede tener un valor (por ejemplo, la energía total de una partícula que se encuentra en un estado propio); se observará, entonces, que f tendrá exactamente el valor $\bar{f}$, y $\overline{(f - \bar{f})^2}$ será igual a cero. Sin embargo, al fluctuar el valor de f alrededor de $\bar{f}$, $\overline{(f - \bar{f})^2}$ será mayor que cero. Para evaluar $\overline{(\Delta f)^2}$ aplicamos la ecuación (7–80) a (10–63):

$$\overline{\Delta f^2} = \int \Psi^* [(f - \bar{f})^2]_{op} \Psi \, dx$$

www.FreeLibros.me

Ya que $\bar{f}$ es constante, el operador $[(f-\bar{f})^2]_{op}$ es, simplemente, $(f_{op}-\bar{f})^2$, por lo que se debe tener

$$\overline{\Delta f^2} = \int \Psi^*(f_{op}-\bar{f})^2\Psi\, dx$$

$$= \int \Psi^*(f_{op}^2 - 2f_{op}\bar{f} + \bar{f}^2)\Psi\, dx$$

$$= \int \Psi^* f_{op}^2 \Psi\, dx - 2\bar{f}\int \Psi^* f_{op}\Psi\, dx + \bar{f}^2 \int \Psi^*\Psi\, dx$$

Empleando la ecuación (7–80) en los dos primeros términos del miembro derecho y la condición de normalización en el tercero, obtenemos

$$\overline{\Delta f^2} = \overline{f^2} - 2\bar{f}\bar{f} + \bar{f}^2$$

o sea

$$\overline{\Delta f^2} = \overline{f^2} - \bar{f}^2 \tag{10–64}$$

Así, la cantidad $(\overline{\Delta f})^2$ es igual a la diferencia entre el valor esperado para el cuadrado de f y el cuadrado del valor esperado para f.

Supongamos que la partícula se encuentra en algún estado propio cuya función propia es

$$\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar}\,\psi(x)$$

Tenemos, entonces

$$\bar{f} = \int e^{iEt/\hbar}\psi^* f_{op} e^{-iEt/\hbar}\psi\, dx$$

Conforme a la ecuación (7–80), f_{op} nunca contiene derivadas respecto al tiempo, de modo que $f_{op}\, e^{-iEt/\hbar} = e^{-iEt/\hbar} f_{op}$, de manera que

$$\bar{f} = \int e^{iEt/\hbar} e^{-iEt/\hbar}\psi^* f_{op}\psi\, dx$$

o sea

$$\bar{f} = \int \psi^* f_{op}\psi\, dx \tag{10–65}$$

Análogamente podemos mostrar que

$$\overline{f^2} = \int \psi^* f_{op}^2 \psi\, dx \tag{10–66}$$

cuando la partícula se encuentra en un estado propio.

A partir de estas ecuaciones puede evaluarse $(\overline{\Delta f})^2$ para una cantidad dinámica f y una función propia ψ dadas. En general, se encuentra que $(\overline{\Delta f})^2 > 0$, aunque, como se mencionó anteriormente, se pueden presentar

www.FreeLibros.me

situaciones donde $\overline{(\Delta f)^2} = 0$. Veremos que esto sucede cuando la relación entre la cantidad dinámica f y la función propia ψ es tal que

$$f_{\text{op}}\psi = F\psi \tag{10–67}$$

donde F es una constante. En tal caso la ecuación (10–65) toma la forma

$$\bar{f} = \int \psi^* f_{\text{op}} \psi \, dx = \int \psi^* F \psi \, dx = F \int \psi^* \psi \, dx = F$$

de manera que

$$\bar{f}^2 = F^2$$

Para la ecuación (10–66) tenemos

$$\overline{f^2} = \int \psi^* f_{\text{op}}^2 \psi \, dx = \int \psi^* f_{\text{op}} f_{\text{op}} \psi \, dx$$

$$= \int \psi^* f_{\text{op}} F \psi \, dx = F \int \psi^* f_{\text{op}} \psi \, dx = FF$$

de modo que

$$\overline{f^2} = F^2$$

A partir de la ecuación (10–64) encontramos

$$\overline{\Delta f^2} = \overline{f^2} - \bar{f}^2 = F^2 - F^2 = 0 \tag{10–68}$$

Entonces, cuando la relación (10–67) es válida, $\overline{(\Delta f)^2}$, que es una medida de las fluctuaciones de la cantidad dinámica f, es igual a cero. En cualquier caso normal basta probar que f sólo puede tener el valor $f = \bar{f} = F$. En casos excepcionales, no basta que la ecuación (10–68) se cumpla para probar la validez de esta proposición; también es necesario mostrar que

$$\overline{f^k} - \bar{f}^k = 0, \qquad \text{para todo entero} \tag{10–69}$$

Sin embargo, puede verse fácilmente que si la ecuación (10–67) se satisface, los pasos que preceden a (10–68) pueden repetirse k veces para mostrar que también se satisface el requisito (10–69). Concluimos, entonces, que *cuando la relación entre f y ψ es*

$$f_{\text{op}}\psi = F\psi \tag{10–70}$$

la cantidad dinámica f sólo puede tener el valor definido, preciso

$$f = F \tag{10–70'}$$

Una ecuación de la forma (10–70) recibe en la literatura matemática el nombre de *ecuación de valor propio*, la función ψ el de *función propia del operador* f_{op} y la constante F el de *valor propio del operador*. Hemos empleado ya gran parte de esta terminología en relación con una ecuación

www.FreeLibros.me

particular de valor propio. Considere la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (10–8), escrita en la forma

$$\left\{\sum_{j=1}^{N} -\frac{\hbar^2}{2m_j}\nabla_j^2 + V\right\}\psi = E\psi$$

Al comparar lo que está entre las llaves con la definición clásica de la energía total del sistema (10–1), observamos que esta ecuación se puede escribir como

$$e_{\text{op}}\psi = E\psi \tag{10–71}$$

donde E es una constante igual a la energía total del sistema, y el operador de energía total e_{op} se obtiene a partir de la cantidad dinámica correspondiente reemplazando p_{x_j} por $-i\hbar\,\partial/\partial x_j$, etc. Este operador recibe frecuentemente el nombre de operador de Hamilton. Para una partícula que se mueve en una dimensión es, simplemente,

$$e_{\text{op}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V$$

En el estudio de la ecuación de valor propio particular (10–71), hemos aprendido mucho sobre las propiedades matemáticas que son comunes a esas ecuaciones. Por ejemplo, si la función ψ y su derivada satisfacen las condiciones de ser continuas, finitas y uniformes, sabemos que (10–71) tendrá soluciones sólo para ciertos valores propios $E_1, E_2, \ldots, E_n, \ldots$ que corresponden a las funciones propias $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n, \ldots$. Lo mismo es cierto de la ecuación general de valor propio (10–70). Al interpretar el significado de la ecuación (10–71, concluimos que el conjunto de valores propios lo formaban sólo aquellos valores que son físicamente aceptables para la cantidad dinámica, cuyo operador correspondiente aparece en la ecuación. (Esto es, los valores permitidos para la energía total son los valores propios $E_1, E_2, \ldots$.) Al extender lo anterior a la ecuación general de valor propio, obtenemos lo que en tratados avanzados del tema recibe el nombre de *postulado fundamental de la teoría de la mecánica cuántica:*

Una medida del valor de la cantidad dinámica f sólo puede resultar igual a alguno de los valores propios E_n del operador correspondiente f_{op} donde este operador se obtiene a partir de f al reemplazar p_x por $-i\hbar\,\partial/\partial x$, etc., y la relación entre F_n y f_{op} es

$$f_{\text{op}}\psi_n = F_n\psi_n$$

donde la función propia ψ_n y su derivada son continuas, finitas y uniformes.

Este postulado, junto con los que proporcionan la interpretación física de las funciones propias, resumen toda la teoría de la mecánica cuántica para los fenómenos independientes del tiempo. La teoría incluirá los fenómenos dependientes del tiempo al introducir el operador $i\hbar\,\partial/\partial t$.

www.FreeLibros.me

Ilustraremos la teoría expuesta en esta sección mediante algunos ejemplos simples. Considere, primero, la función propia de onda viajera

$$\psi = e^{iKx} \tag{10–72}$$

Sabemos que es una función propia de e_{op}, ya que es solución de (10–71) para $V = 0$, con el valor $E = \hbar^2K^2/2m$. Asimismo, (10–72) es una función propia del operador de impulso $p_{op} = -i\hbar\,\partial/\partial x$ puesto que

$$p_{op}\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}e^{iKx} = -i\hbar iKe^{iKx} = \hbar K\psi$$

o sea

$$p_{op}\psi = P\psi$$

donde el valor propio es $P = \hbar K$. Observamos que esta función es, simultáneamente, una función propia de dos operadores. Así, conforme a la ecuación (10–70′), una partícula cuyo movimiento está descrito por esta función, debe tener un valor definido para la energía total $E = \hbar^2K^2/2m$, y un valor definido para el impulso $P = \hbar K$. De modo semejante, se puede mostrar que la función propia de onda viajera $\psi = e^{-iKx}$ es una función propia de e_{op}, con el valor propio $E = \hbar^2K^2/2m$, y también una función propia de p_{op}, con el valor propio $P = -\hbar K$. En consecuencia, una partícula cuyo movimiento está descrito por la función propia $\psi = e^{-iKx}$, tiene una energía bien definida $E = \hbar^2K^2/2m$ y un impulso bien definido $P = -\hbar K$

Considere, a continuación, la función propia de onda estacionaria

$$\psi = \operatorname{sen} Kx \tag{10–73}$$

Sabemos que también es una función propia de e_{op} con el valor propio $E = \hbar^2K^2/2m$. Sin embargo, no es una función propia de p_{op} ya que

$$p_{op}\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\operatorname{sen} Kx = -i\hbar K\cos Kx \neq (\text{constante})\psi$$

Aunque la energía de una partícula cuyo movimiento está descrito por esta función tiene un valor definido $E = \hbar^2K^2/2m$, su impulso no lo tiene. De acuerdo con el postulado enunciado anteriormente, una medida del impulso de la partícula sólo puede resultar igual a alguno de los valores propios del operador de impulso. Para un valor dado de K existen dos valores propios para p_{op}, que son $P = \hbar K$ y $P = -\hbar K$. Una medida del impulso de la partícula coincidirá con alguno de estos valores; cada uno de estos valores se presentará con igual frecuencia en un número grande de medidas.* Es claro que estas características de las funciones propias de ondas estacionarias y viajeras coinciden con la interpretación enunciada en la primera sección del capítulo 8.

* Esto es consecuencia de que, para esta función propia, $\bar{p} = 0$, como el lector puede fácilmente verificar.

www.FreeLibros.me

8. Impulso angular de las funciones propias del átomo con un electrón

Volvamos a considerar las funciones ψ_{nlm} que surgen al tratar el problema del átomo con un electrón. Al ser soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este problema, son también necesariamente funciones propias del operador de energía total que, de acuerdo con (10–38), tiene los valores propios $E_n = \mu Z^2 e^4/2\hbar^2 n^2$. De las ecuaciones (10–56) y (10–57) observamos que también son funciones propias de los operadores para la componente z del impulso angular orbital $L_{z_{op}}$, y para el cuadrado L^2_{op}, con los valores propios $m\hbar$ y $l(l+1)\hbar^2$, respectivamente. Por el contrario, las ecuaciones (10–58) establecen que no son funciones propias de los operadores para las componentes x y y del impulso angular orbital. También se puede mostrar que no son funciones propias de ninguno de los operadores de impulso lineal. Por consiguiente, cuando un electrón se encuentra en un estado descrito por ψ_{nlm}, la energía tiene un valor definido E_n; la magnitud del impulso angular orbital tiene el valor definido

$$L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar \tag{10–74}$$

y su componente z el valor definido

$$L_z = m\hbar \tag{10–75}$$

aunque no poseen ningún valor definido las componentes x o y del impulso angular orbital ni las componentes del impulso lineal.

Es razonable que ψ_{nlm} no describa un estado que tenga un impulso lineal definido: cualquier imagen física del estado de movimiento de un electrón cuya magnitud del impulso angular y su componente z están definidas implica algún tipo de rotación, de manera que el impulso lineal no puede ser constante. Sin embargo, que ψ_{nlm} no describa un estado en el que las componentes x y y del impulso angular orbital tengan valores definidos, es un hecho un tanto misterioso puesto que, en la mecánica clásica, el vector de impulso angular de un sistema aislado que se mueve bajo el influjo de una fuerza cuyo potencial $V(r)$ tiene simetría esférica, está fijo en el espacio, y las tres componentes tendrían valores definidos, ya que sobre la partícula no actúan pares de fuerza. El resultado cuántico es una consecuencia de la relación de incertidumbre que existe entre dos componentes cualesquiera del impulso angular orbital. Puesto que su componente z tiene precisamente el valor $m\hbar$, la relación de incertidumbre implica que el valor de sus componentes x y y están totalmente indefinidas. Por otra parte, se encuentra que tanto $\overline{L_x}$ como $\overline{L_y}$, son iguales a cero. De este modo, la orientación del vector de impulso angular debe cambiar constantemente, de manera que sus componentes x y y fluctúen rápidamente alrededor del valor cero.

Muchas de las propiedades del impulso angular orbital se pueden representar adecuadamente en términos de diagramas vectoriales. Considere un conjunto de estados con el mismo valor del número cuántico l. Para cada uno de ellos, la longitud del vector de impulso angular orbital, en unidades de $\hbar$, es igual a $L/\hbar = \sqrt{l(l+1)}$. La componente z de este vector, en las mismas unidades, es igual a $L_z/\hbar = m$ que, de acuerdo con las ecuaciones (10–37),

www.FreeLibros.me

puede tomar cualquier valor entero entre $L_z/\hbar = -l$ a $L_z/\hbar = +l$. En la figura 10–7 se ilustra el caso para $l = 2$, donde se indican los vectores de impulso angular para los estados correspondientes a los cinco valores de m compatibles con el valor de l. Puesto que L_x y L_y deben fluctuar alrededor de sus valores promedio, que son iguales a cero, los vectores deben precesionar al azar sobre las superficies cónicas que rodean al eje z. Para los estados $m = \pm l$ se conoce la orientación espacial del vector de impulso con una precisión mayor: el vector se puede encontrar dondequiera sobre un cono cuyo semiángulo es $\cos^{-1}[l/\sqrt{l(l+1)}]$. En el límite clásico, $l \to \infty$, y este ángulo tiende a cero; el vector de impulso angular para estados con $m = \pm l$ está obligado a orientarse casi en la dirección del eje z. Así, se encuentra esencialmente fijo en el espacio, en concordancia con el comportamiento que predice la teoría clásica.

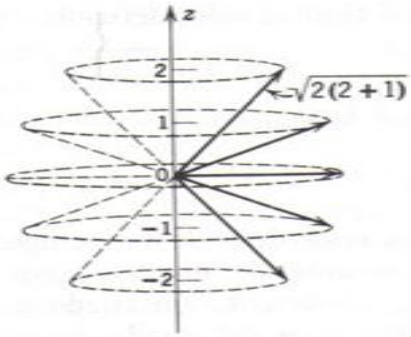

Figura 10-7. Ilustración de la precesión de los vectores de impulso angular alrededor del eje z en los cinco estados posibles para $l = 2$.

Puesto que $L_z = m\hbar$, con m entero, y que la dirección del eje z, se eligió arbitrariamente, la mecánica cuántica predice que la componente del vector de impulso angular *en cualquier dirección* es un múltiplo entero de $\hbar$. A esto se le conoce como *cuantización espacial*. Si el lector repasa la derivación de las ecuaciones de valores propios (10–56) y (10–57), verá claro que la cuantización espacial, y la de la magnitud del impulso angular orbital, de acuerdo con la regla $L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$, no sólo se presenta en el caso del potencial de Coulomb $V(r) = -Ze^2/r$, sino *en el de cualquier potencial que dependa exclusivamente de la coordenada radial r.*

BIBLIOGRAFIA

Leighton, R. B., *Principles of Modern Physics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1959.
Pauling, L., y E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1935.
Schiff, L. I., *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

www.FreeLibros.me

EJERCICIOS

1. Escriba una expresión para el vector de flujo de probabilidad para un sistema que contiene una partícula en tres dimensiones.

2. Separe (10–10) en una ecuación en las coordenadas x, y, z, del centro de masa del átomo, definidas por (10–11), y una ecuación en las coordenadas rectangulares X, Y, Z, del electrón respecto al núcleo definidas por $X = x_2 - x_1$, $Y = y_2 - y_1$, $Z = z_2 - z_1$.

3. Transforme la ecuación en X, Y, Z en una ecuación en r, θ, ϕ de (10–12), y, en consecuencia, verifique (10–15). *Nota:* consulte algún libro de texto sobre cálculo intermedio que explique el uso de los Jacobianos.

4. Resuelva la ecuación (10–23) por el método indicado en el párrafo que contiene esa ecuación.

5. Resuelva la ecuación (10–31) por el método indicado en el párrafo que contiene esa ecuación.

6. Una barra rígida de longitud R de masa despreciable tiene fijo uno de sus extremos, de manera que puede girar libremente; sobre el otro lleva una partícula de masa M. Adapte a este sistema la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (10–15), resuélvala y muestre que los valores propios son

$$E = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}, \qquad l = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

donde $I = MR^2$ es el momento de inercia con respecto a cualquier eje alrededor del cual pueda girar la barra. Observe que no existe una energía del punto cero, ya que las coordenadas puedan tomar todos los valores posibles. Compare estos resultados con los del ejercicio 3 del capítulo 5.

7. Encuentre las expresiones análogas a (10–46) para $n = 3$, y muestre que tiene simetría esférica.

8. Verifique las ecuaciones (10–50).

9. Mediante las ecuaciones obtenidas en el ejercicio 3, verifique las ecuaciones (10–52) y (10–54).

10. Calcule $\bar{p}$, $\overline{p^2}$, y $\overline{(\Delta p)^2}$ para la función propia $\psi = \operatorname{sen} Kx$. Comente los resultados obtenidos. *Nota:* normalice en una caja.

www.FreeLibros.me

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 11

Momentos magnéticos, spin y efectos relativistas

1. Momentos magnéticos orbitales

En la primera parte de este capítulo presentaremos algunos experimentos de los cuales se puede inferir la existencia de la cuantización espacial. En estos experimentos no se mide directamente la componente z del vector de *impulso angular orbital* $\mathbf{L}$, sino la componente z de $\boldsymbol{\mu}$, el vector de *momento magnético*, una cantidad estrechamente relacionada con aquél. Para iniciar la discusión, evaluaremos el momento angular magnético $\boldsymbol{\mu}_l$ de un electrón atómico, combinando la teoría electromagnética elemental, la teoría de Bohr y la mecánica cuántica. No se presentará un cálculo completamente en términos de la mecánica cuántica, ya que en este caso se precisa un conocimiento de la teoría electromagnética más avanzado de lo que se ha supuesto en este libro y también porque debido a la simplicidad conceptual que del átomo nos da la teoría de Bohr, es ventajoso emplear esta teoría al introducir algo nuevo. Por supuesto que la teoría de Bohr no siempre conduce a resultados cuantitativamente correctos, aunque sí en el caso presente.

Considere, entonces, un electrón con masa m y carga $-e$ que se mueve con velocidad v en una órbita circular de Bohr de radio r. Esta carga produce una corriente circular de magnitud

$$i = \frac{e}{c}\frac{1}{\tau} = \frac{e}{c}\frac{v}{2\pi r} \tag{11–1}$$

donde τ es el período orbital del electrón. De la teoría electromagnética elemental se sabe que esta corriente circular produce un campo magnético que, a grandes distancias, es idéntico al producido por un dipolo magnético ubicado en el centro del círculo y perpendicular a su plano. Para una corriente i que fluye en una circunferencia de área A, la magnitud del momento magnético equivalente es

$$\mu_l = iA \tag{11–2}$$

El momento magnético es una medida de la intensidad y orientación del dipolo magnético y está definido por

$$\boldsymbol{\mu}_l \equiv q\boldsymbol{\delta} \tag{11–3}$$

www.FreeLibros.me

donde q es la intensidad magnética de cada polo y $\boldsymbol{\delta}$ es un vector que va del polo negativo (sur) al polo positivo (norte). Para una corriente circular producida por una partícula cargada negativamente, la dirección de $\boldsymbol{\mu}_l$ es contraria a la del vector de impulso angular $\mathbf{L}$, cuya orientación y magnitud están dados por

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v} \tag{11-4}$$

La figura 11–1 ilustra estas cantidades. Al calcular i, a partir de la ecuación (11–1), y A para la órbita circular de Bohr, de (11–2) se encuentra que la magnitud del momento magnético es

$$\mu_l = \frac{e}{c}\frac{v}{2\pi r}\pi r^2 = \frac{evr}{2c} \tag{11-5}$$

Ya que para una órbita circular $\mathbf{r}$ y $\mathbf{v}$ son perpendiculares, la magnitud del impulso angular es, simplemente,

$$L = mrv \tag{11-6}$$

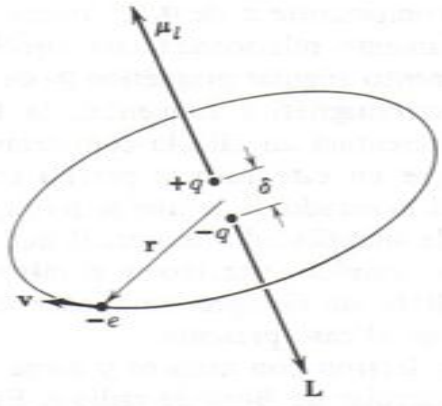

Figura 11-1. Las cantidades asociadas con un electrón que se mueve en una órbita circular de Bohr.

De estas ecuaciones observamos que la relación entre la magnitud del momento magnético y la del impulso angular es una constante

$$\frac{\mu_l}{L} = \frac{evr}{2cmrv} = \frac{e}{2mc} \tag{11-7}$$

Ordinariamente se expresa esta constante como $g_l\mu_B/\hbar$, donde

$$\mu_B = e\hbar/2mc = 0.927 \times 10^{-20} \text{ ergs/gauss} \tag{11-8}$$

y

$$g_l = 1 \tag{11-9}$$

www.FreeLibros.me

La cantidad μ_B define una unidad natural para los momentos magnéticos atómicos y recibe el nombre de *magnetón de Bohr* y g_l el de *factor g orbital*. A pesar de que éste es igual a la unidad en este caso, lo introducimos aquí porque no lo es en otros casos. En términos de estas cantidades podemos expresar la ecuación (11–7) como una ecuación vectorial que especifique tanto la magnitud de $\boldsymbol{\mu}_l$ como su orientación respecto a **L**:

$$\boldsymbol{\mu}_l = -\frac{g_l \mu_B}{\hbar}\mathbf{L} \tag{11–10}$$

El cociente entre μ_l y L no depende del tamaño de la órbita o de la frecuencia orbital. Puede mostrarse que μ_l/L es independiente del área de la órbita en el caso que sea elíptica. Aceptando que esta relación es independiente de los detalles de la órbita, se sugiere que su valor no dependerá de los detalles de la teoría mecánica que se empleó para evaluarla. Este es efectivamente el caso: al calcular μ_l con la mecánica cuántica (lo que no haremos aquí), y dividiéndolo entre la expresión cuántica $L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$, se encuentra que el cociente entre μ_l y L tiene un valor idéntico al encontrado con la teoría de Bohr. Si esto es así, el lector podrá aceptar que las expresiones cuánticas para la magnitud del vector de momento magnético y de su componente z son

$$\mu_l = \frac{g_l \mu_B}{\hbar} L = \frac{g_l \mu_B}{\hbar}\sqrt{l(l+1)}\,\hbar = g_l \mu_B \sqrt{l(l+1)} \tag{11–11}$$

y

$$\mu_{l_z} = -\frac{g_l \mu_B}{\hbar} L_z = -\frac{g_l \mu_B}{\hbar} m\hbar = -g_l \mu_B m \tag{11–12}$$

(El origen del signo menos se encuentra en el signo menos de la ecuación 11–10.)

2. Efectos de un campo magnético externo

Mediante la definición (11–3), calculemos las fuerzas que actúan sobre un sistema cuyo dipolo magnético es $\boldsymbol{\mu}_l$ colocado en un campo magnético externo **H** que es uniforme en la región del dipolo equivalente. Esta situación se ilustra en la figura 11–2. El campo produce sobre el polo positivo una fuerza de magnitud qH en la dirección de H, y sobre el negativo una fuerza de la misma magnitud y de sentido contrario. No existe una fuerza translacional neta, sino un par de fuerzas de magnitud

$$T = qH\frac{\delta}{2}\operatorname{sen}\theta + qH\frac{\delta}{2}\operatorname{sen}\theta = q\delta H \operatorname{sen}\theta = \mu_l H \operatorname{sen}\theta$$

donde θ es el ángulo entre $\boldsymbol{\mu}_l$ y **H**. El vector del par de fuerzas es perpendicular a $\boldsymbol{\mu}_l$ y **H**, y apunta en el sentido que tendería a alinear a $\boldsymbol{\mu}_l$ con **H**. Así, su magnitud y sentido quedan expresados por la ecuación

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\mu}_l \times \mathbf{H} \tag{11–13}$$

www.FreeLibros.me

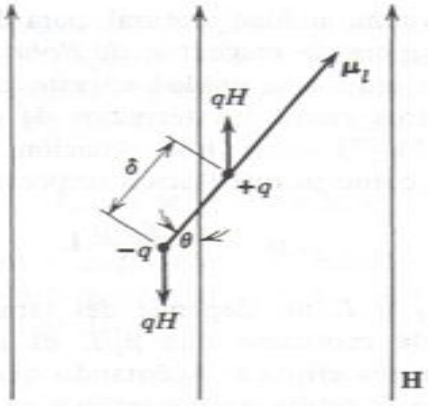

Figura 11-2. Un momento magnético en un campo magnético externo uniforme.

Cuando un sistema cuyo momento magnético es $\boldsymbol{\mu}_l$ se encuentra en un campo magnético externo **H**, tiene una energía potencial de orientación ΔE que depende del ángulo θ entre los dos vectores. Esta energía puede evaluarse sumando la energía potencial de cada uno de los polos del dipolo, si se conviene que en el centro del mismo la energía potencial es cero. Para un campo magnético uniforme en la región del dipolo se tiene:

$$\Delta E = -zqH - (-z)(-q)H = -2\frac{\delta}{2}\cos\theta\, qH = -\mu_l H\cos\theta \quad (11\text{–}14)$$

donde z es la coordenada del polo positivo y $-z$ la del polo negativo, medidas a lo largo de un eje paralelo al campo **H**. Lo anterior se escribe en la notación del producto escalar como

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu}_l \cdot \mathbf{H} \quad (11\text{–}15)$$

La ecuación (11–14) se puede tomar como una definición de esta notación. La energía potencial de orientación ΔE alcanza su valor mínimo cuando $\boldsymbol{\mu}_l$ y **H** están alineados. Sin embargo, a menos de que exista algún mecanismo disipativo, el vector $\boldsymbol{\mu}_l$ no puede seguir su tendencia natural de alinearse con el vector **H**, sino que tendrá una precesión alrededor de él, de modo que θ permanece constante y, por lo tanto, también ΔE.

Este movimiento de precesión se debe a que el par de fuerzas **T** es siempre perpendicular al vector de impulso angular **L** ya que, a partir de las ecuaciones (11–10) y (11–13), se tiene

$$\mathbf{T} = -\frac{g_l\mu_B}{\hbar}\mathbf{L}\times\mathbf{H}$$

Substituyendo esta relación en la ley de Newton del movimiento para el impulso angular,

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{T}$$

www.FreeLibros.me

se obtiene la ecuación de movimiento para el vector **L**:

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -\frac{g_l\mu_B}{\hbar}\mathbf{L} \times \mathbf{H} \tag{11–16}$$

De esta ecuación observamos que durante el tiempo dt el vector **L** varía

$$d\mathbf{L} = -\frac{g_l\mu_B}{\hbar}\mathbf{L} \times \mathbf{H}\, dt$$

En la figura 11–3 se ilustran estos vectores.* Puesto que $d\mathbf{L}$ es perpendicular a **L**, su magnitud L permanecerá constante. En el tiempo dt el extremo del vector **L** barre el ángulo

$$d\phi = \frac{dL}{L \operatorname{sen}\theta} = \frac{g_l\mu_B LH \operatorname{sen}\theta\, dt}{\hbar L \operatorname{sen}\theta} = \frac{g_l\mu_B H\, dt}{\hbar}$$

Así, tanto **L** como $\boldsymbol{\mu}_l$ tienen una precesión alrededor de **H** cuya frecuencia angular es

$$\omega_L = \frac{d\phi}{dt} = \frac{g_l\mu_B}{\hbar}H$$

Puesto que el sentido de la precesión es el de **H**, podemos escribir

$$\boldsymbol{\omega}_L = \frac{g_l\mu_B}{\hbar}\mathbf{H} \tag{11–17}$$

A este fenómeno se lo conoce con el nombre de *precesión de Larmor* y ω_L es la *frecuencia de Larmor*. Es bastante análoga a la precesión del impulso angular de un trompo en un campo gravitacional. De hecho, la ecuación (11–16) tiene forma idéntica a la ecuación en el caso del trompo.

Un experimento diseñado para medir la cuantización espacial del momento magnético debe ser capaz de medir μ_{l_z}, o alguna cantidad que esté relacionada con ella. La ecuación (11–15) sugiere colocar al átomo en un campo magnético orientado en la dirección del eje z y medir la energía potencial $\Delta E = -\boldsymbol{\mu}_l \cdot \mathbf{H} = -\mu_{l_z}H$ observando, por ejemplo, el efecto del campo magnético sobre el espectro óptico del átomo. En el capítulo 13 describiremos este experimento bajo el título de *efecto Zeeman*. En su lugar, consideraremos ahora una técnica distinta a ésta, que consiste en enviar un haz de átomos a través de un campo magnético que desvía a cada átomo en una cantidad que depende de μ_{l_z}.

Hemos visto que al actuar un campo magnético uniforme sobre el momento magnético no se origina una fuerza neta de translación. Si el campo magnético no es uniforme habrá, por el contrario, una fuerza neta de translación. Considere un campo magnético no uniforme, que no varía con y y simétrico respecto al plano yz.** Sobre el plano yz el campo tiene una componente que sólo apunta sobre el eje z. Suponga que el dipolo magnético que produce el

* Esta figura, que muestra la precesión de **L** alrededor de **H**, no debe confundirse con la figura 11–1, que muestra cómo un electrón circula en su órbita.

** En la figura 11–5 se muestra este campo.

www.FreeLibros.me

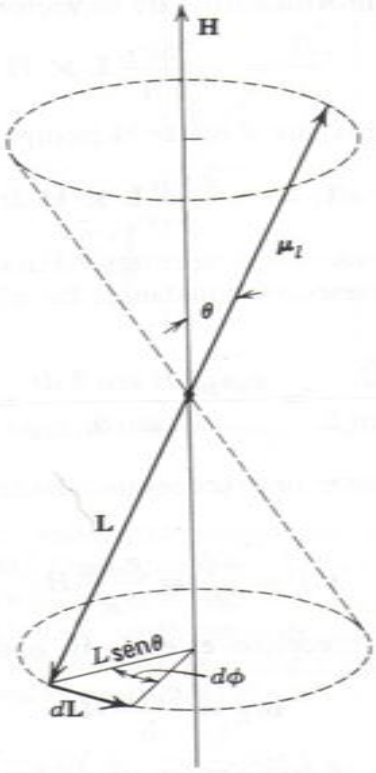

Figura 11-3. Ilustración de cómo un momento magnético tiene una precesión alrededor de un campo magnético externo.

momento magnético $\boldsymbol{\mu}_l$ atraviesa el plano yz, y forma un ángulo θ con el eje z, como se indica en la figura 11–4. En el centro del dipolo, la magnitud del campo es H_0 y está dirigido en la dirección z. El valor del campo en la posición de los polos positivo y negativo es, aproximadamente,

$$(H_z)_{+q} = H_0 + \frac{\partial H_z}{\partial x} x + \frac{\partial H_z}{\partial z} z$$

$$(H_z)_{-q} = H_0 + \frac{\partial H_z}{\partial x}(-x) + \frac{\partial H_z}{\partial z}(-z)$$

donde $x = (\delta/2)\,\text{sen}\,\theta$ y $z = (\delta/2)\cos\theta$. Así, la fuerza neta en la dirección z es

$$F_z = q(H_z)_{+q} - q(H_z)_{-q} = \frac{\partial H_z}{\partial x} q\delta\,\text{sen}\,\theta + \frac{\partial H_z}{\partial z} q\delta\cos\theta$$

o sea

$$F_z = \frac{\partial H_z}{\partial x}\mu_{l_z} + \frac{\partial H_z}{\partial z}\mu_{l_z}$$

www.FreeLibros.me

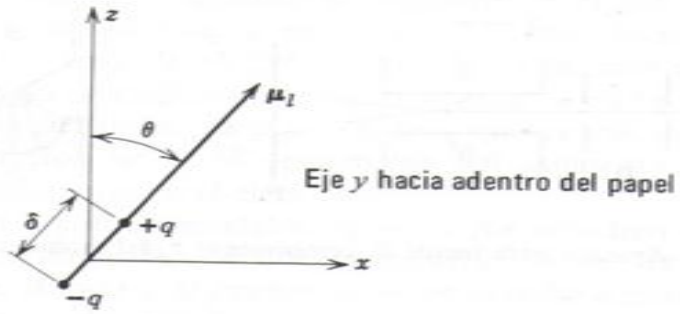

Figura 11-4. Un momento magnético en un campo magnético externo no uniforme.

Ya que $\boldsymbol{\mu}_l$ no permanece fijo en el espacio, debemos calcular el valor promedio de

$$\overline{F_z} = \frac{\partial H_z}{\partial x}\overline{\mu_{l_x}} + \frac{\partial H_z}{\partial z}\overline{\mu_{l_z}}$$

Clásicamente $\overline{\mu_{l_x}} = 0$ en virtud de la precesión de Larmor. En la mecánica cuántica $\overline{\mu_{l_x}} = -(g_l\mu_B/\hbar)\,\overline{L}_x = 0$ ya que $\overline{L}_x = 0$. En ambas teorías $\mu_{l_z} = \mu_{l_z}$, ya que tiene un valor fijo. En consecuencia

$$\overline{F_z} = \frac{\partial H_z}{\partial z}\mu_{l_z} \tag{11–18}$$

Un cálculo semejante muestra que el promedio de la componente x de la fuerza neta es $\overline{F}_x = (\partial H_x/\partial_z)\,\mu_{l_z}$, aunque se cancela, ya que $\partial H_x/\partial z = 0$ cerca del plano yz debido a la simetría del campo.

3. El experimento de Stern y Gerlach y el spin del electrón

Stern y Gerlach midieron en 1922 los valores posibles de μ_{l_z} para átomos de Ag enviando un haz de ellos a través de un campo magnético no uniforme. En la figura 11–5 se ilustra esquemáticamente un diagrama de su aparato. Al evaporar Ag en la estufa E se forma un haz de estos átomos, el cual se colima en los diafragmas D y entra bajo la acción del campo de un imán N-S. La vista lateral del imán muestra que se produce un campo del tipo descrito en la última sección. Puesto que los átomos son neutros, la única fuerza sobre ellos es la $\overline{F}_z$ dada por la ecuación (11–18).* La fuerza ejercida sobre cada átomo depende del valor correspondiente de μ_{l_z}, y el haz es analizado en componentes de acuerdo con los diferentes valores de μ_{l_z}. Los átomos que han sido desviados golpean una placa metálica P, donde se condensan y dejan una huella visible.

* No se puede llevar a cabo este experimento con átomos ionizados, ya que experimentarían una fuerza $F = Hev/c$ sobre la carga, que sería mucho mayor que la fuerza sobre el momento magnético.

www.FreeLibros.me

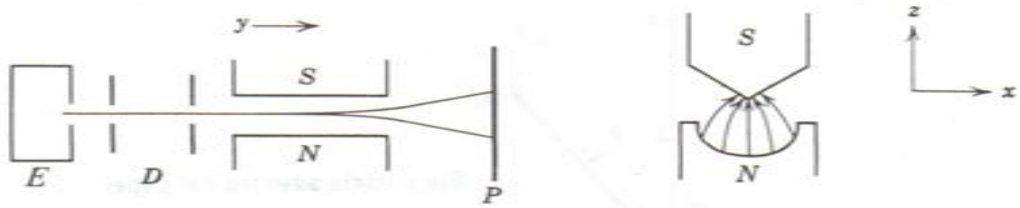

Figura 11-5. Aparato para medir la componente z del momento magnético de un átomo.

Conforme a la teoría clásica, μ_{l_z} puede tomar *cualquier* valor comprendido entre $-\mu_l$ y $+\mu_l$. La mecánica cuántica predice (ecuación 11–12) que μ_l sólo puede tomar los valores *discretos*,

$$\mu_{l_z} = -g_l \mu_B m \tag{11–19}$$

donde m es uno de los enteros

$$m = -l, -l + 1, \ldots, 0, \ldots, +l - 1, +l \tag{11–19'}$$

Así, la mecánica clásica predice que el haz se desviaría y formaría una banda continua, mientras que la mecánica cuántica predice que el haz se separa en varias componentes discretas y, además, que esto es independiente de la orientación del imán, o sea, para cualquier selección del eje z. Stern y Gerlach encontraron que el haz de átomos de Ag se separaba en dos componentes discretas: una componente combada en el sentido positivo del eje z y la otra en el sentido negativo. Se repitió el experimento para diferentes orientaciones del imán y para otros tipos de átomos y se encontró que el haz desviado se separaba invariablemente en dos o más componentes discretas. Cualitativamente estos resultados aportan *una prueba experimental directa de la existencia de la cuantización espacial.*

Sin embargo, no concuerdan cuantitativamente con la ecuación (11–19). Conforme a esta ecuación, el número de valores posibles para μ_{l_z} es igual al número de valores posibles de m, que es $(2l + 1)$. Y, puesto que l es entero, este número será non. También, para cualquier valor de l, uno de los valores posibles de m es cero. Así, el hecho de que el haz de átomos de Ag se separe en sólo dos componentes implica alguna falla de la teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica *o* que la teoría está incompleta.

No hay falla en la teoría sino que, hasta el momento, se encuentra incompleta. Esto lo muestra un experimento efectuado en 1927 por Phipps y Taylor, quienes emplearon la técnica de Stern y Gerlach con un haz de átomos de hidrógeno. Este experimento es particularmente significativo porque los átomos contienen sólo un electrón y la teoría que hemos desarrollado predice, sin ambigüedad, que si los átomos se encuentran en el estado base, el número cuántico l tendrá el valor cero. Así, el único valor posible para m es $m = 0$, y es de esperarse que el campo magnético no afectará al haz ya que μ_{l_z} será igual a cero. Phipps y Taylor encontraron que el haz se separaba en dos componentes desviadas simétricamente. Ciertamente que el átomo debe poseer algún momento magnético que hasta ahora no se ha considerado.

www.FreeLibros.me

Posiblemente, este momento magnético se originaría en el movimiento de giro del núcleo cargado alrededor de su propio eje. El orden de magnitud de este momento magnético sería de $e\hbar/2Mc$, donde M es la masa del protón. Pero el momento magnético medido experimentalmente (a partir del rompimiento o separación), es del orden de $\mu_B = e\hbar/2mc$, que es mil veces mayor. En consecuencia, el núcleo no es el responsable del momento magnético observado —su fuente debe estar en el electrón.—

Esto nos lleva a una hipótesis razonable, apoyada por otro tipo de pruebas que se discutirán posteriormente, de que *un electrón posee un momento magnético intrínseco* $\boldsymbol{\mu}_s$ *debido a la existencia de un impulso angular intrínseco* **S** *que recibe el nombre de spin.* Suponemos también que la magnitud S y la componente z, S_z, del impulso angular del spin están relacionados con los dos números cuánticos s y m por las ecuaciones

$$S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar \tag{11–20}$$

$$S_z = m_s\hbar \tag{11–21}$$

idénticas a las que se tienen para el impulso angular orbital. Asimismo, la relación entre el momento magnético y el impulso angular del spin es la misma que para el caso orbital. Esto es

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{g_s\mu_B}{\hbar}\mathbf{S} \tag{11–22}$$

$$\mu_{s_z} = -g_s\mu_B m_s \tag{11–23}$$

La cantidad g_s recibe el nombre de *factor g de spin.* Ahora bien, a partir de la observación experimental de que el haz de átomos de hidrógeno se rompe en dos componentes desviadas simétricamente, es claro que μ_{s_z} puede tomar precisamente dos valores de igual magnitud y de signo opuesto. Si suponemos finalmente que los valores posibles de m_s difieren en una unidad y que van de $-s$ a $+s$, como es el caso para los números cuánticos del impulso angular orbital, concluimos que los dos valores posibles para m_s son

$$m_s = -\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2} \tag{11–24}$$

y s sólo tiene un valor

$$s = \tfrac{1}{2} \tag{11–25}$$

Si se mide la separación del haz de átomos de hidrógeno es posible calcular la fuerza magnética F_z que experimentan los átomos de hidrógeno al pasar por el campo magnético. A partir de las ecuaciones (11–18) y (11–23), esta fuerza es

$$\overline{F_z} = -\frac{\partial H_z}{\partial z}\mu_B g_s m_s$$

Ya que se conoce μ_B y se puede medir $\partial H_z/\partial z$, la ecuación permite evaluar la cantidad $g_s m_s$. Dentro de la precisión experimental se encuentra que

$$g_s m_s = \pm 1$$

www.FreeLibros.me

Dado que $m_s = \pm\frac{1}{2}$, lo anterior implica que

$$g_s = 2 \tag{11-26}$$

Así, el factor g de spin para el electrón es el doble del valor del factor g en el caso orbital.* Asimismo, $\boldsymbol{\mu}_s$ y $\mathbf{S}$ son antiparalelos, como también lo son $\boldsymbol{\mu}_l$ y $\mathbf{L}$, ya que la orientación relativa de cualquier par de vectores depende exclusivamente de la carga negativa del electrón.

La introducción del spin en la mecánica cuántica exige la incorporación del número cuántico m_s al conjunto n, l, m para identificar completamente la forma matemática de una función propia. No es necesario, por otra parte, indicar específicamente el valor del número cuántico s ya que es siempre igual a $\frac{1}{2}$. Así, una función propia está especificada por cuatro subíndices y se escribe como

$$\psi_{nlm_lm_s} \tag{11-27}$$

en donde m_l substituye a m empleada anteriormente, con el objeto de tener una notación simétrica. Esa función propia contiene la información de que la componente z del spin es $+\frac{1}{2}\hbar$ cuando $m_s = +\frac{1}{2}$, y es $-\frac{1}{2}\hbar$ cuando $m_s = -\frac{1}{2}$. Las funciones $\psi_{nlm_lm_s}$ se pueden escribir como el producto de una función propia espacial ψ_{nlm_l} y una función propia de spin σ_{m_s}. Sin embargo, la estructura matemática de las funciones propias de spin es diferente a la que tienen las funciones propias espaciales. Las ψ_{nlm_l} son funciones continuas de las variables continuas r, θ, ϕ, que ya hemos estudiado; la "variable de spin" puede tener sólo dos valores, que corresponden a los dos valores posibles de m_s, de manera que σ_{m_s} no es una función continua. Estas funciones se pueden representar de diversas maneras; la de uso más frecuente es la *representación matricial de Pauli* donde se escriben como matrices de dos renglones y una columna. Esta representación está íntimamente relacionada con la formulación matricial de Heisenberg de la mecánica cuántica mencionada en la sección 1 del capítulo 7, la que es tratada en textos avanzados de mecánica cuántica. No la consideraremos aquí, ya que para nuestros propósitos es posible evitar situaciones donde sea necesario conocer la forma explícita de las funciones propias de spin.

Como su nombre lo indica, se puede pensar que el impulso angular de spin $\mathbf{S}$ es el análogo del impulso angular de una partícula que gira alrededor de un eje que pasa por su centro. En términos de la descripción de Bohr, podemos hacer una analogía entre el movimiento alrededor del núcleo de un electrón que está girando con el movimiento, alrededor del Sol, de un planeta que gira sobre su propio eje. Se debe observar que la analogía no se debe tomar muy en serio puesto que el *spin del electrón no es una cantidad clásica*. Esto se debe a que el número cuántico s, que especifica la magnitud del impulso angular de spin, tiene el valor fijo $\frac{1}{2}$. En consecuencia, no podemos tomar el límite clásico para $\mathbf{S}$ haciendo que $s \to \infty$, como lo hicimos en el capítulo anterior para L haciendo que $l \to \infty$. Otra forma de expresar lo mismo es que

* Experimentos sumamente precisos efectuados por Lamb (1947), usando distintas técnicas, muestran que g_s difiere un poco de 2. Su valor mas preciso es $g_s = 2.00232$.

www.FreeLibros.me

en el límite clásico la magnitud del spin, $S = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}\,\hbar$ es totalmente despreciable y, por esto, debe ser una cantidad esencialmente no clásica.

Aunque el spin del electrón es perfectamente compatible con la teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica, se debe introducir con un postulado aparte. La razón de que el spin no esté contenido en la teoría se debe a que es una aproximación que ignora los efectos relativistas (véase la sección 2 del capítulo 7). En 1928 Dirac desarrolló una teoría relativista de la mecánica cuántica. Manejando esencialmente los mismos postulados de la teoría de Schrödinger y demandando, al mismo tiempo, que la mecánica cuántica satisfaga los requisitos de la teoría de la relatividad, Dirac mostró que un electrón debe poseer un impulso angular y un momento magnético con las propiedades descritas anteriormente. De esta manera se le dio al spin del electrón un sólido fundamento teórico. No consideramos apropiado dar en este libro un tratamiento cuantitativo de esta teoría, por lo que continuaremos considerando al spin del electrón como un añadido *ad hoc* a la teoría de Schrödinger. Esto no impide que en capítulos subsiguientes describamos cuantitativamente algunas de las características más importantes de la teoría de Dirac.

4. La interacción spin-órbita

Goudsmit y Uhlenbeck fueron los primeros en postular la existencia del spin del electrón (1925). Querían entender por qué ciertas líneas del espectro óptico del hidrógeno y de los elementos alcalinos estaban compuestas de pares de líneas sumamente próximas. Esta es la *estructura fina*, que había sido tratada por Sommerfeld en la antigua teoría cuántica, como debida a un rompimiento en los niveles de energía a causa de la pequeña contribución a la energía total por la variación relativista de la masa del electrón con la velocidad (véase la sección 7 del capítulo 5). Los resultados de la hipótesis de Sommerfeld, expresados en la ecuación (5–22), concordaban razonablemente con los datos experimentales de la estructura fina del espectro del hidrógeno. Pero también la concordancia era buena en el caso de los elementos alcalinos, lo cual era sorprendente, ya que de acuerdo con la antigua teoría cuántica, el electrón espectroscópicamente activo en estos elementos (un elemento con sólo un electrón de valencia) se movería en una órbita de radio grande con baja velocidad, de manera que la corrección relativista debería ser despreciable. En consecuencia, se despertó una duda sobre la validez de la explicación de Sommerfeld sobre el origen de la estructura fina. Al considerar otras posibilidades, Goudsmit y Uhlenbeck propusieron que un electrón posee un impulso angular y un momento magnético inherentes, cuya componente z está especificada por el número cuántico m_s que puede tomar los dos valores $-\frac{1}{2}$ y $+\frac{1}{2}$. La separación de los niveles atómicos de energía se podría interpretar como debida a una energía potencial de orientación del momento magnético inherente del electrón de un átomo en el campo magnético del átomo, la cual puede ser positiva o negativa dependiendo del signo de m_s.

En esta sección calcularemos la energía potencial de orientación, que recibe el nombre de *energía spin-órbita*, empleando una mezcla juiciosa de la teoría

www.FreeLibros.me

de Bohr y de la relatividad. Este cálculo se justifica, ya que sus resultados concuerdan con los obtenidos por la teoría de Dirac.

Considere un electrón de carga $-e$ que se mueve en una órbita de Bohr alrededor de un núcleo de carga $+Ze$, como se muestra en la figura 11–6. Sea $\mathbf{v}$ la velocidad del electrón y $\mathbf{r}$ el radio de la órbita. El electrón considera que el núcleo se mueve con velocidad $-\mathbf{v}$, como se muestra en la figura 11–7. Así, este núcleo cargado genera una corriente

$$\mathbf{j} = -Ze\mathbf{v}/c$$

El campo magnético producido por ella en el lugar donde se encuentra el electrón, de acuerdo con la ley de Ampere es

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{j} \times \mathbf{r}}{r^3} = -\frac{Ze}{c}\frac{\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3}$$

Conviene expresarlo en términos del campo eléctrico $\mathbf{E}$ que actúa sobre el electrón. De acuerdo a la ley de Coulomb

$$\mathbf{E} = +Ze\frac{\mathbf{r}}{r^3}$$

de manera que

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{E} \tag{11–28}$$

Si se tiene en cuenta el comportamiento de las ecuaciones de Maxwell bajo la aplicación de una transformación de Lorentz se concluye que es general la

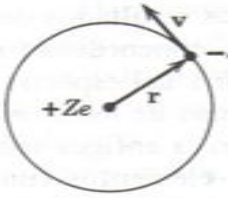

Figura 11-6. Un electrón que se mueve en una órbita circular de Bohr visto desde el núcleo.

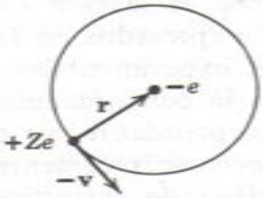

Figura 11-7. Un núcleo que se mueve en una órbita circular de Bohr visto desde el electrón.

validez de la ecuación anterior: cualquier partícula que se mueva con velocidad $\mathbf{v}$ en un campo eléctrico $\mathbf{E}$ arbitrario experimentará un campo magnético dado por la ecuación (11–28).

El campo magnético ocasionará una precesión de Larmor del momento magnético de spin con una frecuencia angular dada por la ecuación (11–17).

$$\boldsymbol{\omega}_L = \frac{g_s \mu_B}{\hbar}\mathbf{H} \tag{11–29}$$

www.FreeLibros.me

donde hemos reemplazado g_l por g_s para obtener el valor correcto del momento magnético de spin. Conforme a la ecuación (11–15) el campo magnético producirá una energía potencial de orientación

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{H} = \frac{g_s \mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{H} \tag{11–30}$$

Estas cantidades han sido evaluadas en el marco de referencia donde el electrón se encuentra en reposo. Lo que realmente nos interesa es conocer sus valores en el marco de referencia normal donde el núcleo se encuentra en reposo. Aunque no es obvio que al transformar al marco de referencia normal cambiarán los valores aparentes de ωL o ΔE, se observa que éste es el caso en virtud de un efecto cinemático de la teoría de la relatividad que recibe el nombre de *precesión de Thomas*.

Considere la situación vista por un observador en el marco de referencia xy donde el núcleo se encuentra en reposo, como se ilustra en la figura 11–8. El electrón está momentáneamente en reposo en el marco $x_1\ y_1$ al instante t_1, y momentáneamente en reposo en el marco $x_2\ y_2$ al tiempo posterior t_2. Se han construido los ejes xy y $x_2\ y_2$ paralelos a los ejes de $x_1\ y_1$ como los ve un observador que se mueve instantáneamente con el electrón en $x_1 y_1$. Sin embargo, el observador en xy ve los ejes $x_2 y_2$ ligeramente girados respecto a sus ejes; con un giro mayor ve los ejes $x_3 y_3$. Observa, entonces, que el

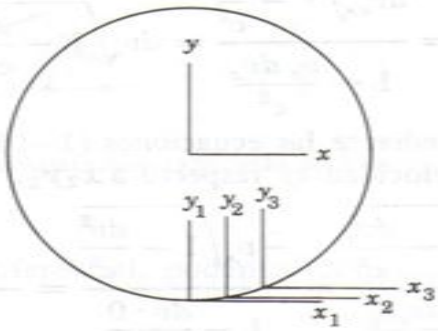

Figura 11-8. Los marcos de referencia empleados en el cálculo de la precesión de Thomas.

conjunto de ejes donde el electrón se encuentra instantáneamente en reposo tienen una precesión respecto a su conjunto propio de ejes a medida que el electrón se mueve alrededor del núcleo, aunque los observadores que se encuentran instantáneamente en reposo respecto al electrón afirman que cada conjunto de ejes $x_{n+1} y_{n+1}$ es paralelo al conjunto anterior $x_n y_n$.

En la figura 11–9 se muestra xy, $x_1 y_1$ y $x_2 y_2$ vistos desde el conjunto de ejes $x_1 y_1$. Ya que el electrón se mueve con velocidad **v** respecto al núcleo, los ejes xy se mueven respecto a $x_1 y_1$ con la velocidad $-\mathbf{v}$ en la dirección negativa del eje x_1. Visto desde $x_1 y_1$, la aceleración **a** del electrón hacia el

www.FreeLibros.me

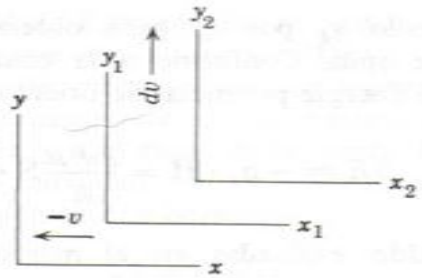

Figura 11-9. Los marcos de referencia empleados en el cálculo de la precesión de Thomas vistos desde el marco x_1y_1.

núcleo se encuentra en la dirección positiva del eje y_1. Si el intervalo $t_2 - t_1$ es muy pequeño, el cambio de la velocidad durante este lapso es

$$d\mathbf{v} = \mathbf{a}(t_2 - t_1) = \mathbf{a}\, dt \tag{11-31}$$

y ésta será la velocidad de x_2y_2 vista desde x_1y_1. Usemos las ecuaciones (1–16) para evaluar las componentes de $\mathbf{V}_a$, la velocidad de x_2y_2 respecto a xy. Se obtiene

$$V_{a_x} = \frac{dv_x - v_x}{1 - \dfrac{v_x\, dv_x}{c^2}} = \frac{0 + v}{1 - \dfrac{-v \cdot 0}{c^2}} = v$$

$$V_{a_y} = \frac{dv_y\sqrt{1 - \dfrac{v_x^2}{c^2}}}{1 - \dfrac{v_x\, dv_x}{c^2}} = dv\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

De manera semejante, mediante las ecuaciones (1–16) se pueden calcular las componentes de $\mathbf{V}_b$, la velocidad xy respecto a x_2y_2.

$$V_{b_x} = \frac{v_x\sqrt{1 - \dfrac{dv_y^2}{c^2}}}{1 - \dfrac{dv_y v_y}{c^2}} = \frac{-v\sqrt{1 - \dfrac{dv^2}{c^2}}}{1 - \dfrac{dv \cdot 0}{c^2}} = -v\sqrt{1 - \frac{dv^2}{c^2}}$$

$$V_{b_y} = \frac{v_y - dv_y}{1 - \dfrac{dv_y v_y}{c^2}} = -dv$$

El lector puede verificar que la magnitud de $\mathbf{V}_a$ es igual a la magnitud de $\mathbf{V}_b$, en concordancia con el postulado de Einstein de la equivalencia de los marcos inerciales. Calculemos el ángulo que forma el vector $\mathbf{V}_a$ con el eje x del marco xy:

$$\theta_a = \frac{V_{a_y}}{V_{a_x}} = \frac{dv\sqrt{1 - \dfrac{v^2}{c^2}}}{v}$$

www.FreeLibros.me

El ángulo que forma el vector $\mathbf{V}_b$ con el eje x del marco x_2y_2 es

$$\theta_b = \frac{V_{b_y}}{V_{b_x}} = \frac{-dv}{-v\sqrt{1-\dfrac{dv^2}{c^2}}}$$

La figura 11–10 muestra los marcos x_2y_2 y xy como se observa desde xy. De acuerdo con el postulado de equivalencia, $\mathbf{V}_a$ y $\mathbf{V}_b$ deben tener direcciones opuestas. Ya que los ángulos entre los ejes x y los vectores de velocidad relativa no son los mismos, el marco x_2y_2 aparece girado respecto al marco xy, el ángulo

$$d\theta = \theta_b - \theta_a = \left[\frac{dv}{v\sqrt{1-\dfrac{dv^2}{c^2}}} - \frac{dv}{v}\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}\right]$$

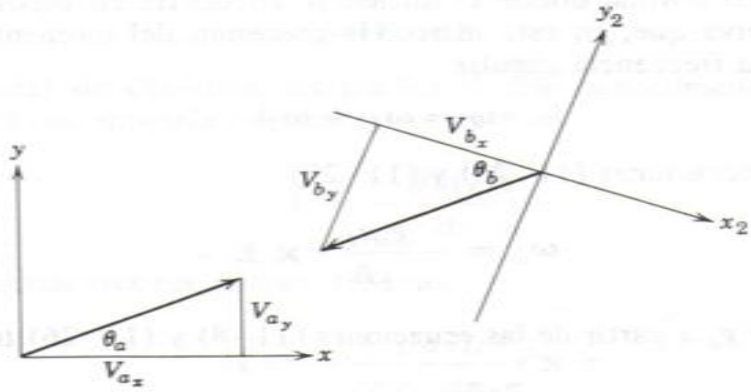

Figura 11-10. Una ilustración exagerada de la precesión de Thomas.

Puesto que dv es una diferencial, podemos despreciar dv^2/c^2 respecto a la unidad. Entonces

$$d\theta = \left[\frac{dv}{v} - \frac{dv}{v}\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}\right]$$

Puesto que v es la velocidad de un electrón en un átomo, se tiene que $v^2/c^2 \lessapprox 10^{-4}$. Por consiguiente, obtenemos una aproximación muy buena para $d\theta$ si sólo tomamos los dos primeros términos en el desarrollo binomial de $\sqrt{1-v^2/c^2}$. Tenemos

$$d\theta = \frac{dv}{v}\left[1-\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}\right] \simeq \frac{dv}{v}\left[1-\left(1-\frac{v^2}{2c^2}\right)\right]$$

$$= \frac{dv\,v^2}{2vc^2} = \frac{v\,dv}{2c^2} = \frac{va\,dt}{2c^2}$$

www.FreeLibros.me

donde hemos empleado (11–31) para evaluar dv. Los ejes donde el electrón se encuentra instantáneamente en reposo tienen una precesión respecto al núcleo, con una frecuencia angular

$$\omega_T = d\theta/dt = va/2c^2$$

que recibe el nombre de *frecuencia de Thomas*. Una inspección de las figuras mostrará que el sentido y la magnitud de la precesión están dados por la ecuación vectorial

$$\boldsymbol{\omega}_T = -\frac{1}{2c^2}\mathbf{v} \times \mathbf{a} \tag{11–32}$$

Respecto a los marcos donde el electrón se encuentra en reposo, su momento magnético de spin tiene una precesión de frecuencia angular $\boldsymbol{\omega}_L$. Pero, a su vez, estos marcos tienen una precesión con frecuencia angular $\boldsymbol{\omega}_T$ respecto al marco normal donde el núcleo se encuentra en reposo. En consecuencia, se observa que, en este marco, la precesión del momento magnético de spin tiene una frecuencia angular

$$\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}_L + \boldsymbol{\omega}_T \tag{11–33}$$

Conforme a las ecuaciones (11–28) y (11–29)

$$\boldsymbol{\omega}_L = -\frac{g_s\mu_B}{c\hbar}\mathbf{v} \times \mathbf{E}$$

Calculando μ_B y g_s a partir de las ecuaciones (11–8) y (11–26) tenemos

$$\boldsymbol{\omega}_L = -\frac{2e\hbar}{c\hbar 2mc}\mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{e}{mc^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E} \tag{11–34}$$

Para calcular $\boldsymbol{\omega}_T$, empleamos la ley de Newton para expresar la aceleración del electrón en términos del campo eléctrico:

$$\mathbf{a} = -e\mathbf{E}/m$$

de manera que la ecuación (11–32) toma la forma

$$\boldsymbol{\omega}_T = \frac{e}{2mc^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E} \tag{11–35}$$

Así, la frecuencia de precesión en el marco normal de referencia es

$$\boldsymbol{\omega} = -\frac{e}{mc^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E} + \frac{e}{2mc^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{e}{2mc^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E} \tag{11–36}$$

Esta expresión fue derivada por Thomas en 1926.

Al comparar las ecuaciones (11–36) y (11–34), observamos que al transformar la frecuencia de precesión del spin del marco donde el electrón se

www.FreeLibros.me

encuentra en reposo al marco normal, se reduce su magnitud por el factor 2. Lo mismo es cierto de la energía potencial de orientación ya que, como se puede ver a partir de las ecuaciones (11–29) y (11–30), la magnitud de esta cantidad es proporcional a la magnitud de la frecuencia de precesión. En consecuencia, el valor de la energía potencial de orientación en el marco normal de referencia, que usualmente se designa por $\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}$ es

$$\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}} = \frac{1}{2}\frac{g_s\mu_B}{\hbar}\mathbf{S}\cdot\mathbf{H} \tag{11–37}$$

Es conveniente expresarla en términos de la cantidad $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$. Para esto empleamos la ecuación (11–28) y escribimos

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{E}$$

y expresamos $\mathbf{E}$ en términos de la fuerza $\mathbf{F}$ ejercida sobre el electrón,

$$-e\mathbf{E} = \mathbf{F}$$

En el potencial de Coulomb del núcleo, o más generalmente, en cualquier potencial $V(r)$ con simetría esférica, la fuerza $\mathbf{F}$ es

$$\mathbf{F} = -\frac{dV(r)}{dr}\frac{\mathbf{r}}{r}$$

Combinando estas tres ecuaciones, tenemos

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{ec}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{v}\times\mathbf{r}$$

Al multiplicar numerador y denominador por m y emplear la ecuación (11–4) obtenemos*

$$\mathbf{H} = \frac{1}{emc}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{L} \tag{11–38}$$

Así, podemos escribir la ecuación (11–37) como

$$\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}} = \frac{g_s\mu_B}{2emc\hbar}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$$

Evaluando g_s y μ_B, obtenemos

$$\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}} = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} \tag{11–39}$$

* De la definición del producto vectorial se tiene que

$$\mathbf{r}\times\mathbf{v} = -\mathbf{v}\times\mathbf{r}$$

www.FreeLibros.me

Aunque el cálculo de la energía spin-órbita se basó esencialmente en la teoría de Bohr, los resultados de la ecuación (11–39) concuerdan exactamente con los resultados correctos de un tratamiento cuántico relativista.

Estimamos $\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}$ para un estado típico en un átomo con un electrón, para verificar si ésta es del mismo orden de magnitud que la separación de estructura fina observada experimentalmente para el nivel de energía correspondiente. Considere el estado $n = 2$, $l = 1$ del átomo de hidrógeno. El potencial $V(r)$ es

$$V(r) = -e^2 r^{-1}$$

de modo que

$$\frac{dV(r)}{dr} = e^2 r^{-2}$$

y

$$\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}} = \frac{e^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$$

La magnitud de $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ es aproximadamente $\hbar^2$. El valor promedio de $1/r^3$ para el estado $n = 2$ es aproximadamente $1/2^3 a_0^3$, donde $a_0 = \hbar^2/me^2$. Así

$$|\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}| \sim \frac{e^2}{2m^2c^2}\frac{m^3e^6}{2^3\hbar^6}\hbar^2 \sim 10^{-16}\ \text{erg} \sim 10^{-4}\text{ev}$$

Puesto que $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ sólo puede ser positivo o negativo, dependiendo de si $m_s = +\frac{1}{2}$ ó $-\frac{1}{2}$, el nivel de energía se divide en dos que se encuentran separados por alrededor de 2×10^{-4} ev. Al comparar esta energía con la energía del nivel $n = 2$, $l = 1$ del hidrógeno, $E_2 = -3.4$ ev, observamos que la separación que se predice es de alrededor de una parte en 10^4 —que concuerda bastante con la separación que se requiere para explicar la estructura fina de las líneas del espectro de hidrógeno asociadas con este nivel.

Es interesante estimar la magnitud H del campo magnético que actúa sobre el momento magnético de spin de un electrón en el estado $n = 2$, $l = 1$ del hidrógeno. A partir de (11–30) tenemos

$$|\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}| \sim \mu_s H$$

donde

$$\mu_s \sim \mu_B \sim 10^{-20}\ \text{erg-gauss}^{-1}$$

En consecuencia

$$H \sim \frac{10^{-16}\ \text{ergs}}{10^{-20}\ \text{erg-gauss}^{-1}} = 10^4\ \text{gauss}$$

el cual es un campo magnético intenso.

www.FreeLibros.me

5. El impulso angular total

En ausencia de la interacción spin-órbita y de pares de fuerzas externas, las magnitudes y las componentes z de los vectores de impulso angular orbital y del spin, **L** y **S**, tienen valores constantes especificados por los números cuánticos l, m_l, m_s.* Pero, de hecho, existe un campo magnético intenso cuya orientación está determinada por **L**, que produce un par de fuerzas sobre el momento magnético de spin, cuya orientación está determinada por **S**. En la sección 2 hemos visto que este par de fuerzas no cambiará la magnitud del vector **S**, ni tampoco el par de fuerzas de reacción que actúa sobre **L** modificará su magnitud. Pero este par de fuerzas genera un acoplamiento entre **L** y **S** y hace que la orientación de un vector dependa de la orientación del otro. En consecuencia, la componente z de ningún vector permanecerá fija, ya que ambos tendrán una precesión alrededor del vector

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \tag{11–40}$$

que es su suma vectorial. El vector **J** recibe el nombre de *impulso angular total.*

Clásicamente la magnitud y las tres componentes del vector de impulso angular total estarían fijos si no actuaran pares de fuerzas externos sobre el átomo. Esto sólo es parcialmente cierto en la mecánica cuántica ya que, como el lector podrá darse cuenta, esta teoría predice que son constantes la magnitud y la componente z de **J**, mientras que no tienen un valor definido sus componentes x y y. Empleando técnicas semejantes a las que utilizamos al estudiar las propiedades del vector de impulso angular orbital, se puede mostrar que la magnitud y la componente z de este vector la especifican los dos números cuánticos j y m_j conforme a las ecuaciones**

$$\begin{aligned} J &= \sqrt{j(j+1)}\,\hbar \\ J_z &= m_j\hbar \end{aligned} \tag{11–41}$$

donde

$$m_j = -j, -j+1, \ldots, j-1, j \tag{11–42}$$

Determinemos los valores posibles del número cuántico j. Tomando la componente z en la ecuación (11–40), tenemos

$$J_z = L_z + S_z$$

que es igual a

$$m_j\hbar = m_l\hbar + m_s\hbar$$

* No es preciso especificar el valor del número cuántico s ya que sólo puede tomar el valor $s = \frac{1}{2}$.

** En la formulación matricial de Heisenberg de la mecánica cuántica se muestra que *todos* los vectores de impulso angular (orbital, de spin y todas las combinaciones) obedecen ecuaciones de cuantización de idéntica forma.

www.FreeLibros.me

o sea,

$$m_j = m_l + m_s \tag{11–43}$$

Ya que el valor máximo que puede tomar m_l es l y el valor máximo que puede tomar m_s es $\frac{1}{2}$, el valor máximo que puede tomar m_j será

$$(m_j)_{\text{máx}} = l + \tfrac{1}{2}$$

De acuerdo con la ecuación (11–42), también éste es el valor máximo que puede tomar j. Como sucede con otros números cuánticos que hemos discutido hasta ahora, la diferencia entre dos valores posibles de j es un entero. En consecuencia, estos valores deben ser miembros de la serie

$$j = l + \tfrac{1}{2}, l - \tfrac{1}{2}, l - \tfrac{3}{2}, l - \tfrac{5}{2}, \ldots$$

Para determinar el límite inferior de esta serie podemos emplear la desigualdad vectorial

$$|\mathbf{L} + \mathbf{S}| \geqslant \big||\mathbf{L}| - |\mathbf{S}|\big|$$

cuya validez se puede mostrar fácilmente construyendo algunos diagramas vectoriales simples. Entonces

$$|\mathbf{J}| \geqslant \big||\mathbf{L}| - |\mathbf{S}|\big|$$

o sea

$$\sqrt{j(j+1)}\,\hbar \geqslant \left|\sqrt{l(l+1)}\,\hbar - \sqrt{\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)}\,\hbar\right|$$

El lector mostrará que cuando $l \neq 0$ solamente los miembros de la serie

$$j = l + \tfrac{1}{2}, l - \tfrac{1}{2} \tag{11–44}$$

satisfacen esta desigualdad. Cuando $l = 0$, $\mathbf{L} = 0$, y el único valor posible para j es

$$j = \tfrac{1}{2}, \quad l = 0 \tag{11–44'}$$

El contenido de las ecuaciones (11–42), (11–44) y (11–44') se puede representar formalmente en términos de las reglas de la suma vectorial, construyendo un conjunto de vectores cuyas longitudes son proporcionales a los valores de los números cuánticos l, s y j. Consideremos $l = 2$, por ejemplo. Los dos valores posibles de j son $\frac{5}{2}$ y $\frac{3}{2}$. Para $j = \frac{5}{2}$: $m_j = -\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}, +\frac{5}{2}$. Para $j = \frac{3}{2}$: $m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}$. En la figura 11–11 se muestran los diagramas de adición vectorial para estos dos valores de j. No es preciso discutir la interpretación de estos diagramas: sólo ilustran las reglas para sumar los números cuánticos l y s para obtener los valores posibles de j y m_j. Si la relación entre la magnitud de un vector de impulso angular, como lo es $\mathbf{L}$, y su número cuántico asociado fuera $L = l\hbar$ en lugar de $L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$, los diagramas representarían también la suma de $\mathbf{L}$ y $\mathbf{S}$ para obtener $\mathbf{J}$ y J_z. A pesar de que esto es falso, frecuentemente se consideran estos diagramas en discusiones elementales de la estructura atómica como una representación

www.FreeLibros.me

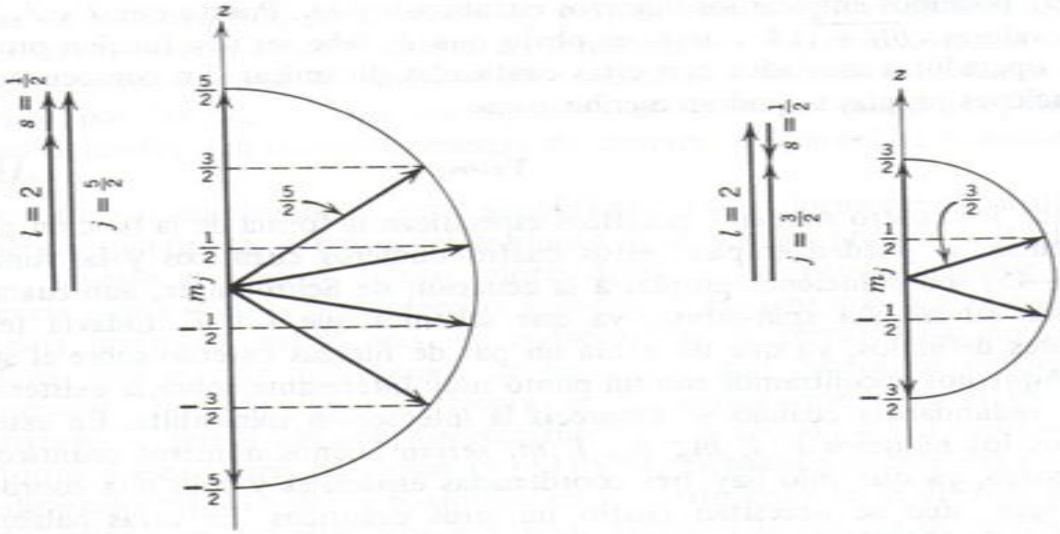

Figura 11-11. Diagramas vectoriales para los números cuánticos $l = 2$, $s = \frac{1}{2}$.

simplista de la suma de vectores. Es una representación útil que conviene recordar, aunque no se debe olvidar que es una aproximación, y que una representación más precisa de la suma de estos vectores tendrá un aspecto semejante al mostrado en la figura 11–12 para el caso de $l = 2$, $j = \frac{5}{2}$, $m_j = \frac{3}{2}$. En la figura se pretende ilustrar que los vectores **L** y **S** tienen una precesión alrededor del vector **J**, que a su vez tiene una precesión alrededor del eje z.

Cuando se toma en cuenta la interacción spin-órbita, ya no podremos emplear los números cuánticos m_l o m_s para identificar las funciones ψ puesto que ya no serán una función propia de los operadores asociados con las cantidades dinámicas L_z y S_z. Esto es, L_z y S_z no tienen valores definidos y no es posible caracterizar ψ por valores definidos para m_l y m_s. Al perder a m_l y m_s como buenos números cuánticos, resalta inmediatamente que en su

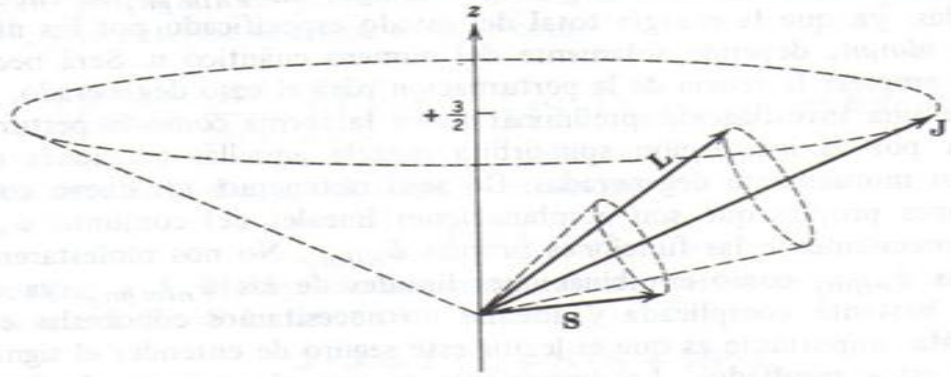

Figura 11-12. Ilustración de la precesión de los vectores **L** y **S** alrededor del vector **J** y la precesión del vector **J** alrededor del eje z.

www.FreeLibros.me

lugar podemos emplear los números cuánticos j y m_j. Puesto que J y J_z tienen los valores $\sqrt{j(j+1)}\,\hbar$ y $m_j\hbar$, es obvio que ψ debe ser una función propia de los operadores asociados con estas cantidades dinámicas. En consecuencia, las funciones propias se podrán escribir como

$$\psi_{nljm_j} \tag{11-45}$$

donde los cuatro números cuánticos especifican la forma de la función propia. Además, se pueden emplear estos cuatro números cuánticos y las funciones (11–45) son soluciones propias a la ecuación de Schrödinger, aun cuando no exista interacción spin-órbita, ya que sabemos que J y J_z todavía tendrán valores definidos, ya que no actúa un par de fuerzas externo sobre el átomo.

Aquí nos encontramos con un punto muy interesante sobre la existencia de una redundancia cuando se desprecia la interacción spin-órbita. En este caso todos los números n, l, m_l, m_s, j, m_j serían buenos números cuánticos; sin embargo, ya que sólo hay tres coordenadas espaciales y sólo una coordenada de spin, sólo se necesitan cuatro números cuánticos. En otras palabras, al ignorar la interacción spin-órbita, de (11–27) sabemos que las soluciones a la ecuación de Schrödinger tienen la forma

$$\psi_{nlm_lm_s} \tag{11-46}$$

y que son funciones propias de los operadores asociados con la energía total, la magnitud del impulso angular orbital, la componente z del impulso angular orbital y la componente z del impulso angular de spin. Sin embargo, existen también soluciones a la ecuación de Schrödinger, escritas en la forma (11–45), que: son funciones propias de los operadores asociados con la energía total, la magnitud del impulso angular orbital, la magnitud del impulso angular total y la componente z del impulso angular total. Es posible entender la relación entre $\psi_{nlm_lm_s}$ y ψ_{nljm_j} al considerar el procedimiento seguido en la evaluación de la energía spin-órbita $\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}$ por la teoría de la perturbación.

Conforme a este método resolvemos primero la ecuación de Schrödinger, sin interacción spin-órbita, y obtenemos un conjunto de funciones propias, las $\psi_{nlm_lm_s}$ que hemos encontrado anteriormente. Con estas funciones propias no perturbadas calculamos $\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}$. Sin embargo, las $\psi_{nlm_lm_s}$ se encuentran degeneradas, ya que la energía total del estado especificado por los números cuánticos nlm_lm_s depende solamente del número cuántico n. Será necesario, entonces, emplear la teoría de la perturbación para el caso degenerado, la cual precisa de una investigación preliminar sobre la forma como la perturbación producida por la interacción spin-órbita mezcla aquellas funciones que se encuentran mutuamente degeneradas. De aquí obtenemos un nuevo conjunto de funciones propias que son combinaciones lineales del conjunto $\psi_{nlm_lm_s}$ que son precisamente las funciones propias ψ_{nljm_j}. No nos molestaremos en escribir las ψ_{nljm_j} como combinaciones lineales de las $\psi_{nlm_lm_s}$, ya que su forma es bastante complicada y además no necesitamos conocerlas explícitamente. Más importante es que el lector esté seguro de entender el significado físico de estos resultados. Lo importante es que el conjunto de funciones propias no perturbadas degeneradas $\psi_{nlm_lm_s}$ no se puede emplear directamente en el cálculo de la perturbación de la energía spin-órbita, ya que bajo la

www.FreeLibros.me

acción de esta pequeña perturbación L_z y S_z no tienen valores definidos. Esta perturbación mezcla completamente las funciones con diferentes valores de m_l y m_s y forma un nuevo conjunto de funciones. Este nuevo conjunto está formado por las ψ_{nljm_j}, que corresponden al hecho de que J y J_z tienen valores definidos aun cuando la energía de interacción spin-órbita se encuentra presente.

Lo anterior sugiere que se debe simplificar considerablemente el cálculo de la energía spin-órbita, a partir del conjunto de funciones propias degeneradas ψ_{nljm_j}. Puesto que J y J_z tienen valores definidos independientemente de la presencia o ausencia de la interacción spin-órbita, es claro que la aplicación de ella deja invariante sus valores. En consecuencia, la perturbación no puede ocasionar una mezcla muy grande de las ψ_{nljm_j} *aun cuando se encuentren degeneradas.* En este caso, la teoría de la perturbación para el caso no degenerado se puede emplear directamente (vea la sección 4 del capítulo 9). Conforme a esta teoría [ecuación (9–13) y la discusión siguiente extendida a tres dimensiones], el valor aproximado en el corrimiento en la energía de un estado cuyos números cuánticos son $nljm_j$ debido a la energía de interacción spin-órbita $\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}$ es

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = \iiint \psi^*_{nljm_j}(\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}})_{\text{op}}\psi_{nljm_j} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

que es igual al valor esperado para $\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}$ en ese estado. Empleando (11–39) tenemos

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = \iiint \psi^*_{nljm_j}\left(\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\right)_{\text{op}}\psi_{nljm_j} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

o sea

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = \frac{1}{2m^2c^2}\iiint \psi^*_{nljm_j}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}(\mathbf{S}\cdot\mathbf{L})_{\text{op}}\psi_{nljm_j} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi \tag{11–47}$$

Para un potencial de Coulomb, $V(r) = -Ze^2/r$, de modo que $dV(r)/dr = Ze^2/r^2$, y lo anterior se puede escribir como

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = \frac{Ze^2}{2m^2c^2}\iiint \psi^*_{nljm_j}\frac{1}{r^3}(\mathbf{S}\cdot\mathbf{L})_{\text{op}}\psi_{nljm_j} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

Para calcular $(\mathbf{S}\cdot\mathbf{L})_{\text{op}}$, considere la ecuación

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

que define a $\mathbf{J}$. Multiplicándola escalarmente por sí misma, y tomando en cuenta que $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = \mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$, tenemos

$$\mathbf{J}\cdot\mathbf{J} = \mathbf{L}\cdot\mathbf{L} + \mathbf{S}\cdot\mathbf{S} + 2\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$$

de manera que

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} = \tfrac{1}{2}(\mathbf{J}\cdot\mathbf{J} - \mathbf{L}\cdot\mathbf{L} - \mathbf{S}\cdot\mathbf{S})$$

www.FreeLibros.me

o sea

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} = \tfrac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \tag{11–48}$$

En consecuencia

$$(\mathbf{S}\cdot\mathbf{L})_{\text{op}} = \tfrac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)_{\text{op}} = \tfrac{1}{2}(J^2_{\text{op}} - L^2_{\text{op}} - S^2_{\text{op}})$$

Tenemos, entonces

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = \frac{Ze^2}{4m^2c^2}\iiint \psi^*_{nljm_j}\frac{1}{r^3}(J^2_{\text{op}} - L^2_{\text{op}} - S^2_{\text{op}})\psi_{nljm_j} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

Puesto que ψ_{nljm_j} es una función propia de J^2_{op}, L^2_{op} y S^2_{op} con los valores propios $j(j+1)\hbar^2$, $l(l+1)\hbar^2$ y $\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2$ respectivamente,* se tiene que

$$(J^2_{\text{op}} - L^2_{\text{op}} - S^2_{\text{op}})\psi_{nljm_j} = [j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}]\hbar^2\psi_{nljm_j}$$

y entonces

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = \frac{Ze^2\hbar^2}{4m^2c^2}[j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}] \times \iiint \psi^*_{nljm_j}\frac{1}{r^3}\psi_{nljm_j} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi \tag{11–49}$$

Las integrales sobre θ y ϕ son iguales a la unidad en virtud de las propiedades de normalización de ψ, por lo que

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = \frac{Ze^2\hbar^2}{4m^2c^2}[j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}]\int R^*_{nl}(r)\frac{1}{r^3}R_{nl}(r)r^2\, dr$$

Se puede calcular la integral sobre r obteniendo

$$\int R^*_{nl}(r)\frac{1}{r^3}R_{nl}(r)r^2\, dr = \overline{r^{-3}} = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$

Observe que $r^{-3} \to \infty$ cuando $1 = 0$. Para este valor de l, $j = \frac{1}{2}$ y $[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{2}] = 0$, de manera que $\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}$ está indeterminada. Esto sólo es el resultado de calcular r^{-3} en la teoría de la perturbación. Un cálculo más preciso muestra que esta cantidad es muy grande, aunque finita, cuando $l = 0$. Puesto que en este caso $[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}]$ es estrictamente igual a cero, tenemos

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = 0, \qquad l = 0 \tag{11–50}$$

Para otros valores de l se tiene

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = \frac{Z^4e^2\hbar^2}{4m^2c^2a_0^3}\frac{[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}]}{n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$

* Todas estas funciones son funciones propias de S^2op, ya que S^2 sólo puede tener el valor $\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2$.

www.FreeLibros.me

En términos de la *constante de la estructura fina* $\alpha \equiv e^2/\hbar c \simeq 1/137$, y el valor absoluto de la energía no perturbada del estado, $E_n = -mZ^2e^4/2\hbar^2n^2$, se puede escribir esta energía como

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = \frac{Z^2|E_n|\alpha^2}{2n}\frac{[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}]}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$

El valor de la energía spin-órbita depende del de j. Las dos posibilidades son $j = l + \frac{1}{2}$ y $j = l - \frac{1}{2}$, que corresponden, respectivamente, a situaciones en las cuales **S** y **L** son, aproximadamente, paralelos o antiparalelos, respectivamente. Calculando $\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}$ para estas posibilidades, obtenemos

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = \begin{cases} +\dfrac{Z^2|E_n|\alpha^2}{n(2l+1)(l+1)}, & j = l + \frac{1}{2},\ l \neq 0 \\ -\dfrac{Z^2|E_n|\alpha^2}{nl(2l+1)}, & j = l - \frac{1}{2},\ l \neq 0 \end{cases} \tag{11–51}$$

6. Correcciones relativistas para átomos con un electrón

En la sección 4 de este capítulo estimamos que el corrimiento en la energía de un nivel típico del átomo de hidrógeno, debido a la interacción spin-órbita, es alrededor de 10^{-4} veces la energía de ese nivel. En la sección 7 del capítulo 5 estimamos que el corrimiento en la energía de este nivel debido a la dependencia relativista de la masa con la velocidad es también alrededor de 10^{-4} veces la energía del nivel. Los corrimientos en la energía debidos a efectos relativistas diferentes del spin son comparables con aquellos debidos a la interacción spin-órbita para el átomo de hidrógeno, de manera que no esperamos poder comparar las predicciones de la ecuación (11–50) u (11–51) con los datos experimentales hasta que hayamos tomado en cuenta estos efectos. Sólo con la teoría de Dirac se puede dar un tratamiento completo de los efectos relativistas; pero se pueden obtener resultados casi completos con la teoría de Schrödinger, tratando como una perturbación las correcciones relativistas adicionales.

El punto de partida de la mecánica cuántica de Schrödinger consiste en expresar clásicamente la energía E como una suma de la energía cinética T y la energía potencial V, esto es

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + V \tag{11–52}$$

Esta ecuación no es relativísticamente correcta ya que, conforme a las ecuaciones (1–22′) y (1–25),

$$T_{\text{Rel}} = (c^2p^2 + m^2c^4)^{1/2} - mc^2$$

www.FreeLibros.me

donde m es la masa en reposo. Escribamos la expresión relativista para E y calculémosla para valores pequeños de p. Obtenemos:

$$E_{\text{Rel}} = T_{\text{Rel}} + V = (c^2p^2 + m^2c^4)^{1/2} - mc^2 + V$$

$$E_{\text{Rel}} = mc^2\left[\left(1 + \frac{p^2}{m^2c^2}\right)^{1/2} - 1\right] + V$$

$$E_{\text{Rel}} \simeq mc^2\left[1 + \frac{p^2}{2m^2c^2} - \frac{p^4}{8m^4c^4} - 1\right] + V$$

$$E_{\text{Rel}} \simeq \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + V$$

Hemos tomado los tres primeros términos en el desarrollo del binomio. Al comparar esta expresión con la ecuación (11–52), observamos que el error que se comete al considerar la expresión clásica para E es aproximadamente igual a

$$\Delta E_{\text{Rel}} = -\frac{p^4}{8m^3c^2} = -\frac{T^2}{2mc^2} = -\frac{(E - V)^2}{2mc^2} = -\frac{E^2 + V^2 - 2EV}{2mc^2} \tag{11–53}$$

Si empleamos las funciones propias ψ_{nljm_j}, podemos aplicar la teoría de la perturbación para el caso no degenerado para calcular el corrimiento en la energía total E del estado correspondiente debida al término adicional ΔE_{Rel}, que se puede considerar como una adición a V. Conforme a la teoría, el valor aproximado del corrimiento en la energía es

$$\overline{\Delta E_{\text{Rel}}} = -\frac{1}{2mc^2}\iiint \psi^*_{nljm_j}(E^2 + V^2 - 2EV)_{\text{op}}\psi_{nljm_j} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

Puesto que

$$V = -Ze^2/r \quad \text{y} \quad E = E_n, \quad \text{una constante}$$

Obtenemos

$$\overline{\Delta E_{\text{Rel}}} = -\frac{E_n^2}{2mc^2} - \frac{Z^2e^4}{2mc^2}\iiint \psi^*_{nljm_j}\frac{1}{r^2}\psi_{nljm_j} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

$$- \frac{E_nZe^2}{mc^2}\iiint \psi^*_{nljm_j}\frac{1}{r}\psi_{nljm_j} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

Al calcular la integral se tiene

$$\overline{\Delta E_{\text{Rel}}} = -\frac{Z^2|E_n|\alpha^2}{n}\left(\frac{2}{2l + 1} - \frac{3}{4n}\right) \tag{11–54}$$

www.FreeLibros.me

Si se comparan las ecuaciones (11–51) y (11–54) se observa que el corrimiento en la energía que acabamos de calcular es, de hecho, comparable al corrimiento en la energía debido a la interacción spin-órbita. Ya que ambas cantidades tienen la misma dependencia respecto a Z, lo anterior será cierto para todos los átomos con un electrón.

Al sumar los dos corrimientos a la energía no perturbada, se obtiene una expresión para la energía total

$$E = E_n + \overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} + \overline{\Delta E_{\mathrm{Rel}}}$$

del estado que especifican los números cuánticos $nljm_j$. Esta es

$$E = -|E_n|\left\{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n}\left(-\frac{1}{(2l+1)(l+1)} + \frac{2}{2l+1} - \frac{3}{4n}\right)\right\}$$

$$= -|E_n|\left\{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{l+1} - \frac{3}{4n}\right)\right\}, \qquad j = l + \tfrac{1}{2},\ l \neq 0$$

y

$$E = -|E_n|\left\{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{l(2l+1)} + \frac{2}{2l+1} - \frac{3}{4n}\right)\right\}$$

$$= -|E_n|\left\{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{l} - \frac{3}{4n}\right)\right\}, \qquad j = l - \tfrac{1}{2},\ l \neq 0$$

Para ambos valores de j se puede escribir

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}\left\{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)\right\}, \qquad l \neq 0 \qquad (11\text{–}55)$$

Para $l = 0$, $\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = 0$ y $E = E_n + \overline{\Delta E_{\mathrm{Rel}}}$, que es

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}\left\{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n}\left(2 - \frac{3}{4n}\right)\right\}, \qquad l = 0 \qquad (11\text{–}56)$$

donde hemos evaluado E_n empleando la masa reducida μ del electrón.

Comparemos estos resultados con los de la versión relativista de Sommerfeld de la teoría de Bohr para los niveles de energía del átomo con un electrón, dados por la ecuación (5–22). Esta es

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}\left\{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{n_\theta} - \frac{3}{4n}\right)\right\} \qquad (11\text{–}57)$$

El número cuántico n_θ que aparece en esta expresión puede tomar los valores $n_\theta = 1, 2, 3, \ldots, n$. Ya que $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots, n - \frac{1}{2}$,* la cantidad $j + \frac{1}{2}$ puede tomar los valores $j + \frac{1}{2} = 1, 2, 3, \ldots, n$. Entonces, para $l = 0$, los valores de la energía total que predicen nuestros cálculos concuerdan perfectamente con los

* Para $l = 0$, $j = \frac{1}{2}$; en todos los demás casos $j = l + \frac{1}{2}$. Puesto que $l = 0, 1, 2, \ldots, n - 1$, el mínimo valor que puede tomar j es $\frac{1}{2}$ y el máximo es $n - 1 + \frac{1}{2} = n - \frac{1}{2}$.

www.FreeLibros.me

valores predichos por Sommerfeld. Para $l = 0$ existe discrepancia, aunque se elimina en la teoría de Dirac, que toma en cuenta la existencia de una corrección relativista más a la energía, cuya existencia no pudo haber sido advertida en virtud de que no tiene análogo clásico. Esta corrección es cero para $l \neq 0$. Si $l = 0$ su valor es tal que, cuando se añade al miembro derecho de (11–56), la ecuación que resulta tiene la misma forma que la ecuación (11–55). En consecuencia, el resultado de un tratamiento completamente relativista con la teoría de Dirac está expresado por la ecuación

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}\left\{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)\right\} \tag{11–58}$$

que concuerda perfectamente con las predicciones de la teoría de Sommerfeld. Puesto que la teoría de Sommerfeld está basada en la de Bohr, sólo es una aproximación muy gruesa a la realidad física. Desde este punto de vista, la concordancia entre las ecuaciones (11–57) y (11–58) es una de las coincidencias más sorprendentes que se encuentran en el estudio de la física.

En la figura 11–13 se muestran los niveles de energía del átomo de hidrógeno de acuerdo a las predicciones de las teorías de Bohr, Sommerfeld y Dirac para los tres primeros valores de n. Para hacer visible el rompimiento de los niveles de energía, los desplazamientos de los niveles de energía predichos

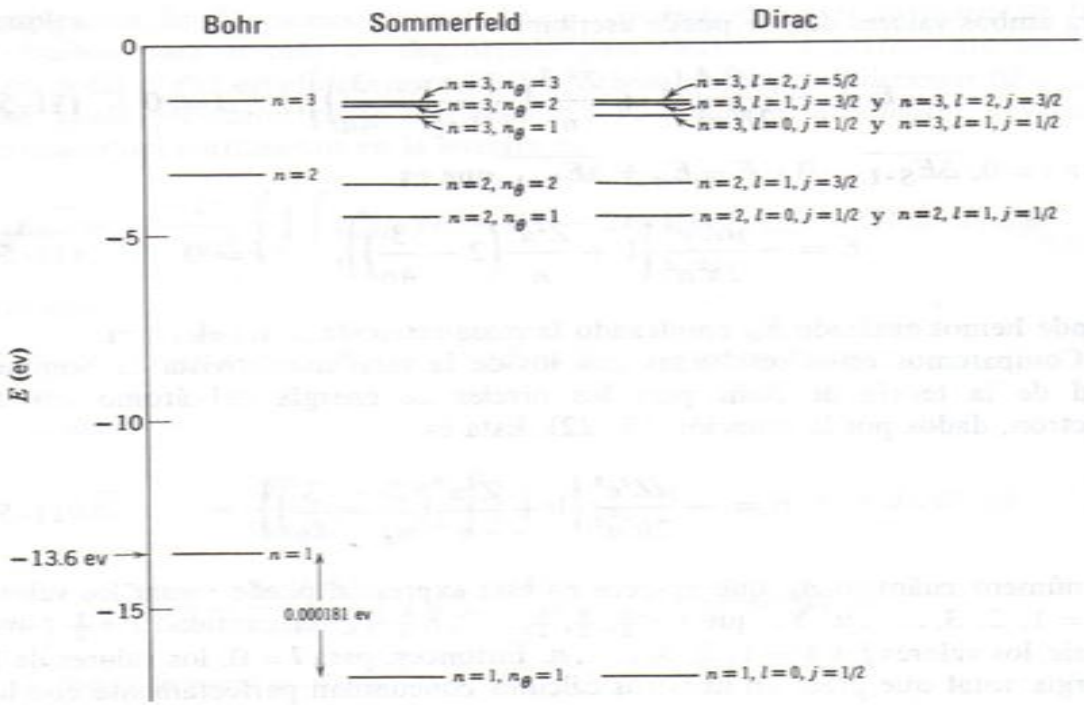

Figura 11-13. Niveles de energía del átomo de hidrógeno conforme a Bohr, Sommerfeld y Dirac. Los desplazamientos con respecto a los niveles de Bohr se han exagerado por el factor $(137)^2$.

www.FreeLibros.me

por las teorías de Sommerfeld y Dirac se han amplificado por un factor de $(137)^2 = 1.88 \times 10^4$ respecto a los desplazamientos predichos por la teoría de Bohr. De este modo, los diagramas estarían a escala si el valor de la constante de estructura fina fuera 1 en lugar de 1/137. No se muestra en el diagrama de niveles de energía de Dirac los valores del número cuántico m_j que especifica la orientación espacial del vector de impulso angular total, ya que la energía del átomo es independiente de este número cuántico, a menos que se encuentre bajo la acción de un campo eléctrico o magnético externos. Aunque no lo hemos mencionado, la teoría de Sommerfeld exige un número cuántico análogo al m_j para especificar la orientación del plano de la órbita. Ya que la energía del átomo no depende de este número cuántico (cuando no se encuentra bajo el influjo de un campo externo), no se indican sus valores en el diagrama de Sommerfeld. Tampoco se muestran los niveles de energía medidos experimentalmente por la técnica de la espectroscopia óptica, ya que se hallan en excelente concordancia con las predicciones de las teorías de Sommerfeld y Dirac.

La única diferencia esencial entre los resultados de estas dos teorías es que la de Dirac predice que en la mayoría de los niveles existe una degeneración, además de la degeneración trivial debida a la orientación espacial mencionada anteriormente, ya que la energía depende de los números cuánticos n y j aunque no de l. Ya que en general existen dos valores posibles de l para un valor dado de j, la teoría de Dirac predice que la mayoría de los niveles son dobles. Esta predicción fue confirmada experimentalmente por Lamb en 1947, al mostrar que existen dos niveles con $n = 2$ y $j = \frac{1}{2}$ que no coinciden exactamente.* El nivel $l = 0$ se encuentra por encima del nivel $l = 1$ en una cantidad aproximadamente igual a un décimo de la separación entre aquel nivel y el nivel $n = 2$, $l = 1$, $j = \frac{3}{2}$. Esto recibe el nombre de *corrimiento de Lamb* y se puede entender cuantitativamente en términos de la *electrodinámica cuántica,* así como la ligera desviación de 2 para el valor de g_s, como se mencionó en la nota al pie de la página 334. No entraremos en mayores detalles a este respecto.

Terminaremos nuestro tratamiento del átomo con un electrón mencionando un efecto final que tiene influencia sobre los niveles atómicos de energía. La interacción entre el campo magnético producido por el electrón en movimiento y el momento magnético intrínseco del núcleo produce una *separación hiperfina.* Puesto que los momentos magnéticos nucleares son menores que los atómicos por tres órdenes de magnitud, la separación hiperfina es menor, por el mismo factor, que la separación debida a la interacción spin-órbita. En el capítulo 13 veremos que es posible describir cuantitativamente este efecto en términos de la mecánica cuántica de Schrödinger. De hecho, cada aspecto del comportamiento del átomo con un electrón se puede explicar detalladamente por las teorías de la física moderna. Como hemos visto, estas explicaciones

* En el experimento de Lamb se mide la frecuencia de los cuantos absorbidos en las transiciones entre los niveles $n = 2$, $l = 0$, $j = \frac{1}{2}$ y $n = 2$, $l = 1$, $j = \frac{1}{2}$. La diferencia en energía entre estos niveles es tan pequeña que la frecuencia se encuentra en el intervalo de las microondas. Ya que la medida de las frecuencias de radio se pueden efectuar muy precisamente, fue posible medir la diferencia de energía con cinco cifras significativas.

www.FreeLibros.me

pueden ser bastante complicadas. Afortunadamente el grado de complicación no aumenta proporcionalmente al número de electrones en el átomo.

BIBLIOGRAFIA

Leighton, R. B., *Principles of Modern Physics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1959.
Ruark, A. E., y H. C. Urey, *Atoms, Molecules and Quanta*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1930.
White, H. E., *An Introduction to Atomic Spectra*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1934.

EJERCICIOS

1. Use la ley de Ampere para calcular el campo magnético producido por una espira circular de corriente en un punto lejos de la espira sobre su eje de simetría. A continuación calcule el campo magnético en el mismo punto producido por un dipolo magnético ubicado en el centro de la espira y cuya dirección coincide con el eje de simetría. Muestre que ambos campos son iguales si la corriente en la espira y su área están relacionadas con el dipolo magnético como lo indica la ecuación (11–2). Generalice el argumento para mostrar que si esta relación se satisface, los dos campos son iguales en todos los puntos lejanos a la espira o al dipolo. Finalmente, muestre que esto también es cierto para una espira plana de corriente de forma arbitraria.

2. Calcule μ_l/L para un electrón que se mueve en la órbita elíptica $n = 2$, $n_\theta = 1$, de un átomo del tipo tratado en la teoría de Sommerfeld. Compare el resultado con la ecuación (11–7). *Nota:* Use algunas de las ecuaciones derivadas en los ejercicios 3 del capítulo 4 y 4 del capítulo 5.

3. En la primera nota al pie de página de la sección 3 se afirma que en el experimento de Stern y Gerlach no se pueden emplear átomos ionizados. Sin embargo, se podría pensar que el experimento se puede efectuar si el eje del campo magnético se comba de manera que siga la curvatura porducida por la fuerza Hev/c y si las dimensiones de la sección del haz son tales que las partículas no se alejan mucho del eje, puesto que todas ellas experimentarían la misma fuerza Hev/c. Sin embargo, el principio de incertidumbre muestra que es imposible producir un haz cuyas dimensiones transversales permanezcan suficientemente pequeñas. Demuestre esto último.

4. La precesión de Thomas también se puede describir en términos de una dilatación en el tiempo entre el marco de referencia donde el núcleo está en reposo y los marcos de referencia donde el electrón se encuentra instantáneamente en reposo, lo que conduce a una discrepancia entre los observadores respecto al tiempo necesario para que un observador efectúe una revolución alrededor del otro. Estudie detalladamente esta descripción y compare estos resultados con la ecuación (11–32).

5. Verifique la ecuación (11–44) y también la desigualdad vectorial que conduce a ella.

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 12

Partículas idénticas

1. Descripción cuántica de las partículas idénticas

Resta discutir un tema de la teoría de la mecánica cuántica antes de estudiar la estructura de los átomos con varios electrones. Se refiere al problema de cómo describir adecuadamente en la mecánica cuántica un sistema que contiene dos o más *partículas idénticas*. Con un ejemplo específico podemos ilustrar mejor la naturaleza de la pregunta.

Considere dos electrones confinados en una caja. Estas dos partículas idénticas se mueven dentro de la caja, rebotando en las paredes y, ocasionalmente, dispersándose mutuamente. En una descripción clásica del sistema, los electrones viajan en órbitas perfectamente definidas de manera que una observación continuada del sistema permite, en principio, distinguir un electrón del otro aun cuando sean idénticos. Esto es, si en algún tiempo designamos a uno de los electrones con 1 y al otro con 2, podríamos observar continuamente el sistema sin perturbarlo y, para cualquier tiempo posterior, podríamos decir cuál es el electrón 1 y cuál el electrón 2. Lo anterior es imposible en una descripción cuántica, ya que el principio de incertidumbre no permite observar constantemente el movimiento de los electrones sin cambiar completamente el comportamiento del sistema. En otras palabras, la extensión finita de las funciones de onda asociada con cada partícula conducirá a una superposición de estas funciones de modo que imposibilitaría decir cuál de las funciones está asociada con una partícula determinada. Encontramos un buen ejemplo en los dos electrones del átomo de He. Cuando este sistema se encuentra en su estado base las funciones de onda se superponen completamente. Por supuesto que también existe una superposición entre las funciones de onda asociada con el electrón y el protón en el átomo de H, aunque en este caso no surge problema alguno en distinguir una partícula de otra ya que no son idénticas.

Observamos que hay una diferencia fundamental entre las descripciones clásica y cuántica de un sistema que contiene partículas idénticas. Se debe formular una teoría de la mecánica cuántica que tome en cuenta explícitamente la *indistinguibilidad* de las partículas idénticas. Al hacerlo observamos que la teoría nos lleva a algunos efectos muy interesantes que no tienen análogo clásico ya que esta indistinguibilidad es una situación exclusivamente cuántica.

www.FreeLibros.me

Busquemos un modo de escribir la función de onda que describa dos partículas idénticas encerradas en una caja, y que exprese matemáticamente las ideas desarrolladas anteriormente. Para simplificar, supondremos que las partículas no interaccionan mutuamente. De este modo, las partículas rebotarán en las paredes de la caja y sus funciones de onda se superpondrán aunque no haya dispersión mutua. A pesar de que la situación es muy simple, mostraremos posteriormente que los resultados poseen una validez general. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este sistema es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi_T}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2\psi_T}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2\psi_T}{\partial z_1^2}\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi_T}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2\psi_T}{\partial y_2^2}+\frac{\partial^2\psi_T}{\partial z_2^2}\right)+V_T\psi_T=E_T\psi_T \quad (12\text{–}1)$$

donde

m = la masa de cualquier partícula
x_1, y_1, z_1 = las coordenadas de la partícula 1
x_2, y_2, z_2 = las coordenadas de la partícula 2

Hemos escrito esta ecuación directamente de (10–8) para el caso $N = 2$ y $m_1 = m_2 = m$. Ya que en la ecuación se identifica a las partículas mediante los índices 1 y 2, corremos el peligro de violar el requisito de la indistinguibilidad, lo que posteriormente se discutirá cuidadosamente. En la ecuación (12–1)

$\psi_T(x_1, \ldots, z_2)$ = la función propia del sistema
$V_T(x_1, \ldots, z_2)$ = la energía potencial del sistema
E_T = la energía total del sistema

Al suponer que las dos partículas no interaccionan entre sí, la energía potencial del sistema es, simplemente, igual a la suma de la energía potencial de interacción de cada partícula con las paredes de la caja. Cada una de las energías potenciales dependerá sólo de las coordenadas de la partícula y, puesto que son idénticas, las dos funciones de potencial tienen la misma forma. Así,

$$V_T(x_1, \ldots, z_2) = V(x_1, y_1, z_1) + V(x_2, y_2, z_2) \quad (12\text{–}2)$$

El lector mostrará que las soluciones a la ecuación (12–1) con el potencial (12–2) se pueden escribir como

$$\psi_T(x_1, \ldots, z_2) = \psi(x_1, y_1, z_1)\,\psi(x_2, y_2, z_2) \quad (12\text{–}3)$$

donde $\psi(x_1, y_1, z_1)$ y $\psi(x_2, y_2, z_2)$ satisfacen idénticas ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo. Estas ecuaciones tienen tres coordenadas espaciales como variables independientes y, en consecuencia, cada una de ellas necesita tres números cuánticos para especificar la forma matemática

www.FreeLibros.me

de la dependencia de estas variables. Es necesario, además, un número cuántico adicional para especificar la orientación del vector del impulso angular de spin de la partícula.* Emplearemos alguna de las letras α, β, γ, δ, . . . para designar un conjunto particular de los cuatro números cuánticos que especifican el estado de una partícula. Así, una función propia para la partícula 1 se escribirá

$$\psi_\alpha(x_1, y_1, z_1)$$

la que brevemente podemos escribir como

$$\psi_\alpha(1)$$

Esta función propia expresa que la partícula 1 se encuentra en el estado correspondiente a los números cuánticos α. El hecho de que la partícula 2 se encuentre en el estado β se expresará por

$$\psi_\beta(2)$$

La función propia total $\psi_T(x_1, \ldots, z_2)$ que corresponde a la situación en que la partícula 1 se encuentra en el estado α y la partícula 2 en el estado β

$$\psi_T(x_1, \ldots, z_2) = \psi_\alpha(1)\, \psi_\beta(2)$$

o, simplemente

$$\psi_{\alpha\beta} \equiv \psi_\alpha(1)\, \psi_\beta(2) \tag{12–4}$$

Por otra parte la función propia que indica que la partícula 1 se encuentra en el estado β y la partícula 2 en el estado α es

$$\psi_{\beta\alpha} \equiv \psi_\beta(1)\, \psi_\alpha(2) \tag{12–5}$$

Es interesante calcular las funciones de densidad de probabilidad para los sistemas descritos por las dos funciones propias (12–4) y (12–5). Estas son

$$\psi^*_{\alpha\beta}\psi_{\alpha\beta} = \psi^*_\alpha(1)\, \psi^*_\beta(2)\, \psi_\alpha(1)\, \psi_\beta(2) \tag{12–6}$$

y

$$\psi^*_{\beta\alpha}\psi_{\beta\alpha} = \psi^*_\beta(1)\, \psi^*_\alpha(2)\, \psi_\beta(1)\, \psi_\alpha(2) \tag{12–7}$$

Puesto que las dos partículas idénticas no son distinguibles podemos intercambiar los números que las designan sin modificar ninguna cantidad física mensurable como lo es la densidad de probabilidad. Efectuando esta operación en $\psi^*_{\alpha\beta}\, \psi_{\alpha\beta}$ obtenemos

$$\psi^*_{\alpha\beta}\psi_{\alpha\beta} = \psi^*_\alpha(1)\, \psi^*_\beta(2)\, \psi_\alpha(1)\, \psi_\beta(2) \xrightarrow[2\to 1]{1\to 2} \psi^*_\alpha(2)\, \psi^*_\beta(1)\, \psi_\alpha(2)\, \psi_\beta(1) = \psi^*_{\beta\alpha}\psi_{\beta\alpha}$$

Por las ecuaciones (12–6) y (12–7) es claro que $\psi^*_{\alpha\beta}\, \psi_{\alpha\beta} \neq \psi^*_{\beta\alpha}\, \psi_{\beta\alpha}$, de manera que el cambio de designación de las partículas cambia la función de

* Además de los electrones, otras partículas también tienen spin.

www.FreeLibros.me

densidad de probabilidad calculada a partir de la función propia (12–4), lo mismo es cierto de (12–5). Por lo tanto, debemos concluir, que estas funciones son inaceptables para describir un sistema que contiene dos partículas idénticas. Así, se ha justificado la sospecha expresada después de la ecuación (12–1).

2. Funciones propias simétricas y antisimétricas

Es posible construir una función propia que satisfaga la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (12–1), de manera que la función de densidad de probabilidad permanezca invariante al cambiar la designación de las partículas. De hecho, hay dos maneras de lograrlo. Considere las dos combinaciones lineales de $\psi_{\alpha\beta}$ y $\psi_{\beta\alpha}$,

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{\alpha\beta} + \psi_{\beta\alpha}] \tag{12–8}$$

y

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{\alpha\beta} - \psi_{\beta\alpha}] \tag{12–9}$$

Si el lector ha hecho el ejercicio sugerido después de la ecuación (12–2), estará convencido de que las funciones $\psi_{\alpha\beta}$ y $\psi_{\beta\alpha}$ están degeneradas. En cualquier forma, es fácil darse cuenta de que la energía total de un sistema que contiene una partícula en el estado α y otra en el estado β, no dependerá de cuál sea la partícula que se encuentre en un estado u otro, si las dos partículas son idénticas. A esta situación se la denomina *degeneración de intercambio.* En la nota al pie de la página 193 hemos mostrado que cualquier combinación lineal de funciones degeneradas será una solución a la ecuación de Schrödinger. En consecuencia, las dos nuevas funciones propias ψ_S y ψ_A serán también soluciones a la ecuación (12–1). Por supuesto, se encuentran degeneradas. Las densidades de probabilidad que se obtienen con estas funciones propias son

$$\psi_S^*\psi_S = \tfrac{1}{2}(\psi_{\alpha\beta}^*\psi_{\alpha\beta} + \psi_{\beta\alpha}^*\psi_{\beta\alpha}) + \tfrac{1}{2}(\psi_{\beta\alpha}^*\psi_{\alpha\beta} + \psi_{\alpha\beta}^*\psi_{\beta\alpha}) \tag{12–10}$$

y

$$\psi_A^*\psi_A = \tfrac{1}{2}(\psi_{\alpha\beta}^*\psi_{\alpha\beta} + \psi_{\beta\alpha}^*\psi_{\beta\alpha}) - \tfrac{1}{2}(\psi_{\beta\alpha}^*\psi_{\alpha\beta} + \psi_{\alpha\beta}^*\psi_{\beta\alpha}) \tag{12–11}$$

Se puede mostrar fácilmente que si $\psi_{\alpha\beta}$ y $\psi_{\beta\alpha}$ están normalizadas, ψ_S y ψ_A también lo están. Además, puesto que, como se ve por (12–4) y (12–5), $\psi_{\alpha\beta} \to \psi_{\beta\alpha}$ y $\psi_{\beta\alpha} \to \psi_{\alpha\beta}$ al cambiar la designación de las partículas, se observa fácilmente que tanto $\psi_S^*\psi_S$ como $\psi_A^*\psi_A$ permanecen invariantes al efectuar esta operación. Lo mismo es cierto de otras cantidades mensurables, tales como el flujo de probabilidad. De esta forma, tanto las funciones propias ψ_S y ψ_A como las funciones de onda asociadas con ellas, conducen a una descripción aceptable de un sistema que contiene partículas idénticas. Aunque los números 1 y 2 aparecen cuando se escribe con detalle las expresiones para

www.FreeLibros.me

ψ_S y ψ_A, esta designación no viola los requisitos de indistinguibilidad, ya que el valor de cualquier cantidad mensurable que se puede obtener de las funciones propias es independiente de la manera de designar a las partículas. Por lo que respecta a las funciones mismas, el intercambio en la designación deja invariable a ψ_S y multiplica por -1 a ψ_A esto es

$$\begin{aligned} \psi_S &\xrightarrow[\substack{1\to 2\\ 2\to 1}]{} \psi_S \\ \psi_A &\rightarrow -\psi_A \end{aligned} \tag{12–12}$$

La función propia ψ_S recibe el nombre de *función propia simétrica* y la función propia ψ_A el de *función propia antisimétrica*. No es objetable este comportamiento de ψ_A ya que una función propia no es físicamente mensurable.

Puede obtenerse una interpretación instructiva del papel que hacen los paréntesis primero y segundo en las expresiones (12–10) y (12–11) para $\psi_S^*\psi_S$ y $\psi_A^*\psi_A$ considerándolas en el límite clásico. Ahí las funciones de onda de una partícula están suficientemente localizadas, de modo que no se superponen las funciones de onda asociadas con las dos partículas. Esto es, existirán dos regiones del espacio, A y B, que no se superponen, como se ilustra en la figura 12–1, de manera que $\psi_\alpha(1)$ o $\psi_\alpha(2)$ es distinta de cero sólo si las coordenadas de la partícula 1 o la partícula 2 se encuentran dentro de la región A y $\psi_\beta(1)$ o $\psi_\beta(2)$ es distinta de cero si las coordenadas de la partícula 1 o la partícula 2 se encuentran en la región B. Entonces, la función propia de dos partículas $\psi_{\alpha\beta} = \psi_\alpha(1)\,\psi_\beta(2)$ será igual a cero, a menos que las coordenadas de la partícula 1 se encuentren en A y las coordenadas de la partícula 2

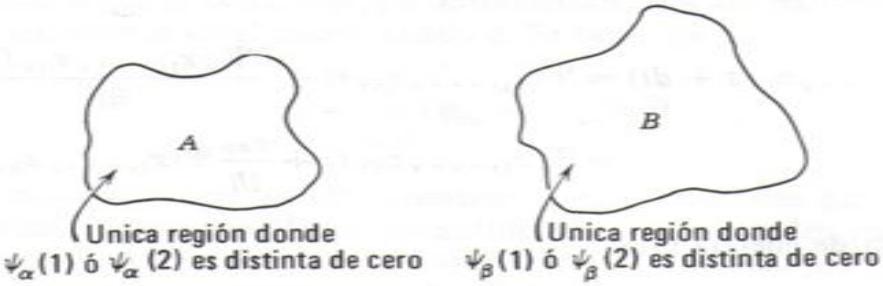

Figura 12-1. Ilustración del límite clásico de un sistema formado por dos partículas indistinguibles.

en B. Si esto es así, $\psi_{\beta\alpha} = \psi_\beta(1)\,\psi_\alpha(2)$ debe ser igual a cero. Entonces, si no existe una región donde ambas funciones propias para una partícula tengan valores distintos de cero, cualquiera de las dos funciones propias para dos partículas, $\psi_{\alpha\beta}$ o $\psi_{\beta\alpha}$, será siempre igual a cero. De este modo, el segundo paréntesis de las expresiones para $\psi_S^*\psi_S$ y $\psi_A^*\psi_A$ siempre será igual a cero y tendremos

$$\psi_S^*\psi_S = \psi_A^*\psi_A = \tfrac{1}{2}(\psi_{\alpha\beta}^*\psi_{\alpha\beta} + \psi_{\beta\alpha}^*\psi_{\beta\alpha}) \tag{12–13}$$

www.FreeLibros.me

Vemos que en el límite clásico son iguales las expresiones cuánticas para las densidades de probabilidad de las funciones propias simétricas y antisimétricas. Se puede mostrar fácilmente que su valor común (el primer paréntesis en las expresiones generales para $\psi_S^*\psi_S$ y $\psi_A^*\psi_A$) es completamente análogo a la expresión clásica para la densidad de probabilidad de un sistema formado por dos partículas idénticas si una de ellas se encuentra en el estado α y la otra en el estado β, sin estipular el estado en el que se encuentra cada partícula. La cantidad que es responsable de la diferencia entre $\psi_S^*\psi_S$ y $\psi_A^*\psi_A$ cuando se superponen las dos funciones propias de una partícula (el segundo paréntesis de la expresión general) contiene términos que corresponden a alguna clase de interferencia entre las dos funciones propias $\psi_{\alpha\beta}$ y $\psi_{\beta\alpha}$ de dos partículas. Su aparición se debe al requisito cuántico de la indistinguibilidad.

3. El principio de exclusión

Ahora mostraremos que si en un tiempo dado la función de onda $\Psi(x_1, \ldots, z_N, t)$ que describe un sistema formado por N partículas idénticas es simétrica o antisimétrica respecto al intercambio de las designaciones de las partículas, entonces invariablemente la función de onda preservará esta simetría. Para hacerlo, consideremos la ecuación diferencial que describe la dependencia en el tiempo de $\Psi(x_1, \ldots, z_N, t)$, que se puede escribir como

$$e_{\text{op}}\Psi(x_1, \ldots, z_N, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x_1, \ldots, z_N, t)}{\partial t}$$

Esta ecuación permite calcular el valor de la función al tiempo $t + dt$ siempre que se conozca su valor al tiempo t:

$$\Psi(x_1, \ldots, z_N, t + dt) = \Psi(x_1, \ldots, z_N, t) + \frac{\partial \Psi(x_1, \ldots, z_N, t)}{\partial t} dt$$

$$= \Psi(x_1, \ldots, z_N, t) + \frac{e_{\text{op}}}{i\hbar} \Psi(x_1, \ldots, z_N, t)\, dt$$

El operador de energía total

$$e_{\text{op}} = \sum_{i=1}^{N} -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}\right) + V(x_1, \ldots, z_N, t)$$

es simétrico respecto al intercambio de la designación de dos partículas cualesquiera, ya que éste dejará invariante la suma. Lo mismo es cierto del término correspondiente a la energía potencial, ya que su valor no puede depender de la forma de designar las partículas idénticas, aun cuando las partículas interaccionan entre sí. Ya que e_{op} es un operador simétrico, el término $(e_{\text{op}}/i\hbar)\Psi(x_1, \ldots, z_N, t)$ tiene la misma simetría que $\Psi(x_1, \ldots, z_N, t)$. En consecuencia, si $\Psi(x_1, \ldots, z_N, t)$ es simétrica, $\Psi(x_1, \ldots, z_N, t + dt)$ será simétrica; si $\Psi(x_1, \ldots, z_N, t)$ es antisimétrica, $\Psi(x_1, \ldots, z_N, t + dt)$ será antisimétrica. Continuando el proceso de integración, se muestra

www.FreeLibros.me

que se debe preservar el carácter de simetría de la función de onda. Para el caso particular de una función de onda de estado propio

$$\Psi(x_1, \ldots, z_N, t) = e^{-iEt/\hbar}\,\psi(x_1, \ldots, z_N)$$

observamos que el carácter de simetría de la función propia es igual al de la función de onda.

Sabemos que la función propia de un sistema formado por dos partículas idénticas que no interaccionan debe ser simétrica o antisimétrica. Precisamente hemos mostrado en el caso más general de un sistema formado por varias partículas idénticas que interaccionan entre sí, que la función propia *puede* ser simétrica o antisimétrica. Esto es, hemos mostrado que una función propia preservará su carácter de simetría, será siempre simétrica o antisimétrica. Surge entonces la pregunta: ¿tienen una simetría definida las funciones que describen sistemas reales formados por varias partículas idénticas con interacción? Si éste es el caso ¿son simétricas o antisimétricas? Se conoce la respuesta a esta pregunta. Sin embargo, no la da la teoría de la mecánica cuántica, sino el experimento.

A partir del análisis de la información experimental respecto a los niveles de ciertos átomos, Pauli enunció (1925) el *principio de exclusión*

En un átomo con varios electrones no puede existir más de un electrón en un mismo estado cuántico.

El análisis de otros datos experimentales permitió establecer que el principio de exclusión es una propiedad de los electrones y no de los átomos: el principio de exclusión opera en cualquier sistema que contenga electrones. Consideremos ahora la función propia antisimétrica para dos partículas (12–9) cuando se encuentran en el mismo estado α. Se tiene que

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{\alpha\alpha} - \psi_{\alpha\alpha}) \equiv 0 \qquad (12\text{–}14)$$

O sea, la función propia es idénticamente igual a cero: dos partículas que están descritas por una función propia antisimétrica no se pueden encontrar en el mismo estado. Así, la propiedad de los electrones expresada por el principio de exclusión es precisamente la propiedad de las funciones propias antisimétricas. Concluimos, entonces, que:

Un sistema que contiene varios electrones debe estar descrito por una función propia antisimétrica.

Ya conocemos la forma de las funciones propias antisimétricas para un sistema que contiene dos partículas sin interacción. Observamos que se puede escribir como un determinante

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\alpha(2) \\ \psi_\beta(1) & \psi_\beta(2) \end{pmatrix} \qquad (12\text{–}15)$$

www.FreeLibros.me

ya que, al desarrollarlo, se tiene

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(1)\,\psi_\beta(2) - \psi_\beta(1)\,\psi_\alpha(2)] = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{\alpha\beta} - \psi_{\beta\alpha}]$$

Para un sistema que contenga N partículas idénticas sin interacción, la función propia antisimétrica se puede escribir en forma análoga como

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{pmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\alpha(2) & \cdots & \psi_\alpha(N) \\ \psi_\beta(1) & \psi_\beta(2) & \cdots & \psi_\beta(N) \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ \psi_\nu(1) & \psi_\nu(2) & \cdots & \psi_\nu(N) \end{pmatrix} \tag{12–16}$$

A esta expresión se le conoce con el nombre de *determinante de Slater*. Puesto que el determinante consiste de sumas y diferencias de $N!$ términos formados por los productos de N funciones propias para una partícula, tales como $\psi_\alpha(1)\,\psi_\beta(2)\cdots\psi_\nu(N)$, y términos semejantes obtenidos al permutar las designaciones de las partículas, ψ_A es una simple combinación lineal de funciones propias degeneradas. En consecuencia, ψ_A será también una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. La constante $1/\sqrt{N!}$ hace que ψ_A esté normalizada si cada uno de los productos de funciones propias para una partícula está normalizado. Puesto que el determinante se cancela si son idénticos dos renglones cualesquiera, ψ_A tendrá la propiedad requerida de cancelarse si más de una partícula se encuentra en el mismo estado (por ejemplo, si $\beta = \alpha$).

La mayoría de los cálculos en la mecánica cuántica se pueden formular de manera que las interacciones entre las partículas sean consideradas como perturbaciones. Entonces, las funciones de la forma (12–16) se pueden emplear como funciones propias no perturbadas. Por otra parte, si no se pueden ignorar las interacciones entre las partículas, las funciones propias antisimétricas no se podrán escribir en la forma (12–16), ya que $\psi_\alpha(1)\,\psi_\beta(2)\cdots\psi_\nu(N)$ y todos los demás términos no serán soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. En este caso, también se pueden obtener funciones antisimétricas que se cancelan idénticamente si dos partículas se encuentran en el mismo estado, tomando sumas y diferencias de las $N!$ soluciones degeneradas a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, que siempre existirán para un sistema formado por N partículas idénticas.

En éste y los capítulos siguientes estudiaremos los sistemas con varios electrones que condujeron a Pauli, entre otros, a la conclusión de que deben ser descritos por funciones antisimétricas. Veremos que esta propiedad de los electrones tiene un lugar extremadamente importante en la forma de comportamiento del sistema. Los átomos y, en consecuencia, todo el universo serían

www.FreeLibros.me

radicalmente distintos si los electrones demandaran una descripción en términos de funciones propias simétricas en lugar de antisimétricas.

El carácter de simetría de las partículas diferentes de electrones es un problema que sólo puede dilucidarse experimentalmente. Se encuentra que sistemas formados por protones (núcleos de átomos de H), o neutrones (partículas no cargadas cuya masa es aproximadamente igual a la del protón), entre otras partículas, también deben ser descritos por funciones antisimétricas. De esta manera, una función propia que describa un sistema formado por protones sin interacción debe tener la forma (12–16). Por el otro lado, se encuentra que sistemas formados por cuantos, por ejemplo, se debe describir en términos de funciones propias simétricas. También los sistemas formados por conjuntos muy ligados de un número par de partículas antisimétricas (por ejemplo, un sistema compuesto de partículas alfa, que consisten de dos neutrones y dos protones) estará descrita por funciones propias simétricas respecto al intercambio de la designación de cada uno de los conjuntos de partículas, ya que este intercambio es equivalente a un número par de intercambios en las designaciones de partículas antisimétricas, lo que implica multiplicar la función propia del sistema por una potencia par de -1. Puede obtenerse una función propia simétrica para un sistema formado por N partículas sin interacción tomando la suma de $N!$ términos, que se obtienen a partir del producto $\psi_\alpha(1)\,\psi_\beta(2)\cdots\psi_\nu(N)$ permutando las designaciones de las partículas, y dividiendo por la constante de normalización $\sqrt{N!}$. Todavía se puede construir una función propia cuando las partículas interaccionan, tomando la suma de las $N!$ soluciones degeneradas a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Es interesante observar que debe haber alguna relación entre el carácter de simetría de una partícula y su impulso angular intrínseco de spin, ya que todas las partículas antisimétricas tienen spin semientero, como el electrón, mientras que el spin de las partículas simétricas es entero o cero. Actualmente no se ha llegado a entender completamente cuál sea la causa de esta relación. En consecuencia, se debe considerar el carácter de simetría de una partícula como una propiedad tan básica como lo es su masa, carga y spin, que sólo se pueden determinar experimentalmente.

4. Otras propiedades de las funciones propias antisimétricas

Como se mencionó en la sección 3 del capítulo 11, frecuentemente conviene escribir la función propia completa como el producto de una función propia espacial y una función propia de spin. Esto será posible siempre que no haya una interacción que dependa del spin (por ejemplo, la interacción spin-órbita) de manera que su componente z permanezca constante y m_s sea un buen número cuántico. Por ejemplo, las funciones propias para un átomo con un electrón $\psi_{nlm_lm_s}$ siempre se pueden escribir como

$$\psi_{nlm_lm_s} = \psi_{nlm_l}\sigma_{m_s}$$

www.FreeLibros.me

ya que, si las $\psi_{nlm_lm_s}$ son válidas, m_s debe ser un número cuántico apropiado. En general, y siempre que se cumpla esta restricción, podemos escribir la función propia para una partícula, que designaremos por 1, como

$$\psi_\alpha(1) = \psi_a(1)\,\sigma_{m_{s_a}}(1) \tag{12–17}$$

donde el número cuántico a comprende los tres números cuánticos espaciales. Considere ahora un sistema formado por dos partículas sin interacción. Conforme a (12–4) y (12–17), podemos escribir las funciones propias que describen a este sistema como el producto

$$\psi_{\alpha\beta} = \psi_\alpha(1)\,\psi_\beta(2) = \psi_a(1)\,\psi_b(2)\,\sigma_{m_{s_a}}(1)\,\sigma_{m_{s_b}}(2)$$

Empleando una notación análoga a la usada en (12–4), esta función, se puede escribir como

$$\psi_{\alpha\beta} = \psi_{ab}\sigma_{m_{s_a}m_{s_b}} \tag{12–18}$$

Esta no es una función propia aceptable para un sistema formado por dos electrones (o de cualesquiera dos partículas idénticas antisimétricas), ya que no es antisimétrica respecto al intercambio de los números 1 y 2 que designan los electrones. Sin embargo, es posible construir una función propia antisimétrica combinando linealmente el producto de una función propia espacial simétrica o antisimétrica y una función propia de spin de simetría opuesta. Ciertamente este producto será antisimétrico. Consideremos las funciones propias de spin. Ya que para cada electrón m_s puede tomar precisamente dos valores, $-\frac{1}{2}$ y $+\frac{1}{2}$, se tienen cuatro posibilidades

$$\sigma_{+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}},\ \sigma_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}},\ \sigma_{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}},\ \sigma_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$$

Con éstas podemos construir cuatro funciones propias distintas de spin

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} - \sigma_{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}) \qquad \text{singulete}$$

$$\left.\begin{array}{c} \sigma_{+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} + \sigma_{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}) \\ \sigma_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \end{array}\right\} \qquad \text{triplete} \tag{12–19}$$

Las cuatro están normalizadas. La primera, que recibe el nombre de función propia de spin de *singulete*, es antisimétrica respecto al intercambio de la designación de las partículas. Las tres últimas corresponden a funciones propias de spin de *triplete* y son simétricas respecto al intercambio en la designación de las partículas.

Para que la función propia completa sea antisimétrica, multiplicamos una función propia antisimétrica de spin por una función propia simétrica espacial,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} + \psi_{ba}) \tag{12–20}$$

www.FreeLibros.me

y cada una de las funciones propias simétricas de spin las multiplicamos por una función propia antisimétrica espacial

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} - \psi_{ba}) \tag{12–21}$$

de manera que se tienen cuatro funciones propias completas y antisimétricas para un sistema formado por dos electrones sin interacción:

$$\psi_A = \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} + \psi_{ba})\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} - \sigma_{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} - \psi_{ba})\sigma_{+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} - \psi_{ba})\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} + \sigma_{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} - \psi_{ba})\sigma_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \end{array} \tag{12–22}$$

La primera corresponde a un *estado de singulete* y las otras tres corresponden a *estados de triplete*. Las cuatro están normalizadas, son ortogonales y se encuentran degeneradas.

Puede obtenerse una interpretación física para los estados de singulete y triplete al calcular para cada estado la magnitud y la componente z del *vector de impulso angular total de spin* $\mathbf{S}'$ que es

$$\mathbf{S}' = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \tag{12–23}$$

la suma de los impulsos angulares de spin de los dos electrones. Puesto que no hemos estudiado todavía las propiedades de las funciones propias de spin, no podemos efectuar el cálculo detalladamente; sólo enunciaremos los resultados y argumentaremos sobre su validez. Sin duda el lector podrá aceptar los resultados, ya que son análogos a los que se tienen para la suma de los vectores de impulso angular y de spin para formar el vector de impulso angular total. Se encuentra que la magnitud y la componente z del vector de impulso angular total de spin son

$$\begin{aligned} S' &= \sqrt{s'(s'+1)}\,\hbar \\ S'_z &= m'_s\hbar \end{aligned} \tag{12–24}$$

donde

$$m'_s = -s', \ldots, +s'$$

y

$$s' = 0, 1 \tag{12–25}$$

www.FreeLibros.me

para los estados de singulete y triplete, respectivamente. El mismo tipo de argumentos que se emplearon para obtener la ecuación (11–44) se puede utilizar para obtener (12–25). Estas reglas se pueden representar mediante diagramas en donde dos vectores, que no deben interpretarse como vectores de impulso angular, de longitud $s = \frac{1}{2}$ se suman para formar un vector de longitud $s' = 0$ o 1, lo que se ilustra en la figura 12–2. Para el estado de singulete, $m_s' = 0$. En la figura 12–1 se muestra el valor del número cuántico para los estados de triplete. Pueden interpretarse fácilmente las propiedades de los estados correspondientes a las funciones propias de spin $\sigma_{+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}$ o $\sigma_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$. En estos estados, las componentes z de los vectores de spin de los dos electrones tienen el mismo signo. Los spins se combinan para formar el spin total cuya componente z es $m_s' = \pm 1$, que es el doble de la que corresponde a un electrón. El número cuántico que especifica la magnitud del vector total de spin para estos dos estados debería ser necesariamente $s' = 1$. Es claro que $m_s' = 0$ para los estados cuya función propia del spin es

$$(1/\sqrt{2})(\sigma_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} - \sigma_{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}) \quad \text{o} \quad (1/\sqrt{2})(\sigma_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} + \sigma_{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}})$$

Aunque no es obvio por qué el número cuántico que especifica la magnitud del vector total de spin sea $s' = 0$ para el estado antisimétrico y $s' = 1$ para el simétrico, son resultados que se siguen directamente de la teoría de las funciones propias de spin.* Frecuentemente se hace referencia a los estados de singulete y de triplete como aquellos en los que los vectores de spin de los electrones se encuentran antiparalelos y paralelos, respectivamente. Aunque esto no debe tomarse literalmente, la descripción encierra rastros de verdad y proporciona una imagen física útil.

Si los vectores de spin de los dos electrones son "paralelos" la función propia de spin es simétrica y, para que la función completa sea antisimétrica, la función propia espacial debe ser antisimétrica. Consideremos esta situación

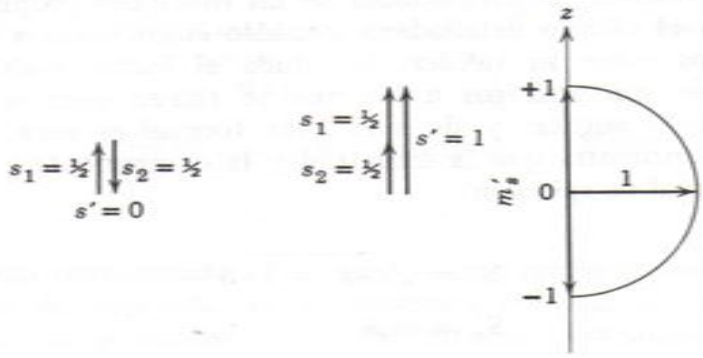

Figura 12-2. Diagramas de suma vectorial para los números cuánticos $s_1 = \frac{1}{2}$ y $s_2 = \frac{1}{2}$.

* Estos resultados son también ciertamente razonables desde un punto de vista intuitivo, ya que significan que las tres funciones propias simétricas de spin corresponden al mismo valor del número cuántico $s' = 1$, esto es, a la misma situación física en la que los vectores de spin son "paralelos".

www.FreeLibros.me

TABLA 12–1
Números cuánticos para los estados de singulete y triplete

Funciones propias de spin	Designación	s'	m'_s
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} - \sigma_{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}})$	Singulete	0	0
$\sigma_{+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}$	triplete	1	+1
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} + \sigma_{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}})$	triplete	1	0
$\sigma_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$	triplete	1	−1

cuando los dos electrones se encuentran muy próximos entre sí, esto es, $x_1 \simeq x_2$, $y_1 \simeq y_2$, $z_1 \simeq z_2$. Entonces $\psi_a(1) \simeq \psi_a(2)$ y $\psi_b(1) \simeq \psi_b(2)$. Así

$$\psi_{ab} = \psi_a(1)\,\psi_b(2) \simeq \psi_a(2)\,\psi_b(1) = \psi_b(1)\,\psi_a(2) = \psi_{ba}$$

En este caso el valor de la función propia espacial antisimétrica es

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} - \psi_{ba}) \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} - \psi_{ab}) = 0$$

En consecuencia, la densidad de probabilidad será muy pequeña cuando los dos electrones se encuentran muy próximos, de modo que los electrones se comportan como si se repelieran. Esta es totalmente ajena a la repulsión de Coulomb, puesto que desde el principio de esta sección hemos supuesto que no existe interacción alguna entre los electrones. Además, se puede mostrar fácilmente que, si es simétrica la función propia espacial que describe dos electrones, el valor de la densidad de probabilidad es el doble del valor promedio cuando se encuentran muy próximos. Así, si los vectores de spin de los dos electrones son "antiparalelos", la función propia de spin es antisimétrica, la función propia espacial es simétrica y las dos partículas se comportan como si se atrajesen, puesto que es grande la probabilidad de encontrarlas juntas. Observamos que el requisito de que la función propia completa sea antisimétrica con respecto al intercambio en la designación de los dos electrones produce un acoplamiento entre sus spins y sus coordenadas espaciales. Se comportan como si estuvieran bajo el influjo de una fuerza cuyo signo depende de la orientación relativa de sus spins. Esta recibe el nombre de *fuerza de intercambio*. Es un efecto netamente cuántico y no tiene análogo clásico. Sin embargo, lleva a resultados observables directamente, como los que describiremos en la siguiente sección.

www.FreeLibros.me

5. El átomo de helio

El sistema real más simple que contiene dos partículas idénticas es el átomo neutro de He. En la parte derecha del diagrama de niveles de energía de la figura 12–3 se muestran las energías del estado base y la de los cuatro primeros estados excitados del He. La energía del estado base se obtiene experimentalmente al medir la energía necesaria para ionizar el He y obtener He^+. La suma de esta energía de ionización y la energía del electrón en el estado base del He^+, que es -54.1 ev, es igual a la energía del estado base del

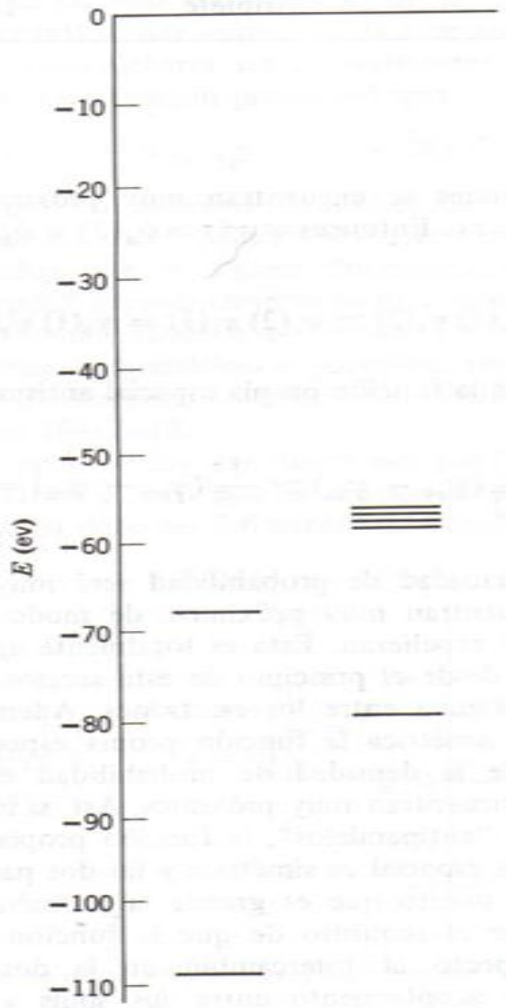

Figura 12-3. A la derecha, diagrama de niveles de energía donde se muestran el estado base y los primeros cuatro estados excitados del átomo de helio. A la izquierda, los niveles de energía predichos sin tomar en cuenta la interacción entre los electrones.

www.FreeLibros.me

He.* El análisis del espectro de He permite determinar las energías de los estados excitados con respecto a la del estado base.

Para tratar el átomo de He con la teoría de la mecánica cuántica suponemos que los electrones no interaccionan entre sí y que se mueven bajo el influjo de la fuerza de Coulomb producida por el núcleo. La interacción entre los electrones será tratada como perturbación. Entonces, consideramos un sistema no perturbado cuyos estados de energía están dados por la suma de dos expresiones de la forma (10–38). Esto es,

$$E = -\mu Z^2 e^4/2\hbar^2 n_1^2 - \mu Z^2 e^4/2\hbar^2 n_2^2 \tag{12–26}$$

donde $n_1 = 1, 2, 3, \ldots$; $n_2 = 1, 2, 3, \ldots$ y $Z = 2$. En el estado base de este sistema, n_1 y n_2 son iguales a 1. En el primer estado excitado uno de los números cuánticos es igual a 1 y el otro es igual a 2. En el diagrama de la parte izquierda de la figura 12–3 se muestran las energías predichas por esta aproximación. Es claro que el sistema no perturbado describe pobremente los niveles de energía del sistema real, lo que significa que la interacción entre los dos electrones tiene un papel importante en el comportamiento del átomo de He.

Las interacciones consisten fundamentalmente en la mutua repulsión de Coulomb entre los electrones cargados. Origina una energía potencial positiva que eleva la energía total del átomo. Además, existen interacciones magnéticas que dependen de los spins de los electrones cuya magnitud es pequeña en comparación con la interacción de Coulomb y se puede despreciar. La energía de perturbación es, entonces,

$$v = \frac{(-e)(-e)}{r_{12}} = \frac{e^2}{r_{12}} \tag{12–27}$$

donde r_{12} es la distancia que separa a los electrones. Como funciones no perturbadas debemos tomar las funciones propias antisimétricas (12–22) y, para cada estado del sistema no perturbado habrá, en general, varias funciones propias degeneradas. La degeneración se debe a la degeneración de intercambio y también a la degeneración de los estados de energía de los electrones individuales respecto a los números cuánticos l y m_l.

Sin embargo, al estado base del sistema no perturbado le corresponde sólo una función propia. No se presenta la degeneración lm_l ya que $n_1 = n_2 = 1$, y los otros números cuánticos espaciales sólo pueden tomar el valor $l_1 = m_{l_1} = l_2 = m_{l_2} = 0$. Además, puesto que los números cuánticos de un electrón son iguales a los del otro, por la ecuación (12–22) se puede ver que no se presenta tampoco degeneración de intercambio y sólo se tiene una función antisimétrica

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{aa} + \psi_{aa})\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} - \sigma_{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}})$$

* La magnitud de la energía del estado base se define como la energía necesaria para ionizar completamente el átomo de He para formar He^{2+}. Sin embargo, en espectroscopia se define convencionalmente la energía del estado base como la requerida para ionizar una sola vez al átomo; un espectroscopista asignaría el valor $E = 0$ a nuestro valor $E = -54.1$ ev.

www.FreeLibros.me

El estado base del sistema no perturbado sólo puede ser un estado de singulete, ya que la parte antisimétrica de la función propia, cuyo uso requiere el principio de exclusión, se cancela idénticamente en los estados de triplete cuando son iguales los números cuánticos espaciales de los electrones. Que sean iguales los números cuánticos espaciales de los dos electrones no contradice el principio de exclusión, ya que son diferentes los números cuánticos de spin. Observamos que las propiedades del spin intervienen *implícitamente*, aun en las propiedades de la parte espacial de las funciones propias no perturbadas. Sin embargo, no es necesario considerar *explícitamente* el spin al calcular el corrimiento en la energía que resulta de la perturbación. Ya que la perturbación no depende del spin, las funciones propias del spin intervienen sólo como un producto en el término $\psi^* v \psi$, que se debe tomar en cuenta en el cálculo. Ya que están normalizadas las funciones propias del spin su producto es igual a la unidad. En consecuencia, podemos ignorar simplemente la parte del spin de la función propia completa antisimétrica, y tomar como función propia no perturbada

$$\psi_{aa} = \psi_{100}(1)\,\psi_{100}(2) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 e^{-Zr_1/a_0} e^{-Zr_2/a_0}$$

donde hemos empleado (10–39) para evaluar ψ_{100}. Conforme a la extensión a tres dimensiones de la ecuación (9–13), el desplazamiento debido a la perturbación es

$$E' - E \simeq \iint \psi^*_{100}(1)\,\psi^*_{100}(2)\,\frac{e^2}{r_{12}}\,\psi_{100}(1)\,\psi_{100}(2)\,d\tau_1\,d\tau_2$$

donde

$$d\tau_1 = r_1^2 \operatorname{sen}\theta_1\,dr_1\,d\theta_1\,d\phi_1$$
$$d\tau_2 = r_2^2 \operatorname{sen}\theta_2\,dr_2\,d\theta_2\,d\phi_2$$

Al evaluar la integral obtenemos

$$E' - E \simeq \frac{5}{4} Z \frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$$

Combinando este resultado con (12–26) para $n_1 = n_2 = 1$, tenemos

$$E' \simeq \left(-2Z^2 + \frac{5}{4}Z\right)\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \tag{12–28}$$

El valor de E' calculado a partir de esta ecuación con $Z = 2$ concuerda dentro de un 5 por ciento con la energía del estado base del He. Se obtiene con la teoría de la perturbación un resultado razonablemente preciso, aunque obviamente la perturbación no es pequeña. Se obtienen resultados mucho más aproximados al emplear una modificación de la teoría de la perturbación, donde el error es del orden del cubo de una cantidad pequeña. La expresión (12–28) predice también la energía del estado base de un ion con dos electrones con $Z > 2$, como lo son Li^+, Be^{2+} y B^{3+}. La concordancia mejora al aumentar Z, ya que la interacción de Coulomb entre el núcleo y cada electrón aumenta más rápidamente que la interacción de Coulomb entre los

www.FreeLibros.me

dos electrones, de modo que la perturbación disminuye relativamente y el cálculo de perturbación es menos impreciso.

Considere a continuación el primer estado excitado del sistema no perturbado para el He. Este es un estado degenerado ya que existen cuatro estados de un electrón para $n = 2$ que se encuentran degenerados, y también hay degeneración de intercambio. Sin embargo, se elimina gran parte de esta degeneración cuando se considera la interacción entre los electrones como una perturbación. Antes que cuantitativamente, es interesante tratarla cualitativamente.

El aumento en la energía del átomo producida por la repulsión de Coulomb entre los dos electrones depende de la distancia promedio entre ellos. Esta, a su vez, depende de los números cuánticos de la parte espacial de la función propia, y también de su carácter de simetría. Consideremos, en primer lugar, la dependencia con los números cuánticos espaciales ignorando, por lo pronto, las propiedades de simetría y el requisito de indistinguibilidad. Los conjuntos posibles de números cuánticos para los dos electrones en el primer estado excitado del sistema no perturbado son:

$$n_1 = 1, l_1 = 0, m_{l_1} = 0; \quad n_2 = 2, l_2 = 0, m_{l_2} = 0$$
$$n_1 = 1, l_1 = 0, m_{l_1} = 0; \quad n_2 = 2, l_2 = 1, m_{l_2} = -1$$
$$n_1 = 1, l_1 = 0, m_{l_1} = 0; \quad n_2 = 2, l_2 = 1, m_{l_2} = 0$$
$$n_1 = 1, l_1 = 0, m_{l_1} = 0; \quad n_2 = 2, l_2 = 1, m_{l_2} = 1$$

Ya que la densidad de probabilidad del electrón 1 es esféricamente simétrica, la distancia promedio entre los dos electrones depende solamente de las densidades radiales de probabilidad de las dos partículas. Estas cantidades, definidas en la ecuación (10–43), las especifican completamente los números cuánticos n y l. Al inspeccionar la figura 10–2 el lector observará que la distancia promedio entre los dos electrones es algo mayor para los números cuánticos $n_1 = 1$, $l_1 = 0$; $n_2 = 2$ y $l_2 = 0$ que para los números $n_1 = 1$, $l_1 = 0$, $n_2 = 2$ y $l_2 = 1$. Puesto que el potencial de perturbación es inversamente proporcional a la distancia entre los dos electrones, el aumento en la energía total del átomo será mayor para el estado especificado por $n_1 = 1$, $l_1 = 0$, $n_2 = 2$ y $l_2 = 1$ que para el especificado por $n_1 = 1$, $l_1 = 0$, $n_2 = 2$ y $l_2 = 0$. Así el nivel de energía degenerado del primer estado excitado del sistema no perturbado se rompe en dos componentes bajo el efecto de la perturbación. Esto es una consecuencia del hecho de que cada uno de los estados, como el especificado por los números cuánticos $n_1 = 1$, $l_1 = 0$, $n_2 = 2$ y $l_2 = 0$, comprende cuatro estados con degeneración de intercambio correspondientes a las cuatro funciones propias completas antisimétricas (12–22) que se deben emplear para describir el sistema de dos electrones. El rompimiento se debe a que la distancia promedio entre los dos electrones es menor en el estado de singulete que en los estados de triplete, de manera que el aumento en la energía es mayor para el estado de singulete que para los estados de triplete. El efecto neto de la perturbación es el de incrementar la energía del primer estado excitado del sistema no perturbado y romper en cuatro componentes este nivel de energía. En el diagrama de niveles de energía

www.FreeLibros.me

de la figura 12–3 podrá observarse que esta conclusión concuerda cualitativamente con los niveles de energía del He observados experimentalmente.

Usemos la teoría de la perturbación para calcular el efecto de la perturbación. No será tan difícil como el lector podrá imaginar en virtud de las siguientes razones:

1. Como en el cálculo para el estado base, podemos despreciar la parte del spin de la función propia completa antisimétrica y usar sólo la parte espacial para la función propia no perturbada.

2. Ya que el impulso angular total del átomo (la suma de los impulsos angulares orbitales y de spin de los dos electrones) no se puede cambiar si no existen pares de fuerza externos, y ya que la perturbación no contiene una interacción entre los impulsos angulares spin y orbital, tanto el impulso angular de spin como el impulso angular orbital no variarán al aplicar la perturbación. En consecuencia, la perturbación no puede mezclar apreciablemente los estados degenerados correspondientes a $n_1 = 1$, $l_1 = 0$, $n_2 = 2$ y $l_2 = 0$, para los que la magnitud del impulso angular orbital total es igual a cero, con los estados degenerados correspondientes a $n_1 = 1$, $l_1 = 0$, $n_2 = 2$ y $l_2 = 1$, para los que la magnitud del impulso angular orbital total es $\sqrt{l(l+1)}\hbar$. En consecuencia, es posible tratar separadamente los estados degenerados para estos dos conjuntos de números cuánticos.

3. Por simplicidad, sólo efectuaremos el cálculo para los estados degenerados correspondientes a $n_1 = 1$, $l_1 = 0$, $n_2 = 2$ y $l_2 = 0$. Estos estados no están espacialmente degenerados, ya que m_{l_1}, y m_{l_2} sólo pueden tener el valor $m_{l_1} = m_{l_2} = 0$. Sin embargo, existe una degeneración de intercambio debida a que la parte espacial de las funciones de singulete y triplete

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{ab} + \psi_{ba}] = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{100}(1)\,\psi_{200}(2) + \psi_{200}(1)\,\psi_{100}(2)] \qquad (12\text{–}29)$$

y

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{ab} - \psi_{ba}] = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{100}(1)\,\psi_{200}(2) - \psi_{200}(1)\,\psi_{100}(2)] \qquad (12\text{–}29')$$

corresponden a la misma energía total del sistema no perturbado.

4. Como se afirmó en 2, el impulso angular total de spin no puede cambiar al aplicar la perturbación. Por ello, la perturbación no puede mezclar apreciablemente las funciones propias (12–29) con las funciones propias (12–29′), ya que la primera corresponde al estado de singulete, donde los dos vectores de spin son "antiparalelos" y la magnitud del impulso angular total de spin es igual a cero, mientras que la segunda corresponde al estado de triplete, donde los dos vectores de spin son "paralelos" y la magnitud del impulso angular total de spin es $\sqrt{1(1+1)}\hbar$. En consecuencia, es posible calcular el corrimiento en la energía producido por la perturbación aplicando a cada una de las funciones propias la teoría ordinaria de la perturbación, aunque se encuentren degeneradas, precisamente como lo hicimos con las funciones propias degeneradas ψ_{nljm_j} al calcular el corrimiento en la energía producido por la interacción spin-órbita.

www.FreeLibros.me

Usamos la generalización a tres dimensiones de (9–13) con la perturbación (12–27) y las funciones propias no perturbadas (12–29) y (12–29′), para obtener la expresión para el corrimiento en la energía producido por la perturbación:

$$E'_{\pm} - E \simeq \frac{1}{2}\int\int [\psi^*_{100}(1)\,\psi^*_{200}(2) \pm \psi^*_{200}(1)\,\psi^*_{100}(2)]\,\frac{e^2}{r_{12}} \times [\psi_{100}(1)\,\psi_{200}(2) \pm \psi_{200}(1)\,\psi_{100}(2)]\,d\tau_1\,d\tau_2$$

donde E'_+ corresponde al estado de singulete descrito en (12–29) y E'_- al estado de triplete descrito en (12–29′). Estas son

$$\begin{aligned} E'_{\pm} \simeq E &+ \frac{1}{2}\int\int\Big[\psi^*_{100}(1)\,\psi^*_{200}(2)\,\frac{e^2}{r_{12}}\,\psi_{100}(1)\,\psi_{200}(2) \\ &\qquad + \psi^*_{200}(1)\,\psi^*_{100}(2)\,\frac{e^2}{r_{12}}\,\psi_{200}(1)\,\psi_{100}(2)\Big]\,d\tau_1\,d\tau_2 \\ &\pm \frac{1}{2}\int\int\Big[\psi^*_{100}(1)\,\psi^*_{200}(2)\,\frac{e^2}{r_{12}}\,\psi_{200}(1)\,\psi_{100}(2) \\ &\qquad + \psi^*_{200}(1)\,\psi^*_{100}(2)\,\frac{e^2}{r_{12}}\,\psi_{100}(1)\,\psi_{200}(2)\Big]\,d\tau_1\,d\tau_2 \qquad (12\text{–}30) \end{aligned}$$

El lector puede verificar estos resultados mediante un cálculo rutinario con la teoría de la perturbación para el caso degenerado, descrita en la sección 4 del capítulo 9, para el caso de las dos funciones propias degeneradas $\psi_{100}(1)\psi_{200}(2)$ y $\psi_{200}(1)\psi_{100}(2)$. Puede efectuarse fácilmente, ya que el cálculo llevado a cabo en esa sección puede aplicarse inmediatamente al problema presente. Las ecuaciones (9–26) y (9–27) muestran que (12–29) y (12–29′) son las combinaciones lineales correctas de $\psi_{100}(1)\psi_{200}(2)$ y $\psi_{200}(1)\psi_{100}(2)$, y que (12–30) es la expresión correcta para la energía perturbada.

Comparemos los resultados de nuestro cálculo con las ecuaciones (12–10) y (12–11), y con la interpretación que se les dio. La primera integral en la ecuación (12–30) se identificará como la expresión que, clásicamente, corresponde al valor esperado para la perturbación en un sistema que contenga dos partículas idénticas en los estados de una partícula $n = 1$, $l = 0$ y $n = 2$, $l = 0$; la segunda integral se identificará como una manifestación del requisito cuántico de la indistinguibilidad. Esta integral toma en cuenta la atracción o repulsión efectiva en los estados de singulete o triplete aumentando el corrimiento de la energía en el primero y disminuyéndolo en el segundo. La segunda integral recibe el nombre de *integral de intercambio* y la primera el de *integral ordinaria*. Para calcular estas integrales evaluamos ψ_{100} y ψ_{200} a partir de (10–39). Obtenemos que

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}, \qquad \psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/a_0}$$

www.FreeLibros.me

Substituyéndolas en (12–30) y llevando a cabo la integración se obtienen los valores de E'_- y E'_+, los que concuerdan, dentro del uno por ciento, con las energías de los dos primeros estados excitados del He observados experimentalmente. El cálculo de perturbación es más preciso para los estados excitados que para el estado base, ya que en los primeros la distancia promedio entre los electrones es mayor, y la perturbación menor, que en el último.

Un cálculo de perturbación para los estados no perturbados, donde un conjunto de números cuánticos es $n = 1$, $l = 0$ y el otro es $n = 2$, $l = 1$, conduce a resultados semejantes a los expresados en (12–30), excepto que es algo mayor el valor numérico de la integral ordinaria. En el conjunto de niveles de energía de la figura 12–4 se representan esquemáticamente las características más importantes y los resultados de la descripción teórica de algunos de los primeros niveles del He.

No se muestra en la figura la separación de estructura fina de los niveles de energía de triplete, cuya existencia se infiere del espectro del He. Se debe a la existencia de interacciones sumamente pequeñas entre los spins de los electro-

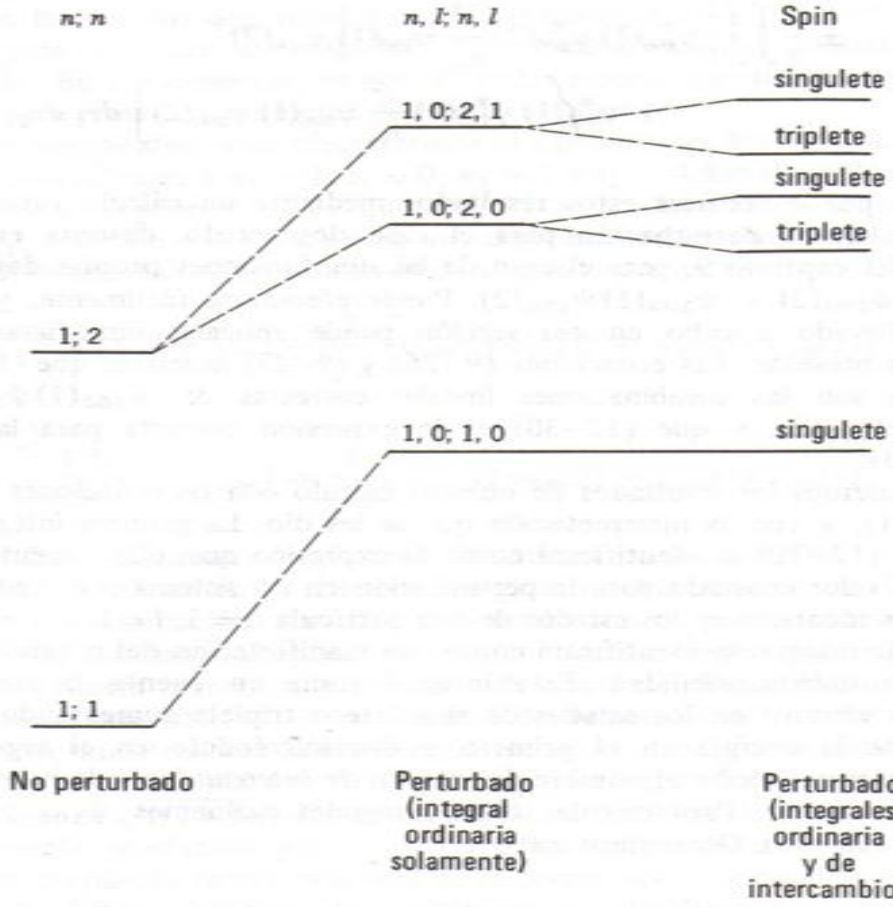

Figura 12-4. Ilustración de los efectos que contribuyen a las energías del estado base y los cuatro primeros estados excitados del átomo de helio.

www.FreeLibros.me

nes, y a otros efectos relativistas, que rompen cada uno de los niveles de triplete (excepto aquellos cuyo impulso angular orbital total es igual a cero) en tres niveles cuya separación es 10^{-4} veces la separación entre los niveles correspondientes al singulete y al triplete. Puede darse un tratamiento teórico de este efecto en términos de las ecuaciones desarrolladas en el capítulo anterior. También existe un rompimiento hiperfino de los niveles debido a interacciones extremadamente pequeñas con el spin del núcleo, que produce una separación alrededor de 10^{-3} veces la separación producida por la estructura fina. La trataremos en el capítulo 13. Ahora no consideraremos ninguno de estos efectos.

Particularmente interesante es la ausencia de un nivel de triplete asociado con el nivel de singulete del estado base, que en nuestro tratamiento es una consecuencia del principio de exclusión. Esto es correcto, aunque históricamente aconteció en el orden inverso: el hecho experimental de que en el espectro del He no se encuentre este triplete proporcionó la prueba fundamental que condujo a Pauli a la formulación del principio de exclusión.

6. El gas de Fermi

Todas las partículas que se deban describir por funciones antisimétricas reciben el nombre de *partículas de Fermi* en honor a un investigador que intervino en la formulación de la teoría de sus propiedades. En la última sección hemos discutido detalladamente un sistema que contiene dos partículas de Fermi. Ahora consideraremos, aunque con menor detalle, un sistema que contiene un gran número de ellas.

Considere un sistema formado por un "gas" de partículas de Fermi, que se mueven libremente sin interacción, y se encuentran confinadas en una región. Este sistema, que recibe el nombre de *gas de Fermi,* se puede emplear para describir algunas de las características más importantes del comportamiento de los electrones confinados en un átomo con varios electrones. También puede usarse un gas de Fermi para describir ciertas características del movimiento de los protones y neutrones confinados en el núcleo. Quizás el mejor ejemplo de un gas de Fermi sean los electrones de conducción en un metal. Estos electrones, que son los responsables de la conductividad del metal, se mueven con bastante libertad, ya que se tienden a cancelar las fuerzas ejercidas por los diferentes átomos, y las fuerzas que los electrones ejercen sobre los demás son pequeñas. Por otra parte, estos electrones de conducción están confinados al metal por fuerzas de atracción que operan en las superficies. En esta sección consideraremos algunas de las propiedades del gas de Fermi, como son su energía total y la distribución de la energía en las diferentes partículas, e ilustraremos su significado para los electrones de conducción. Veremos que estas propiedades están influidas poderosamente por el principio de exclusión.

Cada partícula de un gas de Fermi se mueve independientemente de las demás en un potencial constante (que tomaremos igual a cero) dentro de una cierta región, y que en las fronteras de esta región se hace mayor que la energía total de las partículas. En la mayoría de los casos se puede suponer que el

www.FreeLibros.me

potencial es infinitamente grande en las fronteras. La ecuación de Schrödinger para cada una de las partículas tiene la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)=E\psi \tag{12–31}$$

con $\psi(x, y, z) = 0$ sobre las fronteras de la región. El lector puede verificar fácilmente que las soluciones a esta ecuación se pueden escribir como

$$\psi(x, y, z) = X(x)\ Y(y)\ Z(z) \tag{12–32}$$

donde

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X(x)}{dx^2}=E_xX(x) \tag{12–32'}$$

y ecuaciones semejantes para $Y(y)$ y $Z(z)$. Además

$$E = E_x + E_y + E_z$$

No restringirá la generalidad de nuestro cálculo el suponer que la región que contiene el gas de Fermi es un cubo de arista a. Si el origen del sistema de coordenadas se encuentra en el centro del cubo, con sus ejes paralelos a las aristas, se debe tener que

$$X(x) = 0, \qquad x < -a/2, \qquad x > a/2 \tag{12–33}$$

y condiciones semejantes para $Y(y)$ y $Z(z)$. La ecuación (12–32′) y la condición (12–33) son idénticas a (8–89) y (8–90) que corresponden al problema de una partícula en un pozo infinito de potencial. De (8–96) se pueden escribir inmediatamente los valores permitidos para E_x:

$$E_x=\frac{\pi^2\hbar^2n_x^2}{2ma^2} \tag{12–34}$$

donde $n_x = 1, 2, 3, \ldots$. Se obtienen expresiones semejantes para E_y y E_z. Los valores permitidos para la energía de una de las partículas idénticas están dados por la ecuación

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2) \tag{12–35}$$

donde $n_x = 1, 2, 3, \ldots$; $n_y = 1, 2, 3, \ldots$; $n_z = 1, 2, 3, \ldots$. Los tres números cuánticos espaciales especifican los estados cuánticos de la párticula.

A partir de esta ecuación es útil calcular el número $N(E)dE$ de estados cuánticos en los que la energía total de la partícula se encuentra entre E y $E + dE$. El procedimiento es semejante al seguido en la sección 6 del capítulo 2. Imaginemos una malla cúbica uniforme construida en un octante de un sistema rectangular de coordenadas; las tres coordenadas de cada punto de la malla son iguales a un conjunto posible de números cuánticos n_x, n_y, n_z. Entonces, el número de conjuntos posibles de números cuánticos es igual al

www.FreeLibros.me

número $N(r)dr$ de puntos contenidos entre dos cáscaras concéntricas de radios r y $r+dr$, donde

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\, r^2 \tag{12–36}$$

Por construcción, $N(r)dr$ es igual al volumen encerrado entre las dos cáscaras

$$N(r)\, dr = \frac{1}{8}\, 4\pi r^2\, dr = \frac{\pi r^2\, dr}{2}$$

Conforme a la ecuación (12–36)

$$dE = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}\, r\, dr$$

y

$$E^{1/2} = \frac{\pi\hbar}{2^{1/2} m^{1/2} a}\, r$$

de manera que

$$N(r)\, dr = \frac{\pi}{2}\, \frac{2^{1/2} m^{1/2} a}{\pi\hbar}\, E^{1/2}\, \frac{ma^2}{\pi^2\hbar^2}\, dE$$

Ahora bien, $N(r)dr = N(E)dE$ y, en consecuencia,

$$N(E)\, dE = \frac{m^{3/2} V}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\, E^{1/2}\, dE \tag{12–37}$$

donde $V = a^3$ es el volumen de la región cúbica donde está confinada la partícula de masa m y energía E*. Puede mostrarse que la expresión (12–37) es la correcta para el número de estados cuánticos cuya energía se encuentra entre E y $E + dE$ en el caso general de una partícula confinada en una región arbitraria de volumen V.

La función propia (12–32), que describe el movimiento de una de las partículas idénticas, es una onda estacionaria con nodos sobre la frontera de la región. Las funciones propias que describen el sistema completo están formadas de productos de esas funciones propias de onda estacionaria y, para satisfacer el principio de exclusión, se deben escribir en la forma antisimétrica (12–16). Si sólo se desea discutir la energética del gas de Fermi no será necesario referirnos a esta función propia. Sin embargo, es indispensable tomar en cuenta el principio de exclusión, lo que se puede hacer simplemente exigiendo que no más de dos partículas tengan los mismos números cuánticos espaciales n_x, n_y, n_z. De esta manera se cumplirá el principio de exclusión, puesto que una de las partículas tendrá el número cuántico de spin $m_s = -\frac{1}{2}$ y la otra $m_s = +\frac{1}{2}$.

* Ya que en la región la energía potencial es cero, la energía total E es igual a la energía cinética.

www.FreeLibros.me

Se puede ver fácilmente que el principio de exclusión es determinante en el cálculo de la energía mínima total del gas de Fermi. Considere la situación ilustrada esquemáticamente en los dos diagramas de la figura 12–5. En el diagrama de la izquierda se representan los estados cuánticos ocupados cuando un sistema de ocho partículas idénticas, que no satisfacen el principio de exclusión, tienen la energía total mínima posible. El otro diagrama representa los estados cuánticos ocupados cuando las partículas, que obedecen el principio de exclusión, hacen que la energía total del sistema sea mínima. Sólo dos partículas, se pueden encontrar en el mismo estado espacial, de manera que la energía es considerablemente mayor en comparación con el caso anterior. El diagrama ilustra también que el número de estados cuánticos por unidad de energía aumenta como $E^{1/2}$. En un sistema con N partículas idénticas de Fermi, la energía mínima total se alcanza sólo cuando hay dos partículas en cada uno de los estados de energía entre $E = 0$ y $E = E_f$. Las partículas llenan los estados hasta la *energía de Fermi* E_f. Esa energía se puede calcular requiriendo que la integral de $2N(E)dE$ desde 0 hasta E_f sea igual al número de partículas del sistema.* Esto es,

$$N = \int_0^{E_f} 2N(E)\, dE$$

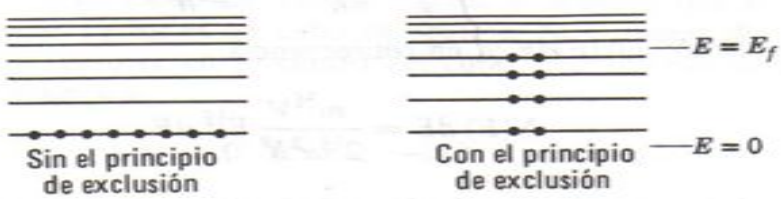

Figura 12-5. Ilustración del efecto del principio de exclusión.

El factor 2 toma en cuenta el hecho de que caben dos partículas en cada estado cuántico espacial. Por (12–37) tenemos

$$N = \frac{2^{1/2} m^{3/2} V}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_f} E^{1/2}\, dE = \frac{2^{1/2} m^{3/2} V}{\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{3} E_f^{3/2}$$

$$N = \frac{2^{3/2} m^{3/2} V}{3\pi^2 \hbar^3} E_f^{3/2}$$

de manera que

$$E_f = 3^{2/3} \pi^{4/3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

* La integral se justifica cuando consideramos un sistema formado por un número grande de partículas. En este caso, la integral es una buena aproximación a la suma sobre los estados discretos de energía que, estrictamente hablando, debería usarse.

www.FreeLibros.me

o sea

$$E_f = 3^{2/3}\pi^{4/3}\frac{\hbar^2}{2m}\rho^{2/3} \tag{12–38}$$

donde ρ es el número de partículas por unidad de volumen. El número de partículas cuyas energías se encuentran entre E y $E + dE$ en un gas de Fermi de energía mínima es igual a $2N(E)dE$ para $E \leqslant E_f$; no existe partícula alguna con $E > E_f$, como se indica en la figura 12–6. El lector podrá mostrar que la energía promedio de las partículas que tienen esta distribución en la energía es

$$\bar{E} = \tfrac{3}{5}E_f \tag{12–39}$$

de manera que la energía total del gas de Fermi es

$$E_t = N\bar{E} = \tfrac{3}{5}NE_f \tag{12–40}$$

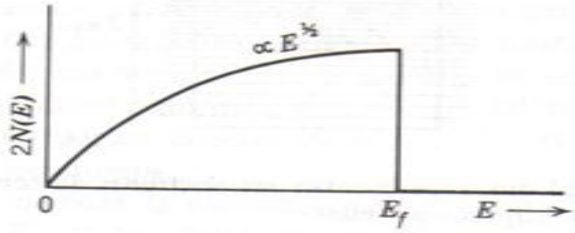

Figura 12-6. La distribución de energía para un sistema de partículas de Fermi a la temperatura del cero absoluto.

Debe observarse que, para un gas de Fermi de partículas de una masa dada, E_f y $\bar{E}$ dependen sólo de la densidad del gas de Fermi.

Calculemos algunas de estas cantidades para un gas de Fermi de electrones de conducción en un metal. Considere el Cu, que tiene un electrón de conducción por átomo. En este caso ρ es igual a la densidad de los átomos, que es el número de Avogadro multiplicado por la densidad del Cu dividido entre su número atómico. Así,

$$\rho = 6 \times 10^{23} \times 9/64 \simeq 8 \times 10^{22}\ \text{cm}^{-3}$$

Empleando este valor para ρ, y haciendo m igual a la masa del electrón, de la ecuación (12–38) se obtiene

$$E_f \simeq 10 \times 10^{-12}\ \text{ergs} \simeq 7\ \text{ev}$$

Esta es la energía del estado ocupado con mayor energía respecto al fondo del potencial. La energía de este estado respecto a la energía potencial fuera del metal es igual a la cantidad W que aparece en la ecuación (3–8), y que se mide en el efecto fotoeléctrico. Para el cobre, su valor es

$$W \simeq 4\ \text{ev}$$

www.FreeLibros.me

Conociendo E_f y W, podemos dibujar un diagrama que represente la energía potencial donde se mueven los electrones de conducción y también los estados de energía que ocupan, como se ilustra en la figura 12–7. Si el volumen de la muestra de Cu es de 1 cm³, se encuentran ocupados alrededor de 4×10^{22} estados. Este hecho justifica la aproximación discutida al pie de la página 378. El suponer que el potencial es infinitamente grande en las superficies, es una aproximación que se justifica, ya que el estado ocupado de mayor energía se encuentra muy por debajo de la cima del potencial.

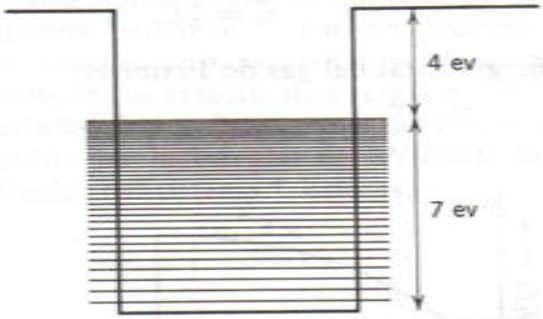

Figura 12-7. El potencial que experimentan los electrones de conducción en el cobre y los estados ocupados por ellos.

Los electrones de conducción del Cu tendrán una energía total mínima cuando el contenido energético del metal sea mínimo, esto es, a la temperatura del cero absoluto. A esta temperatura la energía promedio de los electrones de conducción es $E = 3E_f/5 \simeq 4$ ev. Esta es una consecuencia directa del principio de exclusión. Para un sistema compuesto de partículas que no obedecen este principio (por ejemplo, un gas clásico de partículas idénticas), todas las partículas se encontrarán en el estado base cuando $T = 0$ y su energía será esencialmente igual a cero. Para que estas partículas tengan una energía media de 4 ev, el sistema deberá tener una energía térmica que corresponda a una temperatura tal que

$$\tfrac{3}{2}kT = \tfrac{3}{5}E_f \simeq 4 \text{ ev}$$

donde k es la constante de Boltzmann. De esta ecuación se calcula la temperatura, relativamente elevada, de

$$T \simeq 5 \times 10^4 \text{ °K}$$

que se puede considerar como una medida de la temperatura equivalente de la energía promedio de los electrones de conducción.

Que la energía de Fermi E_f sea mucho mayor que la energía de agitación térmica a temperaturas normales

$$(\tfrac{3}{2}kT)_{300\text{°K}} \simeq 0.025 \text{ ev}$$

www.FreeLibros.me

tiene algunas consecuencias interesantes. Para un gas de Fermi a la temperatura $T = 0$ se encuentran ocupados todos los estados por debajo de la energía de Fermi. A medida que se eleva la temperatura del metal que contiene el gas de Fermi, los electrones se excitan por las colisiones con los átomos que se agitan térmicamente y ocupan estados de energía superior. Pero, de acuerdo con el principio de exclusión, un electrón sólo puede efectuar una transición a un estado que no se encuentra ocupado. Ya que a las temperaturas normales la energía térmica que se puede dar a un electrón es muy pequeña en comparación a la energía de Fermi, sólo puede dárseles energía suficiente a los electrones cuya energía sea próxima a E_f para que efectúen transiciones a estados no ocupados de energía $E > E_f$. Los electrones con energías apreciablemente menores que E_f no pueden ser excitados, ya que no se dispone de la energía térmica suficiente. En consecuencia, sólo una fracción pequeña del número total de electrones de conducción puede participar en el proceso de excitación térmica y, en consecuencia, los electrones contribuirán muy poco a la capacidad calorífica del metal. Por este motivo se observa experimentalmente que la capacidad calorífica del metal a temperaturas normales es la calculada a partir del movimiento de los átomos solamente. Cuando se propuso esta explicación por vez primera, se resolvió un antiguo enigma ya que, clásicamente, la capacidad calorífica proveniente del movimiento térmico de los electrones de conducción debería ser comparable al proveniente del movimiento térmico de los átomos.

La figura 12–6 muestra la distribución de energía de las partículas de un gas de Fermi para $T = 0$; las distribuciones para otras temperaturas se indican en la figura 12–8. Observe que, para cada temperatura, la distribución baja a cero dentro de un intervalo de magnitud kT, ya que las partículas cuya energía es mucho menor que $E_f = kT$ no pueden ser excitadas como para que la distribución de energía difiera mucho de la distribución para $T = 0$. Las curvas en esta figura se han obtenido a partir de la ecuación

$$\mathcal{N}(E)\,dE = 2N(E)\,F(E)\,dE \tag{12–41}$$

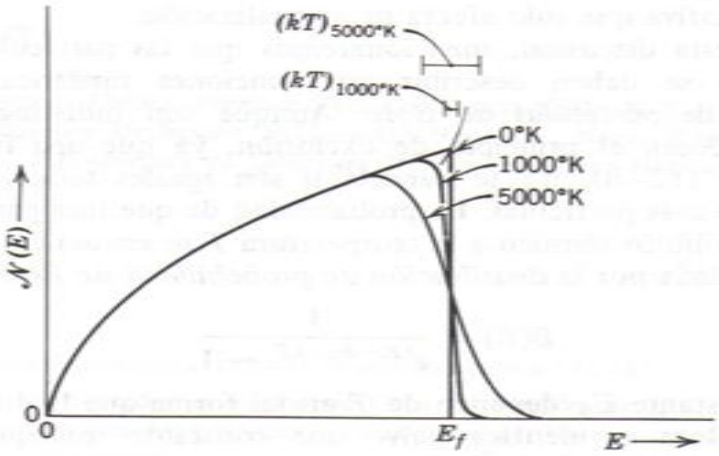

Figura 12-8. Las distribuciones de energía para un sistema de partículas de Fermi para diferentes temperaturas.

www.FreeLibros.me

La cantidad $N(E)$ es la densidad de estados (12–37) de las partículas de Fermi y es proporcional a $E^{1/2}$. La cantidad $F(E)$ es la *distribución de probabilidad de Fermi*, que especifica la probabilidad de que una partícula tenga la energía E, cuando el sistema se encuentra en equilibrio térmico a la temperatura T, y es igual a

$$F(E) = \frac{1}{e^{(E-E_0)/kT} + 1} \tag{12–42}$$

donde E_0 es una constante que depende de T de modo que $E_0 = E_f$ cuando $kT \ll E_f$.

El lugar que ocupa la distribución de probabilidad de Fermi en la descripción de un sistema de partículas de Fermi es análogo al que ocupa la distribución de probabilidad de Boltzmann (2–23) en la descripción de un sistema formado por partículas clásicamente distinguibles. Esta última distribución de probabilidad

$$P(E) = \frac{1}{e^{E/kT}} \tag{12–43}$$

especifica la probabilidad de que una partícula, cuando se halla en equilibrio térmico a la temperatura T, se encuentre en un estado de energía E. La diferencia entre las probabilidades de distribución (12–42) y (12–43) refleja la diferencia entre el comportamiento de las partículas de Fermi y las partículas clásicas, y es una consecuencia fundamental del principio de exclusión. Para un gas de Fermi con $kT \gg E_f$, la energía de excitación térmica es muy grande, todas las partículas se encuentran muy excitadas y los estados casi desocupados; la probabilidad de que una partícula de Fermi no pueda realizar una transición a un estado por estar ocupado, es tan pequeña, que el principio de exclusión ya no tiene importancia. Por otra parte, en el límite $kT \gg E_f$, la constante E_0 en la ecuación (12–42) es grande y negativa y el término $+1$ es despreciable en comparación con la exponencial. Así, las distribuciones de probabilidad $F(E)$ y $P(E)$ son idénticas, salvo por una constante multiplicativa que sólo afecta su normalización.

Para terminar esta discusión, mencionaremos que las partículas que en la mecánica cuántica se deben describir por funciones simétricas reciben el nombre genérico de *partículas de Bose*. Aunque son indistinguibles, estas partículas no obedecen el principio de exclusión, ya que una función simétrica, como lo es (12–8), no se cancela si son iguales todos los números cuánticos de dos o más partículas. La probabilidad de que una partícula en un *gas de Bose* en equilibrio térmico a la temperatura T se encuentre en un estado de energía E está dada por la *distribución de probabilidad de Bose*

$$B(E) = \frac{1}{e^{(E-E_0)/kT} - 1} \tag{12–44}$$

En general, la constante E_0 depende de T en tal forma que la distribución de probabilidad de Bose es idéntica, salvo una constante multiplicativa, a la distribución de probabilidad de Boltzmann para temperaturas elevadas. Sin embargo, las dos distribuciones son diferentes para temperaturas bajas, cuando un número grande de partículas ocupa el mismo estado, aunque ambas

www.FreeLibros.me

describen partículas que no obedecen el principio de exclusión: las partículas son indistinguibles en el caso de Bose y distinguibles en el caso de Boltzmann. El átomo de He es un ejemplo de partícula de Bose, ya que está formado de un agregado de un número par de partículas antisimétricas muy ligadas. Las interesantes propiedades que manifiesta un sistema de átomos de He a temperaturas bajas (He líquido) se debe primordialmente al carácter de simetría de estos átomos. El cuanto es otro ejemplo de partícula de Bose. En este caso particular, la constante E_0 en la ecuación (12–44) es idénticamente igual a cero y la distribución de probabilidad es

$$B(E)_{\text{cuanto}} = \frac{1}{e^{E/kT} - 1} \tag{12–45}$$

Poniendo $E = h\nu$, se puede emplear esta ecuación para evaluar la energía que porta el cuanto de frecuencia ν en una cavidad que contiene un gran número de cuantos en equilibrio a la temperatura T. La expresión que resulta es idéntica a la ecuación de Planck (2–31) para la energía promedio de las ondas electromagnéticas estacionarias contenidas en esa cavidad. Así, puede calcularse la densidad de energía de una cavidad de cuerpo negro considerándolo como un sistema que contiene ondas estacionarias o que contiene un gas de cuantos de Bose.

Hemos mostrado en el capítulo 2, con un sistema simple, cómo se puede llegar a la distribución de probabilidad de Boltzmann a partir de la mecánica estadística. Las distribuciones de probabilidad de Fermi y de Bose, se desarrollan a partir de una variante de esta teoría, de la *mecánica estadística cuántica*, que difiere de la teoría clásica sólo en la definición de una división experimentalmente distinguible de la energía del sistema y, para las partículas de Fermi, en la aplicación del principio de exclusión. Es esta una aplicación importante de la mecánica cuántica que no trataremos ahora porque nos distraería de su aplicación al estudio de los átomos con varios electrones.

BIBLIOGRAFIA

Bohm, D., *Quantum Theory*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1951.
Schiff, L. I., *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.
Sherwin, C. W., *Introduction to Quantum Mechanics*, Henry Holt and Co., Nueva York, 1959.

EJERCICIOS

1. Muestre que la ecuación (12–3) es una solución a (12–1).

2. Siguiendo el procedimiento sugerido a continuación de (12–30), muestre que la expresión concuerda con los resultados de un cálculo rutinario con la teoría de la perturbación en el caso degenerado.

3. Considere dos electrones que se mueven en un tubo delgado de longitud a de paredes impenetrables. Escriba las funciones propias para los estados base y primeros exci-

www.FreeLibros.me

tados de este sistema, suponiendo que los electrones no interaccionan entre sí. Calcule las energías de los estados base y primer excitado en esta aproximación, y discuta la degeneración de estos estados. Considere a continuación la perturbación debida a la interacción de Coulomb entre los electrones. Escriba las ecuaciones para los corrimientos en las energías de los estados base y primer excitado y calcúlelos. Explique el origen físico del rompimiento del primer estado excitado al aplicar la perturbación.

4. Verifique las ecuaciones (12–31) y (12–32).

5. Verifique la ecuación (12–39).

6. Repita el cálculo del ejercicio 3 del capítulo 2 para un sistema de partículas de Fermi y también para un sistema de partículas de Bose. Compare el primer cálculo con la ecuación (12–42) y el segundo con (12–44) y ambos con (12–43).

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 13

Atomos con varios electrones

1. Introducción

Un átomo con varios electrones está formado por un núcleo de carga $+Ze$ rodeado de Z electrones de carga $-e$. Cada electrón se mueve debido a una fuerza de atracción de Coulomb proveniente del núcleo y a fuerzas de repulsión de Coulomb ejercidas por los otros $Z-1$ electrones, además de otras fuerzas que dependen del impulso angular de spin, que normalmente son más débiles que las producidas por las cargas. Es esencialmente imposible encontrar una solución exacta de la extremadamente complicada ecuación de Schrödinger. Sin embargo, existe una descripción teórica de los átomos con varios electrones.

En la sección 5 del capítulo 12 tratamos un átomo con varios electrones, $Z=2$, considerando, en primer lugar, un sistema no perturbado que describe un átomo simplificado en el que se ignora la interacción entre los electrones y, posteriormente, utilizando la teoría de la perturbación para tomar en cuenta el efecto de esta interacción se mejora la precisión. El modo de operar con átomos con valores mayores de Z consiste, también, en tomar una descripción simplificada del átomo como un sistema no perturbado y para mejorar la precisión emplea la teoría de la perturbación para evaluar las correcciones. Sin embargo, cuando es grande el número de electrones, no se pueden ignorar totalmente sus interacciones en el sistema no perturbado, ya que su efecto es demasiado grande como para ser tratado como una perturbación. Un sistema no perturbado útil deberá tomar en cuenta los efectos principales de las interacciones de Coulomb entre los electrones. Por el otro lado, el sistema no perturbado no debe ser tan complicado de manera que no pueda resolverse la ecuación de Schrödinger que describe al sistema. Esto significa que en el sistema no perturbado los electrones no interaccionan, ya que sólo así la ecuación de Schrödinger se puede separar en un conjunto de Z ecuaciones, que se pueden resolver sin dificultad en virtud de que en cada una intervienen las coordenadas de un solo electrón.

Puede obtenerse un sistema no perturbado con las propiedades enunciadas anteriormente si se supone que cada electrón se mueve *independientemente* en un *potencial neto* $V(r)$ esféricamente simétrico, donde r es la coordenada radial del electrón respecto al núcleo. Este potencial es la suma del potencial

www.FreeLibros.me

de atracción de Coulomb esféricamente simétrico debido al núcleo y un potencial de repulsión esféricamente simétrico que representa el efecto promedio de las fuerzas de repulsión de Coulomb entre el electrón y los otros $Z-1$ electrones. El potencial de repulsión promedio depende de la densidad de probabilidad radial promedio de los electrones. Por supuesto, se desconocen estas densidades de probabilidad hasta que se resuelven las ecuaciones que describen el comportamiento del sistema no perturbado. Aunque a primera vista esta situación es intratable, realmente no lo es. Puede manejarse con la condición de que el potencial promedio de repulsión sea *auto-consistente*. Esto es, si calculamos las densidades de probabilidad con el potencial de repulsión promedio correcto, y evaluamos entonces un potencial de repulsión promedio a partir de ellas, es necesario que el potencial con el que terminamos sea idéntico al potencial inicial. Esta condición es suficiente para determinar el potencial de repulsión promedio correcto.

Presentaremos dos tratamientos autoconsistentes distintos. En la sección 2 trataremos los electrones en el sistema no perturbado como un gas de Fermi. Entonces, no será necesario resolver explícitamente la ecuación de Schrödinger para el sistema no perturbado, ya que se han incluido muchas de las propiedades cuánticas de un sistema de electrones sin interacción al deducir las ecuaciones que especifican las propiedades del gas de Fermi. En la sección 3 describiremos un tratamiento más preciso de un sistema no perturbado, que incluye la solución de la ecuación de Schrödinger con potenciales esféricamente simétricos. Estos resultados formarán la base para discutir el estado base de los átomos con varios electrones y de la tabla periódica de los elementos. Emplearemos entonces la teoría de la perturbación para tomar en cuenta el hecho de que el potencial de repulsión esféricamente simétrico representa sólo aproximadamente la interacción de Coulomb entre los electrones, y también para corregir otras interacciones como la del spin. Esto nos permitirá dar una descripción de los estados excitados de los átomos. Finalmente, emplearemos la teoría de la perturbación dependiente del tiempo para calcular la probabilidad para que un átomo efectúe una transición entre estados excitados. A partir de estas consideraciones podemos entender los espectros óptico y de rayos X de un átomo con varios electrones.

2. La teoría de Thomas-Fermi

Alrededor de 1928, Thomas y Fermi desarrollaron, independientemente, una teoría simple del estado base de los átomos con muchos electrones. En esta teoría se consideran los electrones como un gas de Fermi de energía mínima, confinado en una región esférica por un potencial neto $V(r)$ simétricamente esférico. Entonces se puede emplear la ecuación (12–38) para encontrar la relación entre la profundidad del potencial para cualquier valor de r y la densidad del gas de Fermi para ese valor de r. Se supone que la profundidad del potencial es tal que todos los niveles de energía están llenos, esto es,

$$E_f = -V(r) \tag{13–1}$$

www.FreeLibros.me

Esta condición asegura que la energía total del átomo es mínima. Al resolver (12–38) para la densidad ρ tenemos

$$\rho = \frac{2^{3/2} m^{3/2}}{3\hbar^3 \pi^2} [-V(r)]^{3/2} \tag{13–2}$$

Este procedimiento es válido si la distancia sobre la que $V(r)$ no varía apreciablemente es grande en comparación con las longitudes de onda de los electrones, de manera que se puede ubicar un número grande de electrones en una región donde $V(r)$ es esencialmente constante. La condición se satisface para valores grandes de Z, excepto para las regiones muy cercanas o muy lejanas del centro. La teoría es inaplicable cuando Z es pequeño ya que esta condición no se satisface en ninguna parte.

Se obtiene la autoconsistencia al exigir que la densidad de electrones sea tal que se reproduzca el potencial neto $V(r)$. Este se calcula en términos de ρ mediante la ley de Gauss: la integral sobre cualquier superficie cerrada de la componente normal del campo eléctrico E multiplicado por el elemento de área dS es igual a 4π veces la carga contenida dentro de la superficie. Considere una superficie esférica de radio r centrada en el núcleo. Tenemos, entonces, un caso de simetría esférica para el cual la ley de Gauss tiene una forma simple:

$$4\pi r^2 E = 4\pi \left[Ze + \int_0^r -e\rho(r') 4\pi r'^2 \, dr' \right] \tag{13–3}$$

El primer miembro de la ecuación es el área de la superficie multiplicada por la intensidad del campo eléctrico sobre la superficie, que es de magnitud constante y siempre normal a ella. El primer término dentro del paréntesis es la carga nuclear. La integral es la carga total debida a los electrones contenidos dentro de la superficie; $-e\rho(r')$ es la carga por unidad de volumen y $4\pi r'^2 dr'$ es el elemento de volumen. El campo eléctrico está relacionado con la fuerza que actúa sobre un electrón, y en consecuencia al potencial neto $V(r)$ del electrón, por la ecuación

$$-eE = F = -\frac{dV(r)}{dr} \tag{13–4}$$

que cuando la escribimos como

$$E = -\frac{1}{e} \frac{d[-V(r)]}{dr}$$

la ecuación (13–3) toma la forma

$$r^2 \frac{d[-V(r)]}{dr} = -Ze^2 + 4\pi e^2 \int_0^r \rho(r') r'^2 \, dr'$$

Derivando ambos miembros respecto a r se tiene

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{d[-V(r)]}{dr} \right) = 4\pi e^2 \rho(r) r^2$$

www.FreeLibros.me

y empleando la ecuación (13–2) para expresar $\rho(r)$ en términos de $-V(r)$ tenemos

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}[-V(r)]\right) = \frac{4e^2 2^{3/2} m^{3/2}}{3\pi\hbar^3}[-V(r)]^{3/2} \tag{13–5}$$

Es conveniente escribir esta ecuación en términos de la variable x definida por la ecuación

$$r = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{me^2 Z^{1/3}}x = \frac{0.885a_0}{Z^{1/3}}x \tag{13–6}$$

y de la substitución

$$-V = \frac{Ze^2}{r}\chi \tag{13–7}$$

De esta manera, la ecuación diferencial (13–5) toma la forma

$$x^{1/2}\frac{d^2\chi(x)}{dx^2} = \chi(x)^{3/2} \tag{13–8}$$

Para encontrar una solución explícita a esta ecuación diferencial debemos conocer las "condiciones a la frontera" para la función $\chi(x)$. Consideremos que cuando $r \to 0$ la energía potencial neta de un electrón se aproxima a la energía potencial de Coulomb debida solamente al núcleo, o sea,

$$V(r) \to -Ze^2/r, \qquad r \to 0$$

De las ecuaciones (13–6) y (13–7) esto implica que

$$\chi(x) \to 1, \qquad x \to 0 \tag{13–9}$$

Cuando $r \to \infty$, la energía potencial del electrón es la debida a la carga nuclear $+Ze$ blindada por la carga $-(Z-1)e$ de los otros electrones. Así

$$V(r) \to -e^2/r, \qquad r \to \infty$$

o sea

$$rV(r) \to -e^2, \qquad r \to \infty$$

Podemos aproximar esta condición escribiendo

$$rV(r) \to 0, \qquad r \to \infty \tag{13–10}$$

lo que se reduce a suponer que e^2 es pequeña comparada con Ze^2. Esta aproximación nos da una razón del porqué la teoría de Thomas y Fermi no será precisa cuando nos encontremos lejos del centro del átomo. Empleando las ecuaciones (13–6) y (13–7) para escribir (13–10) en términos de $\chi(x)$, tenemos

$$\chi(x) \to 0, \qquad x \to \infty \tag{13–11}$$

www.FreeLibros.me

Se ha encontrado, repetidas veces, la solución a la ecuación (13–8) con las condiciones a la frontera (13–9) y (13–11). Se precisa de métodos numéricos y además los resultados se deben mostrar en una tabla o gráfica. En la figura 13–1 se muestra esa gráfica.

La función $\chi(x)$ determina el potencial neto $V(r)$ y la densidad de electrones $\rho(r)$. En la siguiente sección haremos la gráfica de estas cantidades para un átomo en particular y las compararemos con las predicciones de una teoría más precisa. Encontraremos que, aún para átomos con Z relativamente peque-

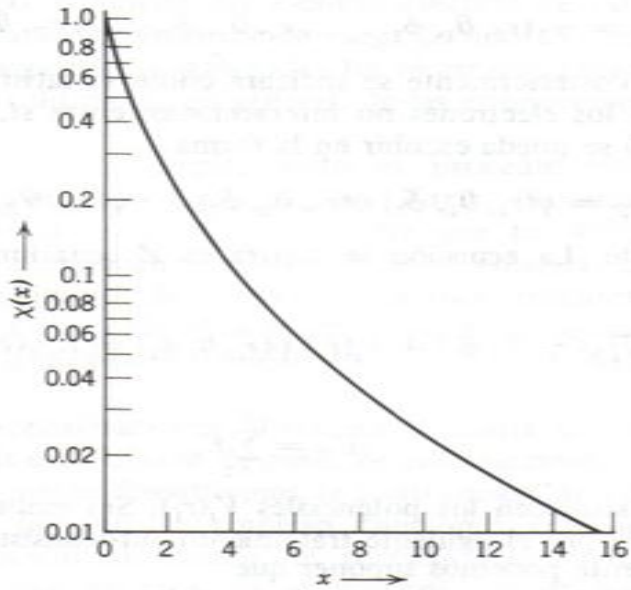

Figura 13-1. Gráfica de una función que aparece en la teoría de Thomas y Fermi.

ña, la teoría de Thomas y Fermi proporciona una buena descripción del comportamiento radial promedio del potencial neto y de la densidad de electrones. Sólo queremos, por ahora, llamar la atención sobre la ecuación (13–6), que afirma que el factor que relaciona a r con la variable adimensional x es proporcional a $Z^{-1/3}$. Puesto que la misma variable se usa para todos los átomos, al aumentar Z la escala radial para $\rho(r)$ se contrae de acuerdo con $Z^{-1/3}$. La teoría de Thomas y Fermi predice que el "tamaño" de los átomos decrece lentamente al aumentar Z.

3. La teoría de Hartree

En los años que siguieron a 1928, Hartree desarrolló una teoría más precisa para un sistema no perturbado correspondiente al estado base de un átomo con varios electrones. Consiste en resolver la ecuación de Schrödinger para un

www.FreeLibros.me

sistema de Z electrones que se mueven independientemente en potenciales netos esféricamente simétricos. La ecuación es

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{Z}\nabla_i^2\psi_T + \sum_{i=1}^{Z}V_i(r_i)\psi_T = E_T\psi_T \tag{13–12}$$

donde ∇_i^2 es el operador de Laplace en coordenadas esféricas del i-ésimo electrón (vea la ecuación 10–15) y $V_i(r_i)$ es la energía potencial de este electrón. El valor propio E_T es la energía total del átomo y ψ_T la función propia que describe el movimiento de los Z electrones. Esto es

$$\psi_T = \psi_T(r_1, \theta_1, \phi_1, \ldots, r_i, \theta_i, \phi_i, \ldots, r_Z, \theta_Z, \phi_Z) \tag{13–13}$$

Se ignora el spin. Posteriormente se indicará cómo se satisface el principio de exclusión. Ya que los electrones no interaccionan entre sí, esperamos que la solución a (13–12) se pueda escribir en la forma

$$\psi_T = \psi(r_1, \theta_1, \phi_1)\,\psi(r_2, \theta_2, \phi_2)\cdots\psi(r_Z, \theta_Z, \phi_Z) \tag{13–14}$$

Esta solución existe. La ecuación se separa en Z ecuaciones de Schrödinger para una partícula,

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_i^2\psi(r_i, \theta_i, \phi_i) + V_i(r_i)\,\psi(r_i, \theta_i\ \phi_i) = E_i\psi(r_i, \theta_i, \phi_i) \tag{13–15}$$

donde

$$E_T = \sum_{i=1}^{Z}E_i \tag{13–16}$$

Al principio se desconocen los potenciales $V_i(r_i)$. Sin embargo, aun se puede resolver el problema por el siguiente tratamiento autoconsistente.

1. Razonablemente podemos suponer que

$$V_i(r_i) = V(r_i), \qquad \text{para toda } i \tag{13–17}$$

donde $V(r_i)$ es el potencial neto calculado a partir de la teoría de Thomas y Fermi para el átomo con Z electrones. Con estos valores comunes para $V_i(r_i)$, todas las ecuaciones de Schrödinger para una partícula son idénticas.

2. Estas ecuaciones se pueden resolver por integración numérica, y se encuentran las funciones propias para una partícula: $\psi_\alpha(r_i, \theta_i, \phi_i)$, $\psi_\beta(r_i, \theta_i, \phi_i), \ldots, \psi_\iota(r_i, \theta_i, \phi_i), \ldots$. Estas se alistan conforme crecen valores propios de la energía. Cada uno de los números cuánticos $\alpha, \beta, \ldots, \iota, \ldots$ representa un conjunto completo de números cuánticos espaciales y de spin para un electrón.

3. Para obtener el estado base del átomo, se llenan los estados de una partícula de manera que la energía total (13–16) sea mínima, sin violar el principio de exclusión. Esto es, se llenan los estados de una partícula de energía creciente poniendo un electrón en cada estado. Las funciones propias de una partícula que describen Z electrones son

$$\psi_\alpha(r_1, \theta_1, \phi_1), \psi_\beta(r_2, \theta_2, \phi_2), \ldots, \psi_\iota(r_i, \theta_i, \phi_i), \ldots, \psi_\zeta(r_Z, \theta_Z, \phi_Z)$$

4. Se tiene estimación más precisa de los potenciales $V_i(r_i)$ integrando la ecuación que se obtiene combinando la ley de Gauss (ecuación 13–3) con la

www.FreeLibros.me

relación (13–14) entre el campo eléctrico y la energía potencial. Al calcular la energía de un electrón en particular, por ejemplo, el k-ésimo electrón, la cantidad $\rho(r)$ en la ecuación (13–3) se iguala a la suma de las densidades cuánticas de probabilidad para todos los estados llenos, excepto el estado κ ocupado por el k-ésimo electrón, promediado sobre la superficie esférica de radio r. Esto es,

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{\substack{i=\alpha \\ i \neq \kappa}}^{\zeta} \psi_i^*(r, \theta, \phi)\, \psi_i(r, \theta, \phi) r^2 \operatorname{sen} \theta \, d\theta \, d\phi \quad (13\text{–}18)$$

Entonces, la energía potencial del k-ésimo electrón se calcula a partir de la distribución esféricamente simétrica de carga debido al núcleo y de la dependencia radial de carga que portan todos los electrones excepto el k-ésimo. Las $V_i(r_i)$ así obtenidas diferirán, en general, de las estimaciones iniciales tomadas en el paso 1.

5. Si son distintas, se repite todo el procedimiento a partir de 2 y se emplea el nuevo conjunto de los $V_i(r_i)$. Después de varios ciclos $(2 \to 3 \to 4 \to 2 \to 3 \to 4 \to \ldots)$ se encuentra que los $V_i(r_i)$ obtenidas en el último ciclo son esencialmente iguales a los del anterior. El último conjunto de $V_i(r_i)$ es el conjunto de potenciales autoconsistentes, y las funciones propias calculadas a partir de ellos es el conjunto de las funciones propias de una partícula que describen el movimiento de los electrones en un átomo con varios electrones.

Existen varias aproximaciones obvias en la teoría de Hartree. En una de ellas se considera la distribución de carga de cada electrón como esféricamente simétrica. Posteriormente discutiremos la justificación de ello. Otra aproximación consiste en que no se emplean funciones antisimétricas, como las (12–16), para describir al sistema de partículas de Fermi. Este no es un defecto grave, ya que se satisface al principio de exclusión al cumplir el requisito del paso 3, de que sólo exista un electrón en cada estado cuántico. Una modificación de la teoría de Hartree que incluye las funciones propias antisimétricas fue formulada por Fock en 1930. Comparando estas dos teorías se observa que es pequeño el error introducido por no considerar funciones propias antisimétricas. En consecuencia, la mayoría de los cálculos se han hecho con la teoría original de Hartree ya que es relativamente más fácil de manejar. Aun así, los cálculos son tediosos y, hasta ahora, se han obtenido resultados sólo para un número reducido de átomos. A pesar de esto, las características esenciales de la descripción de Hartree de los átomos con varios electrones se entiende bastante bien.

Se encuentra que todos los potenciales autoconsistentes $V_i(r_i)$ son muy semejantes de manera que, en una buena aproximación podemos hablar de un solo potencial $V(r)$, en el cual se mueven independientemente todos los electrones de un átomo con varios electrones. Las funciones propias de una partícula para estos electrones en este potencial esféricamente simétrico son muy semejantes a las funciones propias del átomo con un solo electrón discutidas en el capítulo 10. Se pueden escribir como

$$\psi_{nlm_lm_s}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)\, \Theta_{lm_l}(\theta)\, \Phi_{m_l}(\phi) \sigma_{m_s} \quad (13\text{–}19)$$

www.FreeLibros.me

Las funciones propias se designan por el mismo conjunto de números cuánticos n, l, m_l, m_s, que se emplean para las funciones propias del átomo con un electrón, y la relación entre estos números cuánticos está dada por las ecuaciones (10–37). La función propia de spin σ_{m_s} es idéntica a la que se tiene para el átomo con un electrón. También éste es el caso de las funciones $\Theta_{lm_l}(\theta)$ y $\Phi_{m_l}(\phi)$. La razón es que la ecuación de Schrödinger (13–15) para un electrón en un potencial esféricamente simétrico es precisamente la ecuación (10–15). Esta ecuación conduce a las ecuaciones (10–17) y (10–18) y a sus soluciones $\Theta_{lm_l}(\theta)$ y $\Phi_{n_l}(\phi)$. En consecuencia toda la discusión del capítulo 10 referente a la dependencia con respecto a θ y ϕ de las funciones propias del átomo con un electrón se aplica directamente al caso de las funciones propias de una partícula del átomo con varios electrones.

Como un ejemplo, la ecuación (10–46) muestra que la suma de las densidades de probabilidad para las funciones propias del átomo con un electrón con $n = 2$, $l = 1$, y todos los valores posibles de m_l, es esféricamente simétrica. Esta afirmación es también válida cuando $n = 2$, $l = 0$, y se puede mostrar que es verdadera para cualquier valor de n y l. De esto concluimos que la afirmación también se aplica en el caso de las funciones propias de una partícula para un átomo con varios electrones. Ahora bien, cuando un átomo con varios electrones se encuentra en su estado base, están llenos todos los estados de una partícula que corresponden a las energías más bajas. Esto significa que para casi todos los valores de n y l existen electrones con todos los valores posibles para m_l. Puesto que la suma de las densidades de probabilidad para estos electrones es esféricamente simétrica, también lo será su distribución total de carga. Sólo los electrones en los estados más altos de energía en los cuales no se encuentran ocupados todos los estados con diferente m_l pueden dar lugar a una asimetría en la distribución de carga. Esto justifica considerar en la teoría de Hartree que la distribución de la carga sea esféricamente simétrica.

Las funciones $R_{nl}(r)$ que determinan el comportamiento radial de las funciones propias no coinciden con las del átomo con un electrón, ya que el potencial neto $V(r)$, que entra en la ecuación diferencial de estas funciones, no tiene la misma dependencia respecto a V que el potencial de Coulomb. En la figura 13–2 se muestran ejemplos del comportamiento radial de las funciones propias de una partícula. En esta figura haremos la gráfica de los resultados de la teoría de Hartree para el átomo de A ($Z = 18$) en términos de las cantidades $2(2l + 1)r^2R_{nl}^2(r) = 2(2l + 1)P_{nl}(r)$ donde $P_{nl}(r)$ es la densidad radial de probabilidad definida en la ecuación (10–43). Los electrones de este átomo llenan completamente los 18 estados cuánticos posibles de una partícula para los valores n y l mostrados en la figura. Ya que existen $2l + 1$ valores posibles de m_l para cada l y, para cada uno de ellos, 2 valores posibles para m_s, hay dos estados con $n = 1$, $l = 0$; 2 con $n = 2$, $l = 0$; 6 con $n = 2$, $l = 1$; 2 con $n = 3$, $l = 0$ y 6 con $n = 3$, $l = 1$. Cuando el átomo se encuentra en su estado base, estos estados están llenos ya que, como veremos posteriormente, son estados de mínima energía. La cantidad $2(2l + 1)P_{nl}(r)$ es, en consecuencia, la densidad radial de probabilidad para el estado con números cuánticos n y l multiplicada por el número de electrones en ese estado. Esta es la densidad radial de probabilidad para los electrones en ese estado; la suma de esas

www.FreeLibros.me

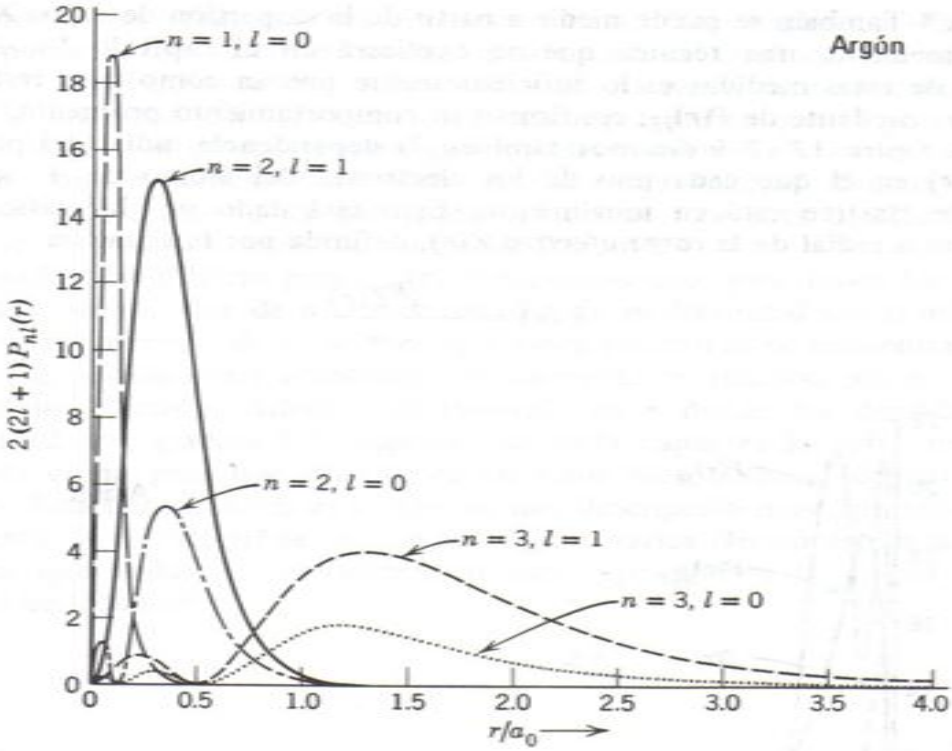

Figura 13-2. Las densidades radiales de probabilidad para los estados cuánticos llenos del átomo de argón conforme a la teoría de Hartree.

cantidades es $P(r)$, la *densidad radial de probabilidad total* para el átomo, que es la probabilidad de encontrar *algún* electrón cuya coordenada radial tenga el valor r. De este modo

$$P(r) = \sum_{n,l} 2(2l + 1)P_{nl}(r) \tag{13–20}$$

Se presenta la gráfica de esta cantidad en la figura 13–3 como $P(r)_H$ para el átomo de A. En la misma figura se hace la gráfica de $P(r)_{TF}$, que es la densidad radial de probabilidad total para el átomo de A calculado con la teoría de Thomas y Fermi. Observamos que la teoría de Thomas y Fermi proporciona una buena descripción del comportamiento promedio de la densidad radial de probabilidad total predicha por la teoría de Hartree, excepto que no decrece suficientemente rápido para valores grandes de r. La teoría de Thomas y Fermi también es imprecisa para valores pequeños de r, aunque esto no es evidente de la gráfica para $P(r)$ ya que, para r pequeña, domina el factor r^2. Mediante la dispersión de electrones por átomos es posible obtener una medida bastante directa de la densidad radial de probabilidad total. La distribución angular de los electrones dispersados depende, como se describirá en el capítulo 15, de la densidad radial de probabilidad total de los electrones

www.FreeLibros.me

atómicos.* También se puede medir a partir de la dispersión de rayos X por el átomo, mediante una técnica que se explicará en el capítulo 14. Aunque ninguna de estas medidas es lo suficientemente precisa como para resolver la estructura oscilante de $P(r)_H$, confirman su comportamiento promedio.

En la figura 13–3 indicamos también la dependencia radial del potencial neto $V(r)$ en el que cada uno de los electrones del átomo de A, según la teoría de Hartree está en movimiento. Esto está dado por la gráfica de la dependencia radial de la *carga efectiva* $Z(r)$, definida por la ecuación

$$V(r) = -\frac{e^2 Z(r)}{r} \tag{13–21}$$

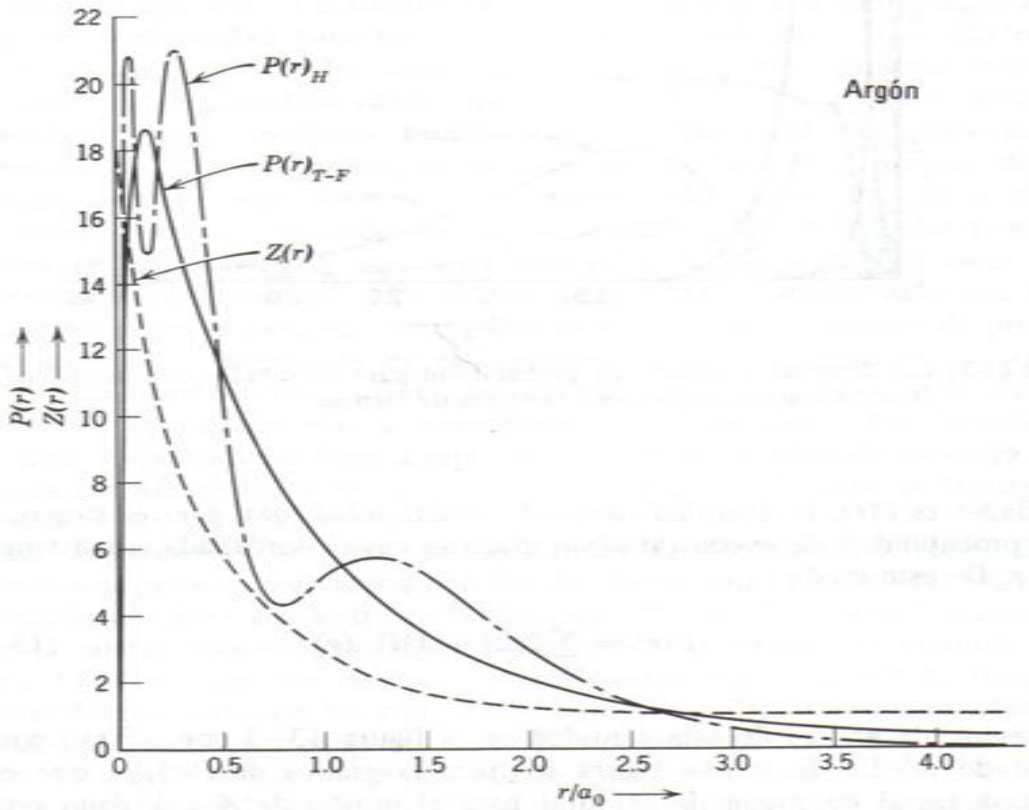

Figura 13-3. Las densidades radiales de probabilidad total del átomo de argón conforme a las teorías de Hartree, y Thomas y Fermi, y la carga efectiva de ese átomo conforme a la teoría de Hartree.

* El lector recordará que esto es muy diferente de la información proporcionada por la dispersión de partículas alfa por un átomo. La razón es que en los experimentos con electrones la masa de la partícula dispersada es igual a la de un electrón atómico, mientras que en los experimentos con partículas alfa la masa de la partícula dispersada es mucho mayor que la del electrón atómico que esencialmente no es dispersada por los electrones atómicos.

www.FreeLibros.me

Puede entenderse fácilmente el comportamiento $Z(r)$. Cuando $r \to 0$, en la energía potencial del electrón domina la atracción de Coulomb del núcleo de carga $+Ze$. Así, $V(r) \to -e^2 Z/r$ y $Z(r) \to Z = 18$. Al aumentar r, disminuye $Z(r)$ ya que la magnitud de $V(r)$ disminuye más rápidamente que el potencial de Coulomb debido al núcleo, puesto que los electrones cuya coordenada radial es menor que r blindan una parte de la carga nuclear. Cuando $r \to \infty$, $V(r) \to -e^2/r$ y $Z(r) \to 1$, ya que la carga nuclear $+Ze$ está blindada por la carga $-(Z-1)e$ de los otros electrones del átomo.

Al estudiar las gráficas para $P_{nl}(r)$ observamos que, para todos los electrones con el mismo valor de n, las densidades de probabilidad son grandes sólo en el mismo intervalo de r. Se dice que estos electrones se encuentran en la misma *capa*, terminología empleada anteriormente en relación con los átomos con un solo electrón. Además, el intervalo en r donde las densidades de probabilidad son grandes (el "espesor" de cada capa) es lo suficientemente restringida como para que $Z(r)$ tenga un valor bien definido dentro de ese intervalo. Esta circunstancia es la base de una descripción muy aproximada del movimiento de los electrones en un átomo con varios electrones, en la cual se considera que todos los electrones en una capa poseen la misma energía potencial de Coulomb

$$V_n(r) = -\frac{e^2 Z_n}{r} \tag{13–22}$$

donde Z_n es una constante igual a $Z(r)$ calculada en el valor promedio de r para la capa (el "radio" de la capa). Como un ejemplo, a partir de las figuras 13–2 y 13–3 encontramos que, para el átomo A, $Z_1 \simeq 16$, $Z_2 \simeq 8$, $Z_3 \simeq 2.5$. En la aproximación (13–22), las ecuaciones para el átomo con un electrón que especifican el valor esperado de r, la energía total, etc., se pueden emplear substituyendo Z por Z_n. Esto es bastante preciso para la capa $n = 1$ y sólo aproximado, dentro de un factor de 2 ó 3, para la capa $n = 3$ del átomo de A. Sin embargo, la aproximación es útil, ya que proporciona una imagen comprensible de muchos de los resultados básicos de la teoría de Hartree.

En la teoría de Hartree, los radios de las capas con n pequeña son pequeños, ya que para ellos el blindaje es pequeño y los electrones sienten completa la atracción de Coulomb del núcleo. En efecto, el radio de la capa $n = 1$ es menor que el de la capa $n = 1$ del átomo de H por un factor $1/Z_1$, lo que podemos entender en nuestra descripción aproximada a partir de la ecuación (10–44). Los electrones que se encuentran en estas *capas internas* tienen una energía potencial negativa grande, de manera que sus energías totales son, por consiguiente, grandes y negativas. La teoría de Hartree muestra que la magnitud de la energía total de un electrón en la capa $n = 1$ es mayor que la del electrón en la capa $n = 1$ del átomo de H aproximadamente por el factor Z_1^2, como se puede entender a partir de la ecuación (10–38). Por otra parte, los electrones que se encuentran en una capa con n grande sienten una atracción de Coulomb del núcleo considerablemente disminuida debido al blindaje de los electrones de las capas interiores. En estas *capas externas* los electrones perciben sólo una fracción pequeña de la fuerza de atracción del núcleo. A partir de la ecuación (10–44) es posible estimar el radio de las

www.FreeLibros.me

capas más externas de los átomos de diferente número atómico empleando el valor apropiado de Z_n. La ecuación predice que el radio aumenta al aumentar el valor de n de las capas más externas, un poco menos rápido que n^2, ya que Z_n aumenta lentamente al aumentar el número atómico, en virtud de que el blindaje de la carga nuclear no es perfecto. En realidad, la teoría de Hartree no predice este aumento en el radio de las capas más externas, sino uno *mucho* menos rápido que n^2,* ya que los electrones de las capas más externas tienen una probabilidad pequeña de encontrarse en una región cercana al centro del átomo lo que hemos ignorado en nuestra descripción aproximada. Aunque esta probabilidad es pequeña, tiene su importancia, ya que cerca del centro los electrones sienten una atracción muy intensa que tiende a disminuir el radio de la capa. Este efecto es tanto más importante cuanto mayor sea el número atómico y, junto con el aumento en Z_n, lleva a una consecuencia importante de la teoría de Hartree según la cual el radio de las capas más externas debe ser aproximadamente el mismo para todos los átomos. Finalmente, de nuestra descripción aproximada podemos ver por qué la teoría de Hartree predice que la energía total del electrón en la capa más externa es comparable a la de un electrón en el estado base del átomo de H, independientemente del átomo que se trate. Para esta capa Z_n es del orden de la unidad, de manera que la energía potencial es comparable a la energía potencial de un electrón en el átomo de H. Cada una de las predicciones de la teoría de Hartree que hemos mencionado en este párrafo se han confirmado experimentalmente.

En un átomo con un electrón, todos los electrones en una capa dada tienen la misma energía total, si se ignoran efectos muy pequeños como es la interacción spin-órbita.** Esto se debe a que en esta clase de átomos la energía total depende sólo del número cuántico n, de manera que es igual para todos los electrones en la misma capa independientemente de los valores del número cuántico l. Este no es el caso para un átomo con varios electrones, lo cual no es sorprendente ya que, como hemos mencionado en varias ocasiones, la independencia de l de la energía total de un átomo con un electrón es una consecuencia de que la energía potencial varía como $1/r$. En un átomo con varios electrones, su energía potencial neta $V(r)$ no varía exactamente como $1/r$ y su energía total E_{nl} depende tanto de l como de n. Sin embargo, ya que ignoramos la interacción spin-órbita y otros efectos, la energía total es independiente tanto del número cuántico m_s que determina la orientación espacial del spin, como del número cuántico m_l que determina la orientación espacial de la "órbita". Las características importantes de la dependencia de E_{nl} con n se describieron aproximadamente en el párrafo anterior en términos de la ecuación de la energía para un átomo con un electrón con Z reemplazada por Z_n. Esto es, tomamos

$$E_{nl} \sim -\mu Z_n^2 e^4/2\hbar^2 n^2 \tag{13–23}$$

* Esta afirmación no contradice la predicción de la teoría de Thomas y Fermi de una disminución gradual en el radio total al aumentar el número atómico.

** Con esto queremos decir que las energías totales de los electrones en diferentes átomos de un electrón son iguales si los electrones tienen el mismo valor del número cuántico n.

www.FreeLibros.me

Para n pequeña, se vuelve menos negativa al aumentar n mucho más rápidamente que en el caso de un átomo con un electrón, debido a la variación de Z_n con n. Para n grande, Z_n no cambia rápidamente, de modo que E_{nl} tiene una variación menos rápida con n, semejante a la de la energía total de un átomo con un electrón. Ahora bien, los resultados de la teoría de Hartree muestran que E_{nl} es, de hecho, más negativa que la indicada en la aproximación (13–23). Además, la diferencia es mayor para $l = 0$, y disminuye progresivamente al aumentar l. La diferencia es apreciable. De hecho, para valores grandes de n, E_{nl} puede variar con l más fuertemente que con n.

Es fácil comprender que la energía total depende de l en términos del comportamiento de $Z(r)$ y la densidad de probabilidad $\psi^*_{nlm_lm_s}\psi_{nlm_lm_s}$ cuando $r = 0$. En (10–45') señalamos que

$$\psi^*_{nlm_lm_s}\psi_{nlm_lm_s} \propto r^{2l}, \quad r \to 0 \tag{13–24}$$

Esta relación se refiere a las funciones propias del átomo con un electrón, pero es igualmente cierta para el átomo con varios electrones en virtud de que el término $-l(l+1)/r^2$ en la ecuación diferencial (10–27), que describe el comportamiento radial de las funciones propias, domina completamente al término $(2\mu/\hbar^2)[E - V(r)]$ para r pequeña.* En consecuencia, cuando $r \to 0$ carece de importancia la forma exacta de $V(r)$, y todas las funciones propias para potenciales esféricamente simétricos tienen el comportamiento r^l de (10–45). Consideremos ahora dos electrones en la misma capa, de un átomo con varios electrones, uno de ellos con $l = 0$ y el otro con $l = 1$. Conforme a (13–24) existe alguna probabilidad de encontrar el electrón con $l = 0$ en una región con r pequeña; la probabilidad de encontrar el electrón con $l = 1$ en esta región es, por el contrario, muy pequeña, ya que $r^0 \simeq 1$ y $r^2 \simeq 0$ para r pequeña. Aunque el electrón $l = 0$ sólo pasará una parte despreciable de su tiempo cerca de $r = 0$, produce una diferencia apreciable en el valor promedio de su energía potencial ya que $Z(r)$ se vuelve muy grande en la vecindad de $r = 0$, de modo que la energía potencial neta $V(r)$ se vuelve muy negativa. Así, la energía potencial promedio para el electrón $l = 0$ será más negativa que la correspondiente al electrón $l = 1$. De manera semejante se puede ver que la energía potencial del electrón $l = 1$ será más negativa que la correspondiente al electrón $l = 2$ de la misma capa ya que $r^2 \gg r^4$ para r pequeña. Por el otro

* Puede obtenerse una interpretación instructiva del primero de estos términos haciendo la substitución $u = rR$ en la ecuación (10–27). Se obtiene

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left\{-\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)]\right\}u = 0$$

o sea

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2} + \left\{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r)\right\}u = Eu$$

que puede considerarse como equivalente a la ecuación de Schrödinger para el movimiento en una dimensión donde se ha sumado el término $l(l+1)\hbar^2/2\mu r^2 = L^2/2\mu r^2$ al potencial $V(r)$. Frecuentemente a este término se le llama *potencial centrífugo*, nombre que puede justificarse al considerar la ecuación clásica de la conservación de la energía para una partícula de masa μ cuya energía potencial es $V(r)$. Puesto que la partícula se moverá

www.FreeLibros.me

lado, la energía cinética promedio para el electrón $l = 0$ es mayor que aquella para el electrón $l = 1$, ya que se encuentra un mayor tiempo en la región de energía potencial grande. Sucede que estos dos efectos se cancelan exactamente para un potencial para el que $Z(r)$ es constante; así, para el potencial de Coulomb $1/r$ de un átomo con un electrón, la energía total no depende de l. En todos los otros casos, la energía total depende tanto de l como de n. En un átomo con varios electrones, la dependencia respecto a l de la energía potencial promedio domina la dependencia respecto a l de la energía cinética promedio, y la energía total E_{nl}, que es la suma de las energías cinética y potencial, es más negativa para $l = 0$ que para $l = 1$, más negativa para $l = 1$ que para $l = 2$, etc. Cuando la Z es grande, en cuyo caso $Z(r)$ aumenta especialmente rápido al disminuir r en la región cercana a $r = 0$, y para las capas externas con n grande donde la dependencia de E_{nl} respecto a n es débil, la dependencia de E_{nl} respecto a l es más fuerte que respecto a n. Veremos que esto tiene una importancia grande en la estructura de los átomos con varios electrones.

Todos los electrones de una capa particular tienen densidades de probabilidad que poseen aproximadamente la misma forma en la región donde sus valores son grandes; por el contrario, son apreciablemente diferentes en la región cercana a $r = 0$. Como hemos visto, el resultado es que las energías totales de los electrones en una capa no son iguales. Por esto es conveniente considerar que cada capa está compuesta de *subcapas*, una para cada valor de l. Todos los electrones en una subcapa particular tienen los mismos números cuánticos n y l. En consecuencia, tienen la misma energía total (cuando se desprecian la interacción spin-órbita y otros efectos) e iguales densidades radiales de probabilidad $P_{nl}(r)$.

---

en un plano que contiene al origen, puede describirse por las coordenadas r y θ. La ecuación para la energía es

$$E = \tfrac{1}{2}\mu\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + \tfrac{1}{2}\mu\left(r\frac{d\theta}{dt}\right)^2 + V(r)$$

El impulso angular orbital de la partícula también es constante,

$$L = \mu r^2 \frac{d\theta}{dt}$$

de manera que la ecuación se puede escribir como

$$E = \tfrac{1}{2}\mu\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + \left\{\frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r)\right\}$$

y considerarse como la ecuación clásica de la conservación de la energía para el movimiento en una dimensión, donde se ha sumado el término $L^2/2\mu r^2$ al potencial $V(r)$. Este término positivo actúa como un potencial de repulsión, que tiende a mantener a la partícula alejada del origen. El efecto es tanto más pronunciado cuanto mayor sea el valor de L.

www.FreeLibros.me

TABLA 13-1
Tabla periódica de los elementos

	s^1	s^2	d^1	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}	p^1	p^2	p^3	p^4	p^5	p^6
																		2 He $1s^2$
$1s$	1 H																	
$2s$	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
$3s$	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 A
$4s$	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr $4s^1 3d^5$	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu $4s^1 3d^{10}$	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
$5s$	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb $5s^1 4d^4$	42 Mo	43 Tc	44 Ru $5s^1 4d^7$	45 Rh $5s^1 4d^8$	46 Pd $5s^0 4d^{10}$	47 Ag $5s^1 4d^{10}$	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
$6s$	55 Cs	56 Ba	57 — La Lantánidos	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt $6s^1 5d^9$	79 Au $6s^1 5d^{10}$	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
$7s$	87 Fr	88 Ra	89 — Ac Actínidos															

Lantánidos $4f$	58 Ce $5d^1 4f^1$	59 Pr $5d^0 4f^3$	60 Nd $5d^0 4f^4$	61 Pm ?	62 Sm $5d^0 4f^6$	63 Eu $5d^0 4f^7$	64 Gd $5d^1 4f^7$	65 Tb $5d^1 4f^8$	66 Dy ?	67 Ho ?	68 Er ?	69 Tm $5d^0 4f^{13}$	70 Yb $5d^0 4f^{14}$	71 Lu $5d^1 4f^{14}$
Actínidos $5f$	90 Th $6d^2 5f^0$	91 Pa ?	92 U $6d^1 5f^3$	93 Np ?	94 Pu ?	95 Am $6d^0 5f^7$	96 Cm ?	97 Bk ?	98 Cf ?	99 Es ?	100 Fm ?	101 Md ?	102 No ?	
	f^1	f^2	f^3	f^4	f^5	f^6	f^7	f^8	f^9	f^{10}	f^{11}	f^{12}	f^{13}	f^{14}

www.FreeLibros.me

4. La tabla periódica

Algunas de las propiedades más importantes de los elementos son funciones periódicas del número atómico Z, el número de electrones en un átomo neutro de ese elemento. Podemos demostrarlo arreglando los elementos en una tabla como la que se muestra en la figura 13–1. Cada elemento se representa por su símbolo químico y por su número atómico. (Las anotaciones que ocasionalmente aparecen debajo de cada símbolo químico especifican los números cuánticos para el estado base de un elemento en una forma que se explicará posteriormente.) Los elementos que poseen propiedades físicas y químicas semejantes se encuentran en la misma columna. Por ejemplo, los elementos de la primera columna son alcalinos y tienen valencia +1; todos los elementos de la última columna son gases nobles y tienen valencia 0. Suponemos que el lector conoce, aunque sea parcialmente, las propiedades periódicas de los elementos. Nuestra tarea consistirá en interpretar estas propiedades en términos de la teoría de los átomos con varios electrones.

Esta interpretación se basa en la forma como las capas externas llenas de un átomo con varios electrones se ordenan conforme a su energía. En principio esta información podría obtenerse completamente mediante la teoría de Hartree descrita en la última sección. Sin embargo, sólo para un número reducido de átomos se han efectuado cálculos, de modo que la mayor parte de la información requerida se deberá obtener experimentalmente, lo cual se puede hacer mediante el estudio del espectro emitido cuando los átomos excitados efectúan una transición al estado base. En estas transiciones un electrón pasa de algún estado de una partícula con alta energía al de energía mínima que esté desocupado. Este estado es el estado ocupado con energía máxima cuando el átomo se encuentra en su estado base. A partir del análisis de las líneas espectrales emitidas se pueden conocer los números cuánticos n y l del estado de una partícula. Esto permite identificar la subcapa exterior de energía máxima que se encuentra llena cuando el átomo está en su estado base. Al efectuar este análisis para un número grande de elementos, se encuentra que, salvo desviaciones pequeñas que se describirán posteriormente, el orden de las subcapas conforme a la energía es el mostrado en la tabla 13–2. La primera columna identifica la subcapa por los números n y l. La segunda columna hace lo mismo, excepto que n y l están expresados en la *notación espectroscópica*, que se usa comúnmente en la discusión del espectro y de los niveles de energía de los átomos. El número indica el valor de n y la letra el de l conforme al esquema mostrado en la tabla 13–3. La tercera columna de la tabla 13–2 da el valor de $2(2l + 1)$ que, como se mencionó en la sección anterior, es el número de estados cuánticos que son posibles para el valor l característico de la subcapa. Así, esta columna da el número máximo de electrones que pueden ocupar la subcapa sin violar el principio de exclusión.

Mediante la teoría de Hartree se pueden obtener explícitamente varias de las características del orden observado experimentalmente de las subcapas exteriores que se encuentran llenas. Por ejemplo, los cálculos para el átomo de K muestran que la energía de un electrón en la subcapa $4s$ debe ser menor que la del electrón en la subcapa $3d$ del mismo átomo, como acontece en la

www.FreeLibros.me

TABLA 13–2
Orden de la energía de las subcapas exteriores que se encuentran llenas

Números cuánticos n, l	Designación de subcapas	Capacidad de subcapas $2(2l+1)$	
—	—	—	
—	—	—	
6, 2	6*d*	10	
5, 3	5*f*	14	
7, 0	7*s*	2	
6, 1	6*p*	6	
5, 2	5*d*	10	
4, 3	4*f*	14	
6, 0	6*s*	2	↑
5, 1	5*p*	6	
4, 2	4*d*	10	Energía en aumento (menos negativa)
5, 0	5*s*	2	
4, 1	4*p*	6	
3, 2	3*d*	10	
4, 0	4*s*	2	
3, 1	3*p*	6	
3, 0	3*s*	2	
2, 1	2*p*	6	
2, 0	2*s*	2	
1, 0	1*s*	2	← Energía mínima (más negativa)

TABLA 13–3
La notación espectroscópica para *l*

l	0	1	2	3	4	5	6	...
Notación espectroscópica	*s*	*p*	*d*	*f*	*g*	*h*	*i*	...

realidad además, todas las características que se observan experimentalmente se pueden entender, por lo menos cualitativamente, en términos de la descripción proporcionada por la teoría de Hartree. En la última sección encontramos que esta teoría predice que la energía es tanto más negativa cuanto menores sean los valores de n y l. Podemos constatarlo en la tabla 13–2. La subcapa 1*s*, que es la única en la capa $n = 1$ tiene la mínima energía. Las dos subcapas de la capa $n = 2$ son de energía mayor y, de éstas, la energía de la subcapa 2*s* es menor que la de la subcapa 2*p*. En la capa $n = 3$, la energía de las tres subcapas 3*s*, 3*p* y 3*d* es el predicho en el orden correcto por la teoría de

www.FreeLibros.me

Hartree. Sin embargo, la energía de la subcapa $4s$ es menor que la de la subcapa $3d$ ya que, por las razones aducidas en la última sección, la variación de E_{nl} con l es más importante que la variación con respecto a n para las capas exteriores cuyo valor de n es grande. Prosiguiendo la lista hacia arriba vemos que el orden de las subcapas siempre satisface la regla siguiente: dado un valor de n la subcapa con menor l tiene la energía menor; dado un valor de l, la subcapa con menor n tiene la energía menor. Cerca del final de la lista, la dependencia de E_{nl} respecto a l es mucho más fuerte que la dependencia respecto a n, de manera que la energía de la subcapa $7s$ es menor que la de la subcapa $5f$. Debe mencionarse que la tabla 13–2 no da necesariamente el orden en la energía de todas las subcapas en un átomo particular, sino sólo el orden en la energía de las subcapas más externas de ese átomo. Por ejemplo, la energía de la subcapa $4s$ es menor que la energía de la subcapa $3d$ en el átomo de K y en algunos de los que le siguen, pero para los átomos cerca del final de la tabla periódica la energía de la subcapa $3d$ es menor que la de la subcapa $4s$ ya que, para estos átomos, son subcapas internas y la dependencia de E_{nl} respecto a n es mayor que la dependencia respecto a l.

Las características de un átomo dependen del movimiento de sus electrones, el cual está determinado por el conjunto de cuatro números cuánticos que especifica su estado cuántico. Sin embargo, en la aproximación de Hartree son importantes sólo los números cuánticos n y l. En consecuencia, conforme a esta aproximación, un átomo puede caracterizarse especificando los números cuánticos n y l de las subcapas ocupadas por los electrones. A este conjunto de números cuánticos se le llama *configuración*. Conociendo cómo están ordenadas respecto a la energía las capas exteriores llenas, es trivial determinar la configuración de cualquier átomo en su estado base, ya que en este caso los electrones deben ocupar todas las subcapas de modo que la energía total sea mínima sin exceder la capacidad $2(2l + 1)$ de cualquier subcapa. Las subcapas se llenarán conforme su energía aumenta, como se indica en la tabla 13–2. Considere, en primer lugar, el átomo de H. El único electrón ocupa la subcapa $1s$. En el átomo de He ambos electrones se encuentran en la subcapa $1s$, como lo discutimos en la sección 5 del capítulo 12. La configuración del H se escribe como

$$^{1}\mathrm{H}: \quad 1s^{1}$$

y la del He como

$$^{2}\mathrm{He}: \quad 1s^{2}$$

El índice superior en la designación de la subcapa especifica el número de electrones que contiene; el índice superior en el símbolo químico especifica el valor de Z para el átomo. En el átomo ^{3}Li, uno de los electrones debe estar en la subcapa $2s$, ya que la subcapa $1s$ se llena con dos electrones. La configuración de este átomo es

$$^{3}\mathrm{Li}: \quad 1s^{2}2s^{1}$$

El átomo ^{4}Be completa la subcapa $2s$ y tiene la configuración

$$^{4}\mathrm{Be}: \quad 1s^{2}2s^{2}$$

www.FreeLibros.me

De ^{5}B al ^{10}Ne los electrones adicionales llenan la subcapa $2p$. Las configuraciones del ^{5}B y del ^{10}Ne son

$$^{5}B: \quad 1s^2 2s^2 2p^1$$
$$^{10}Ne: \quad 1s^2 2s^2 2p^6$$

El lector observará que la tabla periódica de los elementos presentada en la tabla 13–1 está dividida verticalmente en una serie de bloques cuyos renglones se designan por las subcapas que, conforme a la tabla 13–2, llenan los elementos del renglón. Con esta información es fácil escribir la configuración de cualquier átomo empleando un procedimiento que se ilustrará por comparación con las configuraciones alistadas anteriormente. La configuración de los átomos para los que los últimos electrones se encuentran en subcapas diferentes a las predichas por este esquema se indican en las anotaciones debajo del símbolo químico del elemento. Como ilustración de la forma como se emplea esta información para escribir la configuración de un átomo, presentamos algunos ejemplos:

$$^{19}K: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$$
$$^{23}V: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^3$$
$$^{24}Cr: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$$
$$^{43}Tc: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^5$$
$$^{44}Ru: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1 4d^7$$
$$^{46}Pd: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 4d^{10}$$
$$^{57}La: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 5d^1$$
$$^{58}Ce: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 5d^1 4f^1$$
$$^{59}Pr: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^3$$

Vemos que, en ciertos casos, la configuración observada no se ajusta estrictamente a las predicciones de la tabla 13–2. Por ejemplo, en la tabla se indica que la energía de la subcapa $3d$ es mayor que la de la subcapa $4s$ cuando éstas se están llenando. Sin embargo, en el ^{24}Cr, y también en el ^{29}Cu, uno de los electrones que podría estar en la subcapa $4s$ se encuentra en la subcapa $3d$. Se observa una situación análoga en las subcapas $4d$ y $5s$. En el ^{43}Tc la subcapa $5s$ se llena normalmente, mientras que en ^{45}Rb sólo hay un electrón en la subcapa $5s$ y en el ^{46}Pd ambos electrones han abandonado la subcapa $5s$ para ocupar la $4d$. Las configuraciones del ^{78}Pt y del ^{79}Au muestran lo mismo para las subcapas $5d$ y $6s$. De lo anterior concluimos que las diferencias de energía entre las subcapas $3d$ y $4s$, $4d$ y $5s$, y $5d$ y $6s$ son tan pequeñas cuando se están llenando que, aunque el orden de estas subcapas es el indicado en la tabla 13–2, en ciertos casos este orden puede invertirse Se observan también configuraciones que discrepan de lo especificado en la tabla 13–2 en el ^{57}La y en los *lantánidos* ($58 \leqslant Z \leqslant 71$), llamados ordinariamente *tierras raras*. La tabla predice que la subcapa $4f$ empezará a llenarse después de que la subcapa $6s$ esté completamente llena. Pero en el ^{57}La, y en algunas tierras raras, hay un electrón $5d$. Un fenómeno semejante se presenta en los elementos que siguen al ^{89}Ac, denominados *actínidos* ($90 \leqslant Z \leqslant 103$).

www.FreeLibros.me

Por los mismos argumentos presentados anteriormente, de estas observaciones puede inferirse que las diferencias en energía entre las subcapas *5d* y *4f*, y *6d* y *5f* son muy pequeñas cuando ellas se están llenando.

Sin embargo, siempre se obedecen algunas de las predicciones de la tabla 13–2. Ya que no hay excepción para las configuraciones de los elementos de las dos primeras columnas y para los de las seis últimas de la tabla periódica 13–1, concluimos que la energía de cualquier subcapa *p* es siempre mayor que las de las subcapas *s* o *d* que le anteceden cuando estas últimas se están llenando y que, en estas circunstancias, la energía de cualquier subcapa *s* es mayor que la de la subcapa *p* que le precede. En consecuencia, la diferencia en energía entre estas subcapas debe ser grande cuando se están llenando. De hecho, las diferencias en energía son *particularmente* grandes entre cada subcapa *s* y la subcapa *p* que le precede, lo que puede entenderse fácilmente: para *n* fija, la energía de la subcapa aumenta al aumentar *l* y la subcapa *s* es siempre la primera en ocuparse al llenar una nueva capa. En consecuencia, cuando se añade un electrón a una configuración que tiene la subcapa *p* llena y va a la subcapa inmediatamente superior en energía, que siempre es una subcapa *s* como lo indica la tabla 13–2, este electrón será el primero en una nueva capa. En comparación con los electrones de la subcapa precedente, el promedio de su coordenada radial será considerablemente mayor y su energía potencial promedio será considerablemente menos negativa y, en consecuencia, su energía total será considerablemente mayor, mucho más elevada que el aumento normal en la energía total al pasar de una subcapa a la siguiente.

El que la diferencia de energía entre cada subcapa *s* y la *p*, que la precede, sea particularmente grande, tiene algunas consecuencias importantes. Considere los elementos ^{10}Ne, ^{18}A, ^{36}Kr, ^{54}Xe y ^{86}Rn, en los cuales acaba de llenarse la subcapa *p*. A causa de la gran diferencia en energía entre la subcapa *p* y la *s*, el primer estado excitado de estos átomos se encuentra excepcionalmente lejos por encima del estado base. En consecuencia, es particularmente difícil excitar estos átomos y son muy inertes. Además, no producen ningún campo externo, porque constan de conjuntos de subcapas completamente llenas y, en consecuencia, sus distribuciones de carga son esféricamente simétricas.* Veremos posteriormente que los átomos que tienen completamente llenas sus subcapas no producen campos magnéticos externos. Estos no pueden interaccionar con otros átomos y formar compuestos químicos. Estos elementos se llaman *gases nobles*. Además, el ^{2}He es un gas noble, porque la primera subcapa vacía es una subcapa *s* (aun cuando no contiene una subcapa *p* llena) de modo que su primer estado excitado se encuentra excepcionalmente por encima del estado base, y también porque tiene subcapas completamente llenas y no produce campos eléctricos o magnéticos externos. Puesto que el

* Obviamente no existe un campo externo de monopolo eléctrico (el campo producido por una sola carga). Cuando el átomo es neutro. Tampoco existe un campo externo de dipolo eléctrico (el campo producido por dos cargas de signo opuesto que han sido desplazadas) debido a la simetría de la distribución de carga. Sin embargo, existe un campo externo de cuadripolo eléctrico (el campo producido por dos dipolos idénticos colocados a lo largo de una recta de modo que coincidan en un punto las cargas del mismo signo de cada dipolo) a menos que la distribución de carga del átomo tenga simetría esférica. Véase la ecuación (10–46).

www.FreeLibros.me

^{2}He es un gas noble, está colocado en la última en lugar de la segunda columna de la tabla periódica. El ^{20}Ca no es un gas noble, a pesar de que están llenas todas las subcapas, puesto que en su primer estado excitado un electrón pasa a la subcapa $3d$, de modo que el primer estado excitado no está muy lejano del estado base y el átomo no es particularmente inerte.

Puede considerarse otro aspecto de lo particularmente inertes que son los gases nobles haciendo la gráfica, para los diferentes elementos, los valores medidos de la energía total de un electrón que se encuentra en la subcapa llena de mayor energía. Esta es igual a la energía necesaria para extraer al electrón del átomo. En la figura 13–4 se muestra tal gráfica. Observamos que la energía de ionización oscila alrededor de un valor promedio, que esencialmente es independiente de Z, en concordancia con nuestra conclusión anterior de que la energía total de los electrones en las capas externas es aproximadamente la misma a lo largo de la tabla periódica. Sin embargo, las oscilaciones son bastante pronunciadas, y es claro que la energía total de un electrón en la subcapa llena de mayor energía de un gas noble es considerablemente más negativa que el promedio. Estos electrones están firmemente ligados, y es muy difícil ionizar estos átomos.

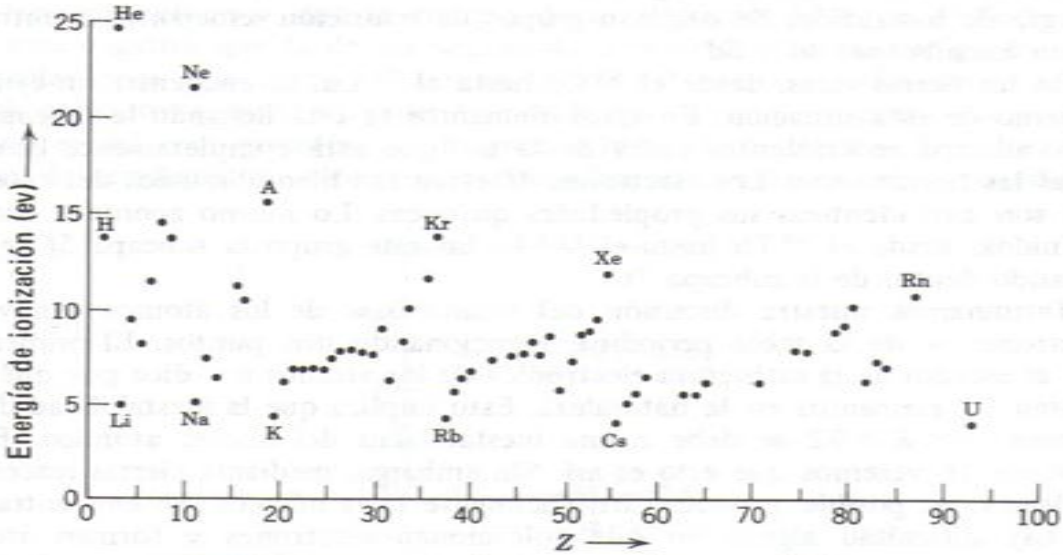

Figura 13-4. La energía de ionización de los átomos.

Observamos que es particularmente pequeña la energía de ionización del ^{3}Li, ^{11}Na, ^{19}K, ^{37}Rb y ^{55}Cs (no se ha medido la del ^{87}Fr). Estos elementos son los *alcalinos*. Contienen sólo un electrón débilmente ligado en una subcapa s. Los elementos alcalinos son muy activos químicamente, ya que prescinden fácilmente del electrón débilmente ligado para retroceder a un arreglo más estable que se obtiene al tener sus subcapas completamente llenas. Estos elementos tienen valencia de +1. En el otro extremo están los *halógenos*, ^{9}F,

www.FreeLibros.me

^{17}Cl, ^{35}Br, ^{53}I y ^{85}At, que les falta un electrón para que la subcapa *p* esté completamente llena. Estos elementos capturan fácilmente un electrón y tienen una valencia de −1.

Las propiedades de los elementos de los tres primeros renglones de la tabla periódica 13−1 y, tales como la valencia y la energía de ionización, cambian uniformemente desde el elemento alcalino, donde se inicia el renglón, hasta el gas noble, donde termina el renglón. Esta situación no es completamente cierta para el cuarto renglón. Desde el ^{21}Sc hasta el ^{28}Ni, el *primer grupo de transición*, los elementos tienen propiedades químicas muy semejantes y sus energías de ionización son casi las mismas. En estos elementos se está llenando la subcapa *3d*. El radio de esta subcapa es considerablemente menor que el de la *4s*, que está llena completamente para todo el primer grupo de transición, excepto para el ^{24}Cr. Los electrones de la subcapa *4s* llena tienden a blindar de influencias externas a los electrones de la subcapa *3d*, de manera que son semejantes las propiedades de estos elementos independientemente del número de electrones contenidos en la subcapa *3d*. Las propiedades químicas del ^{29}Cu difieren bastante de las del primer grupo de transición ya que sólo tiene un electrón *4s* en la subcapa más externa. Esto es cierto, aunque en menor medida, para el ^{24}Cr. Todas las subcapas del ^{30}Zn están completamente llenas, de manera que es algo más inerte, como se puede observar de su energía de ionización. Se originan grupos de transición semejantes mientras se llenan las subcapas *4d* y *5d*.

En las tierras raras, desde el ^{58}Ce hasta el ^{71}Lu, se encuentra un ejemplo extremo de esta situación. En estos elementos se está llenando la subcapa *4f*. Esta subcapa se encuentra cerca de la *6s*, que está completamente llena en todas las tierras raras. Los electrones *4f* están tan bien blindados del exterior, que son casi idénticas sus propiedades químicas. Lo mismo acontece con los actínidos, desde el ^{90}Th hasta el ^{103}?. En este grupo la subcapa *5f* se está llenando dentro de la subcapa *7s*.

Terminamos nuestra discusión del estado base de los átomos con varios electrones, y de la tabla periódica, mencionando dos puntos. El primero es que el estudio de la estructura electrónica de los átomos no dice por qué sólo existen 92 elementos en la naturaleza. Esto implica que la inestabilidad de los átomos con $Z > 92$ se debe a una inestabilidad del núcleo atómico. En el capítulo 16 veremos que esto es así. Sin embargo, mediante ciertas reacciones nucleares, es posible producir artificialmente tales núcleos. Se encuentra que no hay dificultad alguna en que coleccionen electrones y formen átomos perfectamente estables, siempre que el núcleo sea estable. Los miembros del grupo actínido con $Z > 92$, los llamados *elementos transuránicos*, se forman de esta manera.

El segundo punto es la importancia del carácter antisimétrico de los electrones que los hace obedecer el principio de exclusión. Si no obedecieran este principio todos los electrones del átomo se encontrarían en la subcapa *1s*, ya que es la de menor energía. En este caso el radio de todos los átomos sería muy pequeño, el primer estado excitado muy alto, energías de ionización muy grandes y ningún campo eléctrico o magnético externos. Todos los elementos serían inertes en extremo y no existirían compuestos químicos, vida alguna y ningún lector o autor de libros sobre física moderna.

www.FreeLibros.me

5. Estados excitados de los átomos

En las secciones anteriores hemos descrito cuantitativamente las energías de los electrones en las subcapas que se están llenando en los diferentes átomos. Consideremos ahora cuantitativamente un ejemplo de las energías de los electrones en todas las subcapas de un átomo particular. Considere el átomo de ^{29}Fe cuyas energías electrónicas se muestran en el diagrama de niveles de energía de la figura 13–5. La escala de energía es lineal de 0 a −10 ev y logarítmica para energías más negativas. Se ha hecho la gráfica de los valores medidos de la energía total E_{nl} de un electrón en las diferentes subcapas ocupadas del ^{26}Fe y a la derecha se han escrito sus valores numéricos. Estos valores se han obtenido a partir del análisis de los espectros ópticos y de rayos X producidos por el átomo. Posteriormente se verá claro el procedimiento que implica tal análisis. Dentro de paréntesis se indican los valores de E_{nl} obtenidos mediante la teoría de Hartree para el ^{26}Fe. El lector observará que es bastante buena la concordancia entre la teoría y el experimento, y que estos datos confirman muchas de las afirmaciones hechas respecto a las energías de las diferentes subcapas. Por ejemplo, se observa que la diferencia en la energía de la subcapa p y la subcapa s de mayor energía es particularmente grande. Asimismo, la diferencia en energía entre las subcapas $3d$ y $4s$ es muy pequeña. Es interesante observar que la energía de un electrón $3d$ en el ^{26}Fe es un poco más negativa que la de un electon $4s$, a pesar de que las configuraciones observadas para este átomo y de los otros del cuarto renglón de la tabla periódica muestran que, en general, la subcapa $4s$ se llena antes que la $3d$. Esto no es del todo paradójico y lo predice la teoría de Hartree. Debido a los efectos de repulsión un electrón en una subcapa cambia en cierta medida el

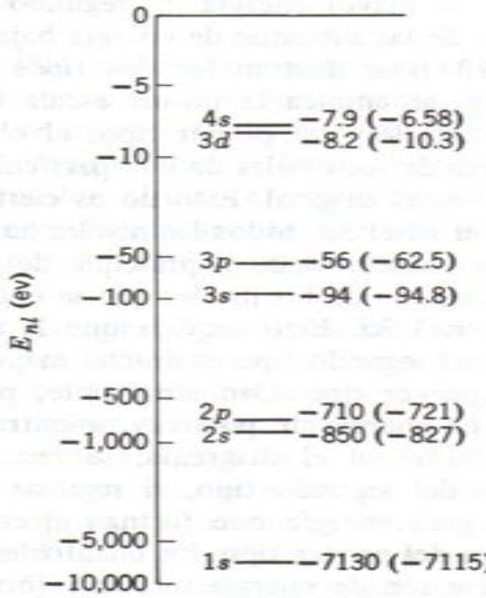

Figura 13-5. Un diagrama de niveles de energía para las subcapas llenas del átomo de hierro.

www.FreeLibros.me

campo eléctrico producido por los otros electrones en esa subcapa. Cuando es muy pequeña la diferencia en energía entre esas dos subcapas puede originarse la situación que se encuentra en el ^{26}Fe.

En la figura 13–5 se muestran sólo aquellas subcapas, esto es, los niveles de energía de una partícula, que están ocupados en el estado base del átomo. También existen muchos niveles de energía de una partícula que se encuentran desocupados. Como en el caso del ^{1}H, hay un número infinito de niveles discretos de energía de una partícula con $E_{nl} < 0$ y un continuo de niveles con $E_{nl} > 0$. Cuando el átomo se encuentra en un estado excitado, algunos de sus electrones van a niveles de una partícula de energía superior.

Afortunadamente, es pequeño el número de electrones que efectúan esta transición debido a la naturaleza del proceso de excitación del átomo. Por ejemplo, en un tubo de descarga los átomos son excitados por electrones energéticos. Uno de ellos choca con el átomo y lleva a uno o dos de sus electrones a niveles superiores. Es improbable que en este proceso sean excitados simultáneamente varios electrones. Otro proceso de excitación involucra la absorción de cuantos de energía. El átomo absorbe sólo un cuanto que, si tiene energía elevada, interacciona con uno o dos electrones. De este modo, los estados excitados del átomo no son tan complejos como pudieran serlo. En la configuración de un átomo en un estado excitado se tienen, entonces, uno o muy pocos electrones en subcapas de energía superior y las correspondientes vacantes en las subcapas de donde provienen. Por simplicidad, frecuentemente decimos que se excita sólo un electrón del átomo. Aun así, es claro que existen un gran número de configuraciones distintas que puede tener el átomo en sus estados excitados.

Es posible clasificar en dos tipos los modos de excitación de un átomo. El primer tipo corresponde a la excitación de un electrón de las capas externas del átomo, que son las de mayor energía. El segundo tipo corresponde a la excitación de un electrón de las subcapas de energía baja, que son las subcapas internas. En la figura 13–6 se ilustran los dos tipos de excitación para el ^{26}Fe. En estos diagramas se emplea la misma escala seudologarítmica de la figura 13–5. En una excitación del primer tipo, el electrón puede efectuar una transición a cualquiera de los niveles de una partícula discreto o continuo, de energía mayor que el nivel original. Esto no es cierto para una excitación del segundo tipo. Salvo el nivel $3d$, todos los niveles hasta el $4s$ se encuentran totalmente ocupados. En consecuencia, el principio de exclusión exige que el electrón excitado vaya a alguno de los niveles que se encuentran por arriba del $4s$ o, posiblemente, al nivel $3d$. Esto implica que la energía necesaria para producir una excitación del segundo tipo es mucho mayor que la indispensable para producir una del primer tipo. Ordinariamente, para el primer tipo de excitación requiere de una energía de pocos ev, mientras que para el segundo tipo, para el caso ilustrado en el diagrama, se requieren más de 800 ev. Cuando la excitación es del segundo tipo, al regresar el átomo a su estado base, emite cuantos de gran energía que forman el espectro de rayos X del átomo. Si la excitación es del primer tipo, los cuantos emitidos cuando regresa el átomo a su estado base son de energía menor y forman el espectro óptico del átomo (que se encuentra dentro, o está cercano, al intervalo visible). Los rayos X y el espectro de rayos X serán tratados en el próximo capítulo. Por

www.FreeLibros.me

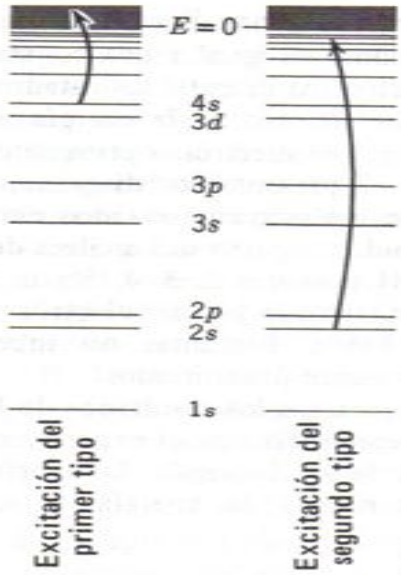

Figura 13-6. Ilustración de las excitaciones del primer tipo (excitaciones ópticas) y las excitaciones del segundo tipo (excitaciones de rayos $\overline{X}$).

ahora discutiremos el espectro óptico originado por las excitaciones del primer tipo, por lo que reciben el nombre de *excitaciones ópticas.* Estas se producen, por ejemplo, al someter a los átomos a descargas de bajo voltaje o a flamas.

6. Los átomos alcalinos

Comúnmente son sólo los electrones que se encuentran en una subcapa parcialmente llana los que se excitan ópticamente, ya que la energía de estos electrones es usualmente mucho menos negativa que la energía de los electrones en una subcapa completamente llena. A pesar de que esta regla es normalmente válida, existen algunas excepciones. Por ejemplo, en el ^{26}Fe la energía de un electrón en la subcapa $4s$, que está completamente llena, es un poco menos negativa que la energía de un electrón en la subcapa $3d$ que está parcialmente llena.

La regla siempre se cumple en un átomo alcalino. Estos átomos contienen un conjunto de subcapas completamente llenas, siendo una subcapa p la de mayor energía, y sólo un electrón en la subcapa s que le sigue. Como ya se mencionó, la energía de un electrón en una subcapa p es particularmente menor que la energía de un electrón en la subcapa s siguiente. En consecuencia, estos electrones no son excitados en un proceso de baja energía que origina una excitación óptica. Un átomo alcalino consta esencialmente de una coraza inerte de gas noble y un electrón que se mueve en una capa externa. El análisis del espectro óptico de estos átomos en términos de sus estados excitados es relativamente simple ya que se pueden describir completamente por el único electrón *ópticamente activo* y puede ignorarse la coraza que

www.FreeLibros.me

contiene subcapas completamente llenas. Puesto que la energía de la coraza no varía, la energía total del átomo es igual a una constante más la energía total del electrón ópticamente activo. Al discutir los estados excitados de un átomo alcalino es conveniente definir el cero de la energía de manera que la energía total del átomo sea igual a la del electrón ópticamente activo. Siguiendo esta convención, en la figura 13–7 presentamos diagramas que muestran las energías del estado base y la de los primeros estados excitados de los elementos alcalinos ^{3}Li y ^{11}Na, obtenidos a partir del análisis de su espectro, y también los niveles de energía del ^{1}H para $n = 2, 3, 4, 5$ y 6. Se designa cada nivel de energía por los números cuánticos n y l del electrón ópticamente activo, esto es, por su configuración. Estos diagramas no muestran la separación de estructura fina que posteriormente discutiremos.

Los diagramas tampoco muestran los resultados de la teoría de Hartree para estos átomos, ya que la discrepancia con el experimento es lo suficientemente pequeña como para que pueda ser indicada. La teoría de Hartree es bastante adecuada para calcular los niveles de energía de un electrón ópticamente

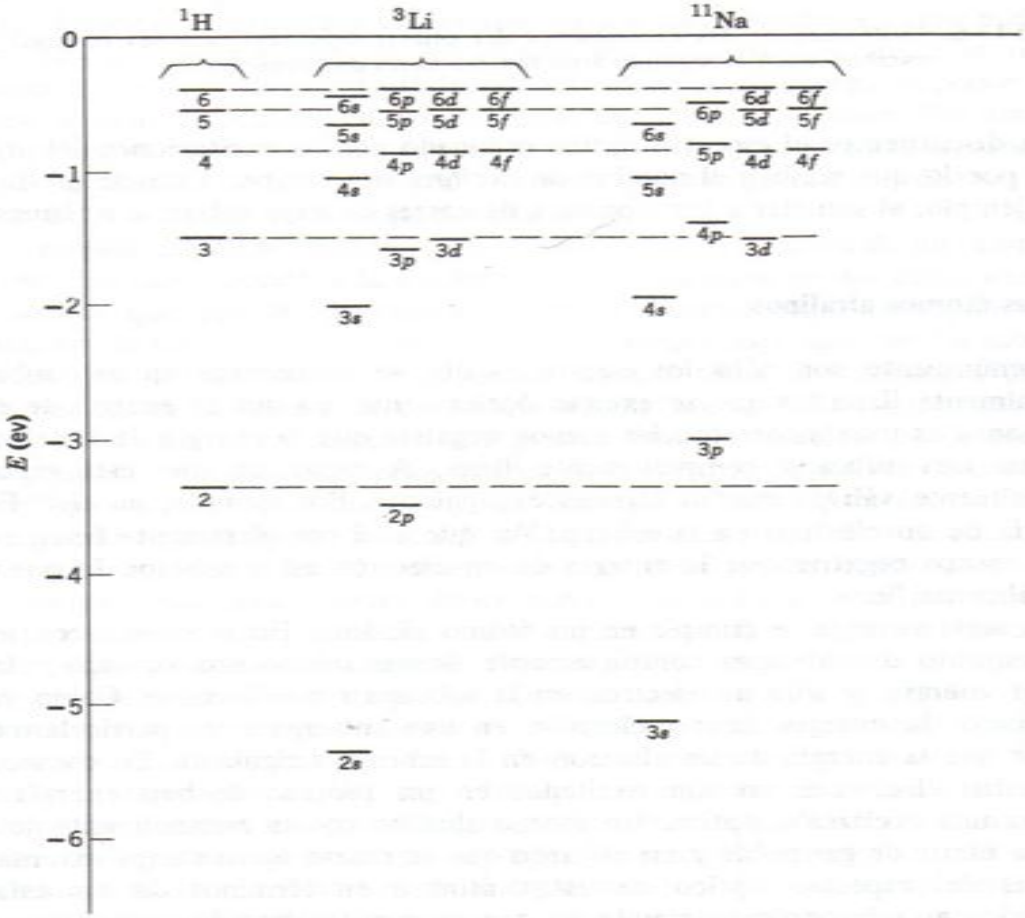

Figura 13-7. Algunos niveles de energía de los átomos de hidrógeno, litio y sodio.

www.FreeLibros.me

activo de un elemento alcalino, ya que el potencial neto $V(r)$, debido al núcleo y a los electrones de la coraza, es en realidad esféricamente simétrico, como se supone en la teoría. Puede entenderse fácilmente en términos de la teoría de Hartree la estructura de estos diagramas, y su re[illegible] con el diagrama para el ^{1}H. La dependencia de la energía del electrón ópticamente activo respecto a sus números cuánticos n y l es precisamente la que hemos descrito en ocasiones anteriores. Para un valor dado de n, la energía es más negativa para el valor de l más pequeño, ya que en este caso el electrón pasa más tiempo cerca del centro del átomo, donde experimenta la acción completa de la carga nuclear. En el estado base del ^{3}Li el electrón ópticamente activo se encuentra en la subcapa $2s$ y su energía es alrededor de 2 ev más negativa que un electrón $n = 2$ en el ^{1}H. Pero, en el primer estado excitado, el electrón pasa a la subcapa $2p$ cuya energía es alrededor de 0.2 ev más negativa que un electrón $n = 2$ en el ^{1}H. En el ^{11}Na la dependencia respecto a l hace que el nivel $4s$ sea más negativo que el nivel $3d$. Sin embargo, para subcapas de radios grandes con valores grandes de n, la dependencia respecto a l es menos importante y los niveles de energía del electrón ópticamente activo se aproximan mucho a los niveles de energía del electrón en el ^{1}H, ya que el blindaje de la carga nuclear $+Ze$ por la carga $-(Z-1)e$ de la coraza del átomo alcalino es casi completo para un electrón en una subcapa cuyo radio es grande en comparación con el de la coraza. Esto ocurre para valores más pequeños de n en el ^{3}Li que en el ^{11}Na, ya que el radio de la coraza es más pequeño en el primer caso. Dicho de otra manera, aunque $\psi^*\psi \propto r^{2l}$ cerca de $r = 0$ para toda n, (10–39) muestra que la constante de proporcionalidad disminuye al aumentar n, de modo que $\psi^*\psi$ se hace más pequeño cerca de $r = 0$. El resultado es que la dependencia respecto a l disminuye su importancia cuando n es muy grande. Observe que, al pasar de las subcapas internas a través de las subcapas externas que están llenas, hasta la subcapas vacías de un átomo, la dependencia de E_{nl} respecto a l primeramente aumenta en importancia relativa, llega a un máximo en las capas llenas más externas, para decrecer luego en importancia relativa.

Los niveles de energía del ^{1}H están dados por

$$E = -Rch/n^2$$

donde R es la constante de Rydberg. Obviamente una relación semejante puede darse para un átomo alcalino:

$$E = -Rch/n'^2 \tag{13–25}$$

donde n' no es un entero y está relacionado con n por la ecuación

$$n' = n - \mu \tag{13–26}$$

La μ recibe el nombre de *defecto cuántico*. Ajustando la ecuación (13–25) a la energía de los niveles observada de diferentes elementos alcalinos, se encuentra que para un elemento particular los defectos cuánticos son esencialmente los mismos para todas las subcapas de la misma l. En la tabla 13–4 se alistan los defectos cuánticos para el ^{11}Na. Estos resultados explican la base de la fórmula (5–5) de Rydberg para las series de los elementos alcalinos.

www.FreeLibros.me

TABLA 13–4
Los defectos cuánticos para el átomo del sodio

Subcapa	s	p	d	f
μ	1.35	0.86	0.01	~ 0

Las líneas del espectro óptico emitidas por los elementos alcalinos muestran una estructura fina que indica que todos los niveles de energía son dobles, salvo aquellos que corresponden a $l = 0$. Esto se debe a la interacción spin-órbita que actúa sobre los electrones ópticamente activos. Los otros efectos relativistas, que son casi tan importantes como la interacción spin-órbita en el caso del átomo con un electrón, generalmente son despreciables. Podemos verlo empleando la ecuación (5–13) para estimar la velocidad promedio de un electrón ópticamente activo. En esta ecuación debemos reemplazar Z por la cantidad Z_n definida en (13–22). Puesto que Z_n es aproximadamente igual a la unidad para los electrones ópticamente activos de todos los átomos, (5–13) muestra que el valor promedio de V/c es aproximadamente igual a $1/n$ veces el valor promedio de este cociente para un electrón en el estado base del ^{1}H. Esto es, $v/c \sim (1/n) \times 10^{-2}$. Ya que n para un electrón ópticamente activo aumenta al crecer Z, los efectos relativistas distintos del spin-órbita, que son del orden de $(v/c)^2$, son despreciables para los electrones ópticamente activos de todos los átomos, salvo los que tienen Z pequeña.*

Mediante la ecuación (11–47) puede entenderse el corrimiento de los niveles de energía de un elemento alcalino debido a la interacción spin-órbita sobre el electrón ópticamente activo. Esta ecuación conduce inmediatamente a una ecuación análoga a la (11–49):

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]\overline{\left(\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\right)} \quad (13\text{–}27)$$

donde

$$\overline{\left(\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\right)} \equiv \iiint \psi^*_{nljm_j}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\psi_{nljm_j} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi \quad (13\text{–}28)$$

Como es el caso para el átomo con un electrón, cuando se incluye la interacción spin-órbita m_l y m_s ya no son buenos números cuánticos y las funciones propias que describen al electrón ópticamente activo se deben

* Para los electrones de las subcapas internas, no son tan despreciables estos efectos relativistas. Para un electrón 1s del ^{92}U, el valor promedio de v/c es alrededor de 0.5. Sin embargo, esto afecta sólo al valor fijo de la energía total de la coraza y, en consecuencia afecta a excitaciones ópticas solamente en la definición del cero de la energía total.

www.FreeLibros.me

especificar por los números cuánticos n, l, j, m_j, los que obedecen las reglas que se indicaron anteriormente

$$\begin{aligned} s &= \tfrac{1}{2} \\ j &= l + \tfrac{1}{2} \text{ o } l - \tfrac{1}{2}, \qquad l \neq 0 \\ j &= \tfrac{1}{2}, \qquad l = 0 \end{aligned} \tag{13–29}$$

Para $l = 0$, la ecuación (13–27) muestra que $\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = 0$. Para otros valores de l, $\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}}$ toma dos valores distintos, uno positivo y el otro negativo, dependiendo si $j = l + \frac{1}{2}$ o $j = l - \frac{1}{2}$. Salvo para $l = 0$, cada uno de los niveles de energía se rompe en dos componentes, una de energía un poco mayor cuando el impulso angular y el spin son "paralelos" y otra energía un poco menor cuando son "antiparalelos". La magnitud de la separación es proporcional al valor esperado para $(1/r)$ (dV/dr). Ya que tanto $1/r$ como la derivada del potencial neto son grandes en la vecindad de $r = 0$, el valor esperado es muy sensible al comportamiento de ψ_{nljm_j} y $V(r)$ cerca de $r = 0$, De hecho, es tan sensible que no es posible obtener valores precisos de la separación a partir de la teoría de Hartree. Sin embargo, puede predecir las características generales de los valores observados de la separación de estructura fina.

Para un elemento alcalino dado, la teoría predice que la separación disminuirá al aumentar n ya que, ψ_{nljm_j} disminuirá en la región cercana a $r = 0$, al aumentar n donde $(1/r)$ (dV/dr) es grande, de manera que disminuye el valor esperado para esta cantidad. Este comportamiento se observa, por ejemplo, en los niveles de energía del ^{11}Na asociados con un electrón excitado en las subcapas p. En la tabla 13–5 se alistan las separaciones de estos niveles de energía. En la sección 3 mostramos que, conforme a la teoría de Hartree, la dependencia del potencial neto $V(r)$ respecto a r cerca de $r = 0$ es más pronunciada a medida que aumenta Z. Se predice entonces que cerca de $r = 0$, dV/dr aumenta al aumentar Z y, en consecuencia, la separación aumentará al aumentar Z. Este comportamiento puede observarse en los datos experimentales. En la tabla 13–6 alistamos, para diferentes elementos alcalinos, las separaciones observadas de los niveles de energía para un electrón excitado en la primera subcapa p. Observe que la separación producida por la interacción spin-órbita es bastante grande para valores grandes de Z.

En la figura 13–8 se muestran algunos de los niveles de más baja energía del ^{11}Na. En la misma columna se agrupan los niveles cuyos números cuánticos son iguales, salvo el n, y el valor de n para cada nivel se designa por la configuración del electrón ópticamente activo. Los números cuánticos l y j se

TABLA 13–5
Separaciones spin-órbita en el átomo del sodio

Subcapa	$3p$	$4p$	$5p$	$6p$
Separación spin-órbita	21.3×10^{-4} ev	7.63×10^{-4}	3.05×10^{-4}	1.74×10^{-4}

www.FreeLibros.me

TABLA 13–6
Separaciones spin-órbita en un número de átomos alcalinos

Elemento	^{3}Li	^{11}Na	^{19}K	^{37}Rb	^{55}Cs
Subcapa	$2p$	$3p$	$4p$	$5p$	$6p$
Separación spin-órbita	0.42×10^{-4} ev	21×10^{-4}	72×10^{-4}	295×10^{-4}	687×10^{-4}

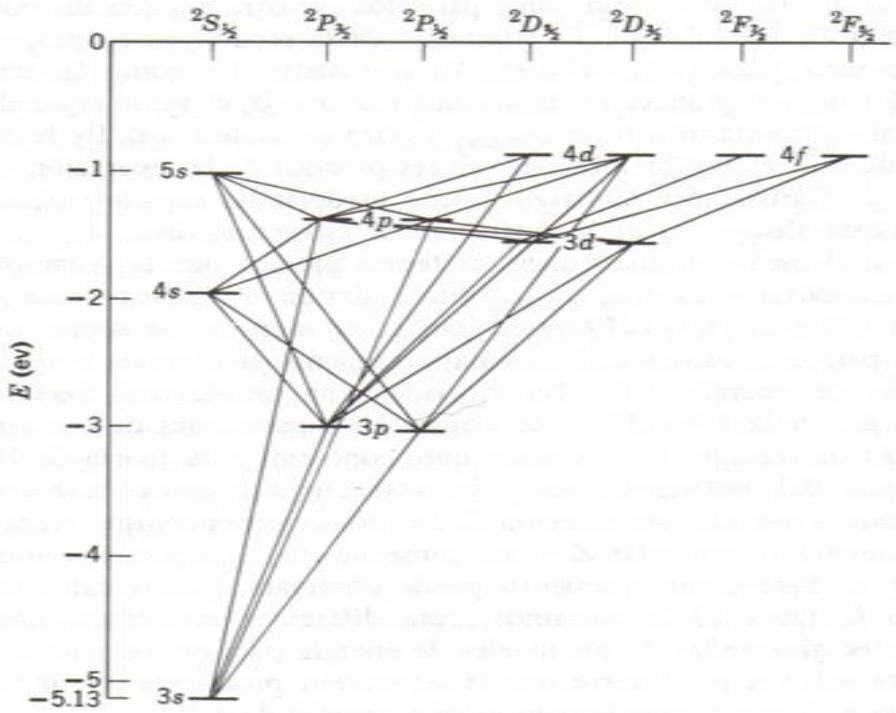

Figura 13-8. Algunos niveles de energía del átomo de sodio, y las posibles transiciones entre estos niveles.

dan en la notación espectroscópica usual, por un símbolo como $^2P_{1/2}$, que se lee como "doblete P un medio". La letra especifica el valor de l conforme al esquema que nos es familiar, salvo que es conveniente emplear letras mayúsculas. El índice inferior corresponde al valor de j y el superior es igual a $(2s + 1) = (2 \cdot \frac{1}{2} + 1)$, y es igual también al número de componentes en que se rompen los niveles por la interacción spin-órbita, salvo que el nivel $^2S_{1/2}$ que no se rompe. Ya que la energía spin-órbita es positiva para $j = l + 1$ y negativa para $j = l - \frac{1}{2}$, cada nivel $^2P_{3/2}$ debe ser un poco más alto que el nivel $^2P_{1/2}$ que le está asociado. Lo mismo pasa con los niveles $^2D_{5/2}$ y $^2D_{3/2}$, $^2F_{7/2}$ y $^2F_{5/2}$.

www.FreeLibros.me

Esta separación es, por supuesto, demasiado pequeña como para indicarla en el diagrama; sin embargo, lo hemos indicado en el caso de los niveles $3p^2P_{3/2}$ y $3p^2P_{1/2}$.

En la figura 13–8 hemos indicado también las transiciones posibles entre los niveles de energía que producen las líneas espectrales del ^{11}Na asociadas con los niveles que se muestran. Si el lector visualiza el conjunto completo de los niveles de energía y de las transiciones, se impresionará por su complejidad y podrá darse cuenta del trabajo de Rydberg, y de otros, para obtener los diagramas de niveles de energía a partir del análisis del espectro observado. Sólo después de que Rydberg descubrió que las líneas espectrales podían agruparse en diferentes series, fue posible el análisis. Para los elementos alcalinos hay cuatro tipos importantes de series. Se originan en las transiciones que se indican a continuación.*

Serie "nítida":	$n\,^2S_{1/2} \rightarrow n_0\,^2P_{3/2,1/2}$	dobletes de líneas
Serie "principal":	$n\,^2P_{3/2,1/2} \rightarrow n_0\,^2S_{1/2}$	dobletes de líneas
Serie "difusa":	$n\,^2D_{5/2,3/2} \rightarrow n_0\,^2P_{3/2,1/2}$	tripletes de líneas
Serie "fundamental":	$n\,^2F_{7/2,5/2} \rightarrow n_0\,^2D_{5/2,3/2}$	tripletes de líneas

En cada serie, n_0 está fijo y n es variable. El doblete, amarillo intenso, del espectro del ^{11}Na es el primer miembro de la serie principal con $n_0 = 3$. Esto es, las dos líneas se deben a la transición $3\,^2P_{3/2} \rightarrow 3\,^2S_{1/2}$ y $3\,^2P_{1/2} \rightarrow 3\,^2S_{1/2}$. Todas las líneas de las series nítida y principal son dobletes ya que comprenden transiciones del nivel $^2S_{1/2}$ al par de niveles cercanos $^2P_{3/2}$ y $^2P_{1/2}$, o viceversa. Podría esperarse que las líneas de las series difusa y fundamental sean cuartetes, ya que los niveles inicial y final son ambos miembros de un par de niveles. Sin embargo, se observa que las transiciones $n\,^2D_{5/2} \rightarrow n_0\,^2P_{1/2}$ y $n\,^2F_{7/2} \rightarrow n_0\,^2D_{3/2}$ no se presentan. Del análisis de muchos espectros, se encuentra que estos ejemplos son casos especiales de una *regla de selección* para el número cuántico j. La transición ocurre solamente si

$$\Delta j = 0, \pm 1 \tag{13–30}$$

Debido a esta regla, las líneas de las series difusa y fundamental son tripletes. En la figura 13–8 podemos observar la operación de una regla de selección para el número cuántico l. En el diagrama se indican las transiciones sólo si

$$\Delta l = \pm 1 \tag{13–31}$$

A partir de un estudio del espectro de los elementos alcalinos, se encuentra que esta regla de selección para l es válida cuando sólo hay un electrón ópticamente activo. Así, ambas ecuaciones (13–30) y (13–31) se obedecen en el caso del ^{1}H. En la sección 12 discutiremos el origen de las reglas de selección.

* No son claras las razones que se tuvieron para darles nombres a estas series en los albores de la espectroscopia. Ciertamente que ellos dieron lugar al esquema en el cual los números cuánticos $l = 0, 1, 2, 3$ se los representa por s, p, d, f.

www.FreeLibros.me

7. Atomos con varios electrones ópticamente activos

Un átomo de un elemento contiene una coraza formada por subcapas totalmente llenas que rodea al núcleo y varios electrones en subcapas parcialmente ocupadas. Puesto que cualquiera de los electrones en estas subcapas puede participar en una excitación óptica, todos ellos son ópticamente activos. Es claro que una descripción de los estados excitados que producen el espectro óptico requiere de una descripción del comportamiento de todos los electrones ópticamente activos. A pesar de que hay varios efectos que determinan su comportamiento, es posible entender la influencia que tienen sobre la energía de los estados excitados tratándolos simultáneamente, en orden de importancia decreciente, considerando cada nuevo efecto como una perturbación a los precedentes.

Como punto de partida en este tratamiento, consideremos que cada uno de los electrones ópticamente activos se mueve independientemente en un potencial neto $V(r)$ producido por la coraza y los demás electrones ópticamente activos. En esta aproximación de Hartree, la energía de cada electrón ópticamente activo está especificada por los números cuánticos n y l y la dependencia de esta energía E_{nl}, respecto de ellos, es muy semejante a la del electrón ópticamente activo en el átomo alcalino que tiene la misma coraza.* Puesto que la energía total de un átomo es igual a una constante más la energía total de los electrones ópticamente activos, su energía estará determinada, en esta aproximación, por la configuración de los electrones ópticamente activos, esto es, por los números cuánticos n y l de estos electrones. También, con cada configuración de los electrones ópticamente activos se tienen valores de m_l y m_s. Puesto que la energía no depende de estos números cuánticos, existe una degeneración respecto a ellos. También existe, en general, una degeneración de intercambio puesto que la energía no depende del conjunto de números cuánticos que tenga una de las partículas idénticas. En esta aproximación hay diferentes niveles degenerados asociados con cada configuración. Sin embargo, se eliminan muchas de estas degeneraciones al tomar en cuenta las perturbaciones. Un caso análogo se presenta en un átomo alcalino donde se eliminan las degeneraciones de toda configuración al tomar en cuenta la interacción spin-órbita como una perturbación.

Las perturbaciones que incluiremos toman en cuenta efectos ignorados en la teoría de Hartree. Las dos correcciones de mayor importancia son:

1. El potencial de Hartree para cada electrón ópticamente activo sólo toma en cuenta el efecto *promedio* de la interacción de Coulomb con los demás electrones ópticamente activos, y
2. Las interacciones magnéticas entre el spin y el impulso angular orbital de cada electrón ópticamente activo.

Existen otras correcciones, entre las que se encuentran las relativistas, por las interacciones entre los spins de los electrones ópticamente activos debida

* La razón es que $V(r)$ es muy semejante al potencial neto debido sólo a la coraza.

www.FreeLibros.me

a la interacción magnética entre sus momentos magnéticos asociados. Las otras correcciones son muy pequeñas y se pueden, en general, despreciar.

Ya hemos considerado una de las consecuencias de la interacción residual de Coulomb (corrección 1) en nuestro tratamiento del ^{2}He. En este átomo el nivel de energía de la configuración $1s\ 2s$ se rompe en dos, uno de los cuales corresponde a los estados de triplete, de energía más baja, y el otro a los de singulete, de energía más alta que el nivel original. Lo mismo es cierto de la configuración $1s2p$. El lector recordará que el demandar que la función de onda completa sea antisimétrica introduce una interacción entre la orientación relativa de los spins de los electrones y sus coordenadas espaciales. La distancia promedio entre dos electrones es mayor en los estados de triplete, spins "paralelos", que en los de singulete, spins "antiparalelos". En consecuencia, la energía positiva de repulsión de Coulomb es menor en los estados de triplete, para los cuales la magnitud del spin total tiene el valor constante $S' = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$, que en los de singulete, para el cual el spin total tiene el valor constante $S' = 0$. Por supuesto que no varían las magnitudes de los vectores de impulso angular de spin por el efecto de la interacción residual de Coulomb. Al analizar el espectro observado experimentalmente se puede mostrar que este efecto es importante en todos los átomos que contengan dos o más electrones ópticamente activos; también puede entenderse teóricamente mediante cálculos semejantes a los efectuados para el ^{2}He. Esto es, en estos átomos existe una tendencia de los spins de los electrones ópticamente activos a acoplarse de manera que la magnitud S' del impulso angular total de spin sea una constante. Comúnmente el estado de menor energía corresponde a S' mayor.

El efecto de la interacción residual de Coulomb hace que el impulso angular orbital de los electrones ópticamente activos tienda a acoplarse de manera que sea constante la magnitud L' del impulso angular orbital total. No pudimos encontrar un ejemplo de lo anterior al analizar los estados excitados del ^{2}He, puesto que en todas las configuraciones estudiadas uno de los electrones es un electrón $1s$ y, en consecuencia, sólo uno de los electrones tiene su impulso angular orbital distinto de cero. Sin embargo, puede entenderse fácilmente el origen de las fuerzas que acoplan los impulsos angulares orbitales al considerar las gráficas polares de la densidad de probabilidad de un electrón cuyo potencial es esféricamente simétrico (figuras 10–4 y 10–5). Colocando el eje z en la dirección del impulso angular orbital, observamos que la densidad de probabilidad del electrón está concentrada en la vecindad del plano normal al eje z: la densidad de carga producida por el electrón es mayor cerca de este plano. Al considerar dos o más electrones, la repulsión entre sus cargas se manifestará en una interacción entre sus vectores de impulso angular orbital. Estas interacciones son torcas entre los vectores de impulso angular orbital que no cambian la magnitud de cada uno de ellos sino que los hace precesionar alrededor del vector de impulso angular orbital total, de modo que su magnitud L' permanezca constante. ¿Cuál de los valores posibles de L' corresponde al estado de energía menor? No es fácil encontrar la respuesta puesto que hay varias tendencias que se oponen. Sin embargo, la base física de una de las tendencias que es la más importante puede entenderse considerando dos electrones en un átomo de Bohr, como se ilustra en la figura 13–9. En

www.FreeLibros.me

virtud de la repulsión de Coulomb entre los electrones, se obtiene el arreglo más estable cuando se encuentran en los extremos opuestos de un diámetro. Este es un estado de energía mínima donde los vectores individuales de impulso angular orbital son paralelos y donde es máxima la magnitud L' del vector de impulso angular orbital total. Esta conclusión se ve confirmada por un análisis del espectro producido por átomos que contienen varios electrones ópticamente activos. Esto es, en estos átomos los impulsos angulares orbitales de los electrones ópticamente activos tienden a acoplarse de modo que sea constante la magnitud L' del impulso angular orbital total y, generalmente, el estado de menor energía corresponde al valor máximo de L'.

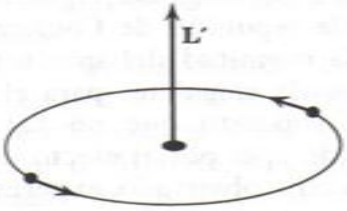

Figura 13-9. Ilustración de cómo dos electrones ópticamente activos se acoplan para que sea máximo el vector de impulso angular orbital total.

En contraste al efecto producido por la interacción resídual de Coulomb, la interacción spin-órbita (corrección 2) hace que el vector de impulso angular de spin de cada electrón ópticamente activo tienda a acoplarse con *su* propio vector de impulso angular orbital, de manera que la magnitud de cada uno de estos vectores permanece constante mientras precesionan alrededor del vector de impulso angular total resultante, cuya magnitud J es constante. Sabemos que este acoplamiento surge de las torcas debidas a las interacciones entre el momento magnético asociado al impulso angular de spin y el campo magnético asociado al impulso angular orbital. Sabemos también que el estado de menor energía le corresponde al valor mínimo de J.

8. El acoplamiento *LS*

Puesto que las interacciones residuales de Coulomb y la de spin-órbita producen efectos opuestos, será muy difícil tratar aquellos átomos en las que los dos tipos de interacciones sean de magnitud comparable. Afortunadamente, es reducido el número de los átomos que se encuentran en este caso. Para los átomos cuyo valor de Z es pequeño o intermedio, el efecto de la interacción residual de Coulomb es grande en comparación con el producido por la interacción spin-órbita. Podemos verlo al comparar la diferencia de energía ($\sim$1 ev) asociada con la interacción residual de Coulomb al acoplar los dos impulsos angulares de spin en los primeros estados excitados del ^{2}He, con la diferencia de energía ($\sim 10^{-4}$ ev) asociada con el acoplamiento de los impulsos angulares orbital y de spin en los primeros estados excitados del ^{3}Li. En los

www.FreeLibros.me

átomos cuyo valor de Z es pequeño o intermedio se presenta el *acoplamiento LS*, que también recibe el nombre de *acoplamiento Russell* y *Saunders* en honor de los espectroscopistas que explicaron la estructura de los niveles de energía de estos átomos. Al estudiar el acoplamiento de este tipo, se considera en primer lugar la perturbación debida a la interacción residual de Coulomb, ya que es la más importante, ignorando temporalmente la interacción spin-órbita. Entonces, los impulsos angulares de spin individuales, $\mathbf{S}_i$, de los electrones ópticamente activos, se acoplan para formar un impulso angular de spin total,

$$\mathbf{S}' = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \cdots + \mathbf{S}_i + \cdots \tag{13–32}$$

cuya magnitud, S', es constante y satisface la regla de cuantización

$$S' = \sqrt{s'(s'+1)}\,\hbar \tag{13–33}$$

También los impulsos angulares orbitales individuales, $\mathbf{L}_i$, de los electrones ópticamente activos se acoplan para formar un impulso angular orbital total

$$\mathbf{L}' = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 + \cdots + \mathbf{L}_i + \cdots \tag{13–34}$$

cuya magnitud, $\mathbf{L}'$, es constante y satisface la regla de cuantización

$$L' = \sqrt{l'(l'+1)}\,\hbar \tag{13–35}$$

Estos vectores se acoplan de manera que todas sus magnitudes, S_i y L_i, también permanecen constantes. A causa de la perturbación, la energía del átomo depende de S' y L'. Entonces, aquellos estados cuánticos de la misma configuración, pero asociados con valores distintos de S' y L', no poseen la misma energía. Ordinariamente, al estado de energía mínima le corresponden los valores máximos de S' y L'.

Habiendo tomado en cuenta la dominante interacción residual de Coulomb, se incluye dentro del marco del acoplamiento *LS* la interacción spin-órbita como una interacción adicional, considerándola como un acoplamiento entre los vectores $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$ para formar un impulso angular total

$$\mathbf{J}' = \mathbf{L}' + \mathbf{S}' \tag{13–36}$$

cuya magnitud, J', permanece constante, al igual que S' y L', y satisface la regla de cuantización

$$J' = \sqrt{j'(j'+1)}\,\hbar \tag{13–37}$$

Como resultado de esta perturbación adicional, la energía del átomo depende también de J'. Al estado de energía mínima le corresponde el valor mínimo de J'.

En la figura 13–10 se ilustra cómo los diferentes vectores de impulso angular se combinan en el acoplamiento *LS* en el estado que normalmente tiene el mínimo de energía para dos electrones ópticamente activos con los números cuánticos $l_1 = 1$, $s_1 = \frac{1}{2}$ y $l_2 = 2$, $s_2 = \frac{1}{2}$. Los impulsos angulares de spin $\mathbf{S}_1$ y $\mathbf{S}_2$ precesionan alrededor de su suma $\mathbf{S}'$, teniendo este vector la

www.FreeLibros.me

magnitud máxima posible que corresponde a $s' = 1$. Los impulsos angulares orbitales $\mathbf{L}_1$ y $\mathbf{L}_2$ precesionan alrededor de su suma $\mathbf{L}'$, teniendo este vector la magnitud máxima posible, que corresponde a $l' = 3$. También $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$ precesionan alrededor de su suma $\mathbf{J}'$, aunque la magnitud de este vector es la mínima posible, que corresponde a $j' = 2$. Finalmente, $\mathbf{J}'$ precesiona alrededor del eje z de manera que su componente J'_z a lo largo de este eje es una constante que satisface la regla de cuantización

$$J'_z = m'_j \hbar \tag{13–38}$$

donde

$$m'_j = -j', -j' + 1, \ldots, +j' - 1, +j' \tag{13–39}$$

La figura 13–10 se dibujó con $m'_j = j'$. La cuantización de la magnitud del impulso angular total, J', y su componente z, J'_z, es una consecuencia natural de la ausencia de torcas externas al átomo.

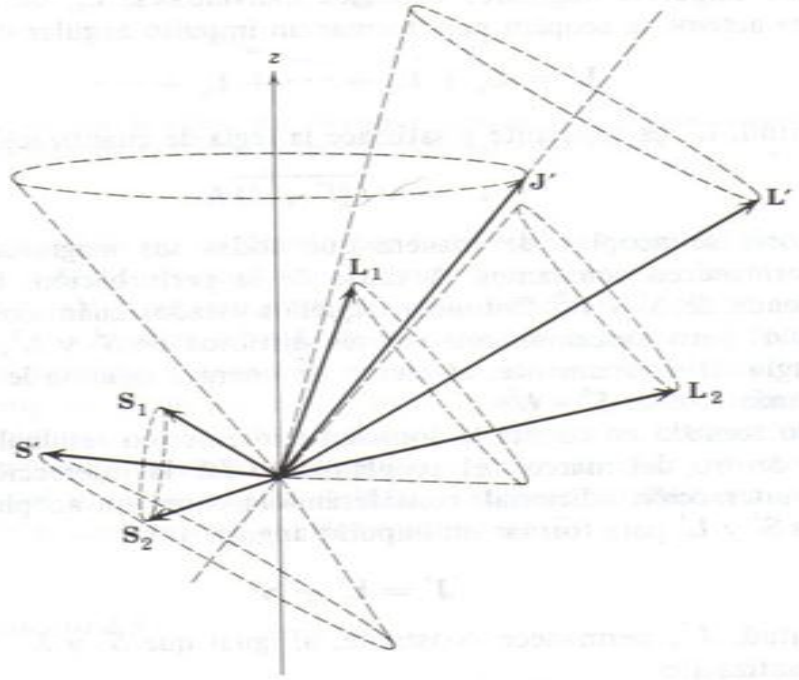

Figura 13-10. Ilustración del acoplamiento entre dos diferentes vectores de impulso angular en un estado típico de acoplamiento *LS* de energía mínima.

La figura 13–10 ilustra sólo uno de los estados cuánticos que pueden formarse en el acoplamiento *LS* por dos electrones ópticamente activos con números cuánticos $l_1 = 1$, $s_1 = \frac{1}{2}$ y $l_2 = 2$, $s_2 = \frac{1}{2}$. En realidad se tienen doce conjuntos de estados distintos que se pueden formar con los diferentes números cuánticos s', l' y j'. Cada uno de estos conjuntos consta de $2j' + 1$ estados cuánticos diferentes que corresponden a los distintos valores de m'. En la ecuación (13–39) se especifican los valores posibles que puede tomar m'_j.

www.FreeLibros.me

Las reglas que especifican los valores posibles de s', l' y j' se expresan convenientemente en los diagramas de adición vectorial de vectores cuyas longitudes son proporcionales a los números cuánticos. Para los dos electrones en cuestión, los diagramas tienen la forma que muestra la figura 13–11. El lector observará que los valores posibles para s', l' y j' que se muestran en los diagramas vectoriales coinciden con los dados por las ecuaciones

$$\begin{aligned} s' &= |s_1 - s_2|, |s_1 - s_2| + 1, \ldots, s_1 + s_2 \\ l' &= |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, \ldots, l_1 + l_2 \\ j' &= |s' - l'|, |s' - l'| + 1, \ldots, s' + l' \end{aligned} \tag{13–40}$$

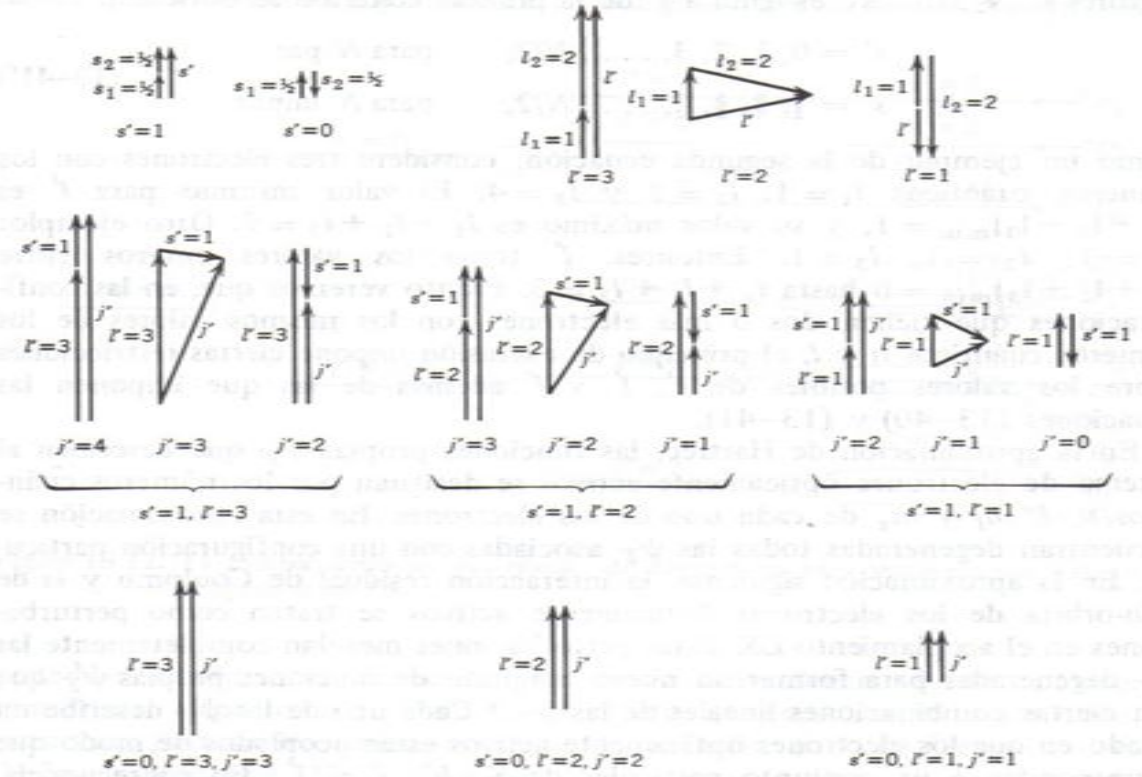

Figura 13-11. Diagramas de suma vectorial para los números cuánticos $l_1 = 1$, $s_1 = \frac{1}{2}$; $l_2 = 2$, $s_2 = \frac{1}{2}$.

Puesto que $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$, de la primera ecuación se tiene que

$$s' = 0, 1 \tag{13–40'}$$

Estas ecuaciones se pueden demostrar por argumentos semejantes a los empleados en la demostración de (11–44). La ecuación para s' es precisamente (12–25).

www.FreeLibros.me

Las ecuaciones (13–40) especifican los valores posibles de s', l' y j' para el caso general de acoplamiento LS de dos electrones. Para N electrones, estas reglas se pueden escribir como

$$s' = |\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 + \cdots + \mathbf{s}_N|_{\text{mín}}, |\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 + \cdots + \mathbf{s}_N|_{\text{mín}} + 1, \ldots, s_1 + s_2 + \cdots + s_N$$

$$l' = |\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 + \cdots + \mathbf{l}_N|_{\text{mín}}, |\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 + \cdots + \mathbf{l}_N|_{\text{mín}} + 1, \ldots, l_1 + l_2 + \cdots + l_N$$

$$j' = |s' - l'|, |s' - l'| + 1, \ldots, s' + l' \tag{13–41}$$

que se reducen a (13–40) cuando $N = 2$. Puesto que la magnitud de los vectores $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \ldots, \mathbf{s}_N$ es igual a $\frac{1}{2}$, de la primera ecuación se obtiene

$$\begin{aligned} s' &= 0, 1, 2, 3, \ldots, N/2, && \text{para } N \text{ par} \\ s' &= \tfrac{1}{2}, \tfrac{3}{2}, \tfrac{5}{2}, \tfrac{7}{2}, \ldots, N/2, && \text{para } N \text{ impar} \end{aligned} \tag{13–41'}$$

Como un ejemplo de la segunda ecuación, considere tres electrones con los números cuánticos $l_1 = 1$, $l_2 = 2$ y $l_3 = 4$. El valor mínimo para l' es $|\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 + \mathbf{l}_3|_{\text{mín}} = 1$, y su valor máximo es $l_1 + l_2 + l_3 = 7$. Otro ejemplo: $l_1 = 1$, $l_2 = 1$, $l_3 = 1$. Entonces, l' toma los valores enteros entre $|\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 + \mathbf{l}_3|_{\text{mín}} = 0$ hasta $l_1 + l_2 + l_3 = 3$. Pronto veremos que, en las configuraciones que tienen dos o más electrones con los mismos valores de los números cuánticos n y l, el principio de exclusión impone ciertas restricciones sobre los valores posibles de s', l' y j' además de las que imponen las ecuaciones (13–40) y (13–41).

En la aproximación de Hartree, las funciones propias ψ_T que describen al sistema de electrones ópticamente activos se designan por los números cuánticos n, l, m_l y m_s de cada uno de los electrones. En esta aproximación se encuentran degeneradas todas las ψ_T asociadas con una configuración particular. En la aproximación siguiente, la interacción residual de Coulomb y la de spin-órbita de los electrones ópticamente activos se tratan como perturbaciones en el acoplamiento LS. Estas perturbaciones mezclan completamente las ψ_T degeneradas para formar un nuevo conjunto de funciones propias ψ'_T que son ciertas combinaciones lineales de las ψ_T.* Cada una de las ψ'_T describe un estado en que los electrones ópticamente activos están acoplados de modo que correspondan a un conjunto particular de S', L', J' y J'_z. En consecuencia, para designar las ψ'_T es necesario especificar la configuración de los electrones ópticamente activos y los números cuánticos s', l', j' y m'_j. Puesto que en el acoplamiento LS la energía del electrón depende tanto de los valores de S', L' y J' como de las configuraciones, se elimina la mayor parte de la degeneración. Las funciones propias ψ'_T se encuentran aún degeneradas respecto al número cuántico m'_j que especifica la orientación espacial del vector de impulso angular total. En el acoplamiento LS, los niveles de energía del átomo

* Completamente análogo a la mezcla de las funciones propias degeneradas de un electrón por la perturbación spin-órbita (vea la sección 5 del capítulo 11). Como en aquel caso, no será necesario ahora conocer la forma exacta de estas combinaciones lineales.

www.FreeLibros.me

se designan por la configuración y s', l' y j', empleando la notación espectroscópica introducida anteriormente. Si no estamos interesados en el valor de m'_j, puede emplearse la misma notación para designar los estados cuánticos. Por ejemplo, si dos electrones ópticamente activos tienen los números cuánticos $n = 1$, $l = 0$ y $n = 2$, $l = 1$, y se acoplan de modo que $s' = 1$, $l' = 1$, $j' = 2$, el nivel de energía y el estado cuántico se identifican con el símbolo $1s2p\ ^3P_2$. La primera parte del símbolo especifica la configuración y la segunda parte da los otros números cuánticos conforme al esquema descrito en la sección 6.

En la figura 13–12 se ilustra el rompimiento de un nivel de energía degenerado de la configuración $nd\,n'p$ de un átomo con dos electrones ópticamente activos, debido a las perturbaciones residual de Coulomb y spin-órbita. Por razones obvias no podemos presentar explícitamente las ecuaciones que se emplean para calcular las energías de estos niveles. Sin embargo,

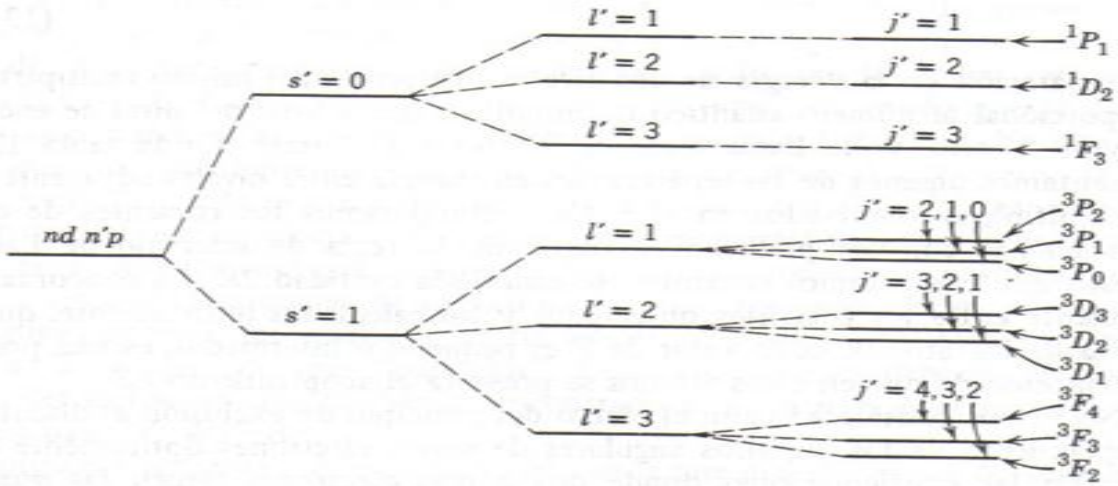

Figura 13-12. El rompimiento de los niveles de energía en una configuración física con acoplamiento LS.

podemos escribir una ecuación que de la dependencia de la interacción spin-órbita respecto a j'. Este es el efecto que produce la separación de *estructura fina* de los niveles con $s' = 1$ y un valor dado de l' en tres niveles. De la ecuación (13–27) se tiene que

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\overline{\left(\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\right)}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

Aunque esta ecuación es válida en el caso de un electrón ópticamente activo, si se la escribe con primas da la energía de interacción entre los vectores de impulsos angulares orbital y de spin totales, $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$ en un átomo con acoplamiento LS. Entonces, en el acoplamiento LS, la energía total del átomo contiene el término

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{S}'\cdot\mathbf{L}'}} = K[j'(j'+1) - l'(l'+1) - s'(s'+1)] \qquad (13\text{–}42)$$

www.FreeLibros.me

donde

$$K = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\overline{\left(\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\right)}$$

tiene el mismo valor para todos los niveles de energía de una configuración cuyos valores de s' y l' sean comunes. Calculemos la separación en la energía entre los niveles adyacentes de una configuración con valores comunes de s' y l', niveles que corresponden al mismo *multiplete*. Si j' es el número cuántico asociado con el nivel de menor energía, $j' + 1$ será el número cuántico del nivel de mayor energía, y la separación en la energía es

$$K[(j' + 1)(j' + 2) - l'(l' + 1) - s'(s' + 1)] - K[j'(j' + 1) - l'(l' + 1) - s'(s' + 1)] = K[(j' + 1)(j' + 2) - j'(j' + 1)] = 2K(j' + 1) \tag{13-43}$$

La separación en la energía de dos niveles adyacentes del mismo multiplete es proporcional al número cuántico de impulso angular total del nivel de energía mayor. A esto se le llama *regla de intervalo de Landé*. En la tabla 13–7 presentamos algunas de las separaciones en energía entre niveles adyacentes de los multipletes observados en el ^{20}Ca y comparamos los cocientes de estas separaciones con las predichas a partir de la regla de intervalo de Landé. Puesto que comparamos cocientes, se cancela la cantidad $2K$. La concordancia excelente entre los cocientes observados y los calculados teóricamente, que es típica de los átomos cuyo valor de Z es pequeño o intermedio, es una prueba convincente de que en estos átomos se presenta el acoplamiento LS.

No hemos considerado aún el efecto del principio de exclusión al discutir el acoplamiento de los impulsos angulares de varios electrones ópticamente activos. En las configuraciones donde dos o más electrones tienen *los mismos valores de* n y l (se encuentran en la misma subcapa) no puede ignorarse el principio de exclusión, ya que impone restricciones importantes sobre la forma como sus impulsos angulares pueden acoplarse. Para determinar estas restricciones, consideremos la aproximación de Hartree donde n, l, m_l y m_s son buenos números cuánticos para los electrones ópticamente activos. El principio de exclusión establece simplemente que dos electrones no pueden tener iguales los cuatro números cuánticos. Veremos que esto limita los valores posibles de

TABLA 13–7
Separaciones de estructuras finas en el átomo del calcio

Configuración	Niveles	Separación	Niveles	Separación	Cocientes Exp.	Cocientes Teor.
$3d3d$	$^3P_1, ^3P_0$	16.7×10^{-4} ev	$^3P_2, ^3P_1$	33.3×10^{-4} ev	1.99	2/1
$4s4p$	$^3P_1, ^3P_0$	64.9×10^{-4} ev	$^3P_2, ^3P_1$	131.2×10^{-4} ev	2.02	2/1
$4s3d$	$^3D_2, ^3D_1$	16.9×10^{-4} ev	$^3D_3, ^3D_2$	26.9×10^{-4} ev	1.59	3/2
$3d4p$	$^3D_2, ^3D_1$	33.1×10^{-4} ev	$^3D_3, ^3D_2$	49.6×10^{-4} ev	1.50	3/2

www.FreeLibros.me

los números cuánticos s', m'_s, l', m'_l, j' y m'_j que determinan las magnitudes y las componentes z de $\mathbf{S}'$, $\mathbf{L}'$ y $\mathbf{J}'$ y que también son buenos números cuánticos en la aproximación de Hartree. Ahora bien, aunque cambian las componentes z de $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$ en el acoplamiento LS al aplicar las interacciones residual de Coulomb y spin-órbita, no varían los valores de S', L', J' y J'_z.* En consecuencia, toda restricción que encontremos en la aproximación de Hartree respecto a los números cuánticos s', l', j' y m'_j será igualmente válida en el acoplamiento LS.

Considere una configuración ns^2, que contiene dos electrones con igual número cuántico n y, por lo tanto, se encuentran en la misma subcapa s. Puesto que $l = 0$, $m_l = 0$, de manera que los dos electrones tienen los números cuánticos n, l y m_l iguales. Para satisfacer el principio de exclusión deben ser distintos sus números cuánticos m_s; uno de los electrones debe tener $m_s = +\frac{1}{2}$ y el otro $m_s = -\frac{1}{2}$. Conforme a (12–23), (12–24) y (11–21), m'_s es igual a la suma de los números cuánticos m_s de los dos electrones, de manera que $m'_s = +\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$. Del mismo modo, m'_l es la suma de los números cuánticos m_l de los dos electrones, de modo que sólo puede tomar el valor $m'_l = 0 + 0 = 0$. Conforme a (11–43), $m'_j = m'_l + m'_s$, de modo que el único valor que puede tomar este número cuántico es $m'_j = 0 + 0 = 0$. Ya que los tres números cuánticos m'_s, m'_l y m'_j sólo pueden tener el valor cero, de las ecuaciones (12–24) es claro que los números cuánticos s', l' y j' sólo pueden valer cero. Los dos electrones pueden acoplarse para formar un solo estado, $^1S_0$, en el que los vectores de spin de los dos electrones son "antiparalelos". De no ser por el principio de exclusión, los números cuánticos m_s de los dos electrones podrían ser iguales y habría tres estados adicionales $^3S_1$ correspondientes a vectores de spin "paralelos". Estas conclusiones deberán ser conocidas del lector, ya que las hemos encontrado al discutir la configuración del estado base $1s^2$ del ^{2}He.

Considere ahora la configuración np^2, en la que dos electrones ópticamente activos se encuentran en la misma subcapa p. Aunque este caso es más complicado, puede tratarse con el procedimiento anterior. En la tabla 13–8 alistamos todos los conjuntos posibles de valores que no violan el principio de exclusión para m_l y m_s de los dos electrones. Para cada conjunto alistamos también los valores de m'_s, m'_l y m'_j correspondientes. Hay quince conjuntos de valores de m_l y m_s de los dos electrones que satisfacen el principio de exclusión; otros conjuntos, como el $m_l = +1$, $m_s = +\frac{1}{2}$ y $m_l = +1$, $m_s = +\frac{1}{2}$, se eliminan porque violan este principio. El problema consiste en identificar los estados cuánticos permitidos, especificados en la tabla 13–8 en términos de los números cuánticos m'_s, m'_l y m'_j, por sus números cuánticos s', l' y j'. En primer lugar, empleamos las ecuaciones (13–40) con $l_1 = l_2 = 1$, y encontramos que las diferentes combinaciones posibles para los valores de s', l' y j' son, en notación espectroscópica, $^1S_0$, $^1P_1$, $^1D_2$, $^3S_1$, $^3P_0$, $^3P_1$, $^3P_2$, $^3D_1$, $^3D_2$, $^3D_3$. Los estados $^3D_3$ se eliminan inmediatamente, ya que la ecua-

* En presencia de las perturbaciones, S'_z y L'_z no tienen valores definidos y m'_s y m'_l no son buenos números cuánticos. Pero ya que S', L', J' y J'_z tienen valores definidos, independientemente de la perturbación, es claro que la aplicación de ésta no puede cambiar sus valores.

www.FreeLibros.me

TABLA 13–8
Números cuánticos posibles para una configuración np^2

Número	m_l	m_s	m_l	m_s	m'_s	m'_l	m'_j
1	+1	$+\frac{1}{2}$	+1	$-\frac{1}{2}$	0	+2	+2
2	+1	$+\frac{1}{2}$	0	$+\frac{1}{2}$	+1	+1	+2
3	+1	$+\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	0	+1	+1
4	+1	$+\frac{1}{2}$	−1	$+\frac{1}{2}$	+1	0	+1
5	+1	$+\frac{1}{2}$	−1	$-\frac{1}{2}$	0	0	0
6	+1	$-\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	−1	+1	0
7	+1	$-\frac{1}{2}$	−1	$+\frac{1}{2}$	0	0	0
8	+1	$-\frac{1}{2}$	−1	$-\frac{1}{2}$	−1	0	−1
9	0	$+\frac{1}{2}$	+1	$-\frac{1}{2}$	0	+1	+1
10	0	$+\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	0	0	0
11	0	$+\frac{1}{2}$	−1	$+\frac{1}{2}$	+1	−1	0
12	0	$+\frac{1}{2}$	−1	$-\frac{1}{2}$	0	−1	−1
13	−1	$+\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	0	−1	−1
14	−1	$+\frac{1}{2}$	−1	$-\frac{1}{2}$	0	−2	−2
15	−1	$-\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	−1	−1	−2

ción (13–39) requiere que, para $j' = 3$, haya en la tabla los valores +3 y −3 para m'_j, lo que no es el caso. Ya que no hay estados $^3D_3$, tampoco habrá estados $^3D_2$ o $^3D_1$. En todos estos estados los vectores $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$ tienen la misma magnitud, pertenecen al mismo multiplete y se quedan o se eliminan todos. El renglón 1 de la tabla 13–8 requiere la presencia de estados con $s' \geqslant 0$ y $l' \geqslant 2$ puesto que $m'_s = -s', \ldots, +s'$ y $m'_l = -l', \ldots, +l'$, lo que indica la presencia de los estados $^1D_2$. Hay cinco estados que corresponden a los cinco valores $m'_j = -2, -1, 0, +1, +2$. El renglón 2 requiere la presencia de estados con $s' \geqslant 1$ y $l' \geqslant 1$, lo que implica que deben existir los estados $^3P_0$, $^3P_1$ y $^3P_2$. Para el $^3P_0$ hay un estado correspondiente a $m'_j = 0$. Para el $^3P_1$ hay tres estados que corresponden a $m'_j = -1, 0, +1$ y para el $^3P_2$ hay cinco que corresponden a $m'_j = -2, -1, 0, +1, +2$. Hasta ahora hemos identificado $5 + 1 + 3 + 5 = 14$ estados. Sólo se ha quedado fuera un estado de singulete, que debe corresponder a $m'_j = 0$ puesto que ya han sido usados los demás valores de m'_j que aparecen en la tabla. Es claro que debe ser el estado de singulete $^1S_0$. Así, en la aproximación de Hartree, los estados cuánticos posibles para dos electrones en la configuración np^2 son los que corresponden a $^1S_0$, $^1D_2$, $^3P_{0,1,2}$. Puesto que estas restricciones se expresan en términos de los números cuánticos s', l' y j', también son válidas en el acoplamiento *LS*.

En la tabla 13–9 alistamos los estados cuánticos permitidos por el principio de exclusión para configuraciones que contienen varios electrones en la misma subcapa. Cada símbolo especifica los números cuánticos s' y l' de los estados permitidos en el multiplete. Los valores de j' y m'_j para estos estados pueden determinarse a partir de las ecuaciones (13–39) y (13–41) conocidos s' y l'. Se consideran las configuraciones que no contienen ningún electrón,

www.FreeLibros.me

hasta las que contienen el número máximo permitido en la subcapa por el principio de exclusión. Cuando no hay electrones, $s' = l' = j' = 0$, lo que se describe por el símbolo $^1S_0$. Cuando sólo hay un electrón en alguna subcapa, $l' = l$ y puesto que $s' = \frac{1}{2}$, los estados permitidos forman un doblete. Los estados permitidos para otras configuraciones se determinan mediante cálculos similares a los que se emplearon para determinar los estados permitidos de las configuraciones ns^2 y np^2, o mediante el empleo de la teoría de los grupos.

En la tabla 13–9 se observan las simetrías respecto a las configuraciones de las capas semillenas. Para estas configuraciones el número de estados es el máximo. Los estados de una configuración de una subcapa que tiene k electrones son idénticos a los estados que se tienen cuando a la subcapa le faltan k electrones para encontrarse llena. Esta es una consecuencia importante del principio de exclusión, ya que si no operara el número de estados aumentaría monótonamente al aumentar el número de electrones en una subcapa. Además tiene otras consecuencias. La más importante es que cuando una subcapa está totalmente llena, el único estado permitido es idéntico al estado posible cuando la subcapa está totalmente vacía. Este es el estado $^1S_0$ para el que S', L' y J' son iguales a cero. Lo hemos demostrado para la subcapa s y puede demostrarse fácilmente para cualquier otra subcapa. Consideremos la configuración np^6 y construyamos la tabla 13–10, que es semejante a la tabla empleada en el estudio de la configuración np^2. La tabla tiene

TABLA 13–9
Estados cuánticos posibles para configuraciones que contienen varios electrones en la misma subcapa

ns^0	^1S					
ns^1		^2S				
ns^2	^1S					
np^0	^1S					
np^1		^2P				
np^2	$^1S, {}^1D$		^3P			
np^3		$^2P, {}^2D$		^4S		
np^4	$^1S, {}^1D$		^3P			
np^5		^2P				
np^6	^1S					
nd^0	^1S					
nd^1		^2D				
nd^2	$^1S, {}^1D, {}^1G$			$^3P, {}^3F$		
nd^3		$^2D, {}^2P, {}^2D, {}^2F, {}^2G, {}^2H$			$^4P, {}^4F$	
nd^4	$^1S, {}^1D, {}^1G, {}^1S, {}^1D, {}^1G, {}^1H, {}^1I$			$^3P, {}^3F, {}^3P, {}^3D, {}^3F, {}^3G, {}^3H$		^5D
nd^5		$^2D, {}^2P, {}^2D, {}^2F, {}^2G, {}^2H, {}^2S, {}^2D, {}^2F, {}^2G, {}^2I$			$^4P, {}^4F, {}^4D, {}^4G$	^6S
nd^6	$^1S, {}^1D, {}^1G, {}^1S, {}^1D, {}^1G, {}^1H, {}^1I$			$^3P, {}^3F, {}^3P, {}^3D, {}^3F, {}^3G, {}^3H$		^5D
nd^7		$^2D, {}^2P, {}^2D, {}^2F, {}^2G, {}^2H$			$^4P, {}^4F$	
nd^8	$^1S, {}^1D, {}^1G$			$^3P, {}^3F$		
nd^9		^2D				
nd^{10}	^1S					

www.FreeLibros.me

sólo una anotación que corresponde obviamente al estado $^1S_0$. La conclusión de que el spin total y el impulso angular orbital total de una subcapa totalmente llena sean iguales a cero se confirma mediante el análisis del espectro óptico de los átomos de gases nobles. Además, en este caso no puede haber un momento magnético neto, cosa que puede confirmarse mediante experimentos de Stern y Gerlach en gases nobles. También en estos experimentos se observa que el momento magnético del ^{47}Ag, que en el estado base contiene un electrón $5s$ fuera de un conjunto de subcapas completamente llenas, es igual al momento magnético del ^{1}H, que en el estado base tiene un electrón $1s$.

TABLA 13–10
Números cuánticos posibles para una configuración np^6

Número	m_l	m_s	m_l	m_s	m_l	m_s	m_l	m_s	m_l	m_s	m_l	m_s	m'_s	m'_l	m'_j
1	+1	$+\frac{1}{2}$	+1	$-\frac{1}{2}$	0	$+\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	−1	$+\frac{1}{2}$	−1	$-\frac{1}{2}$	0	0	0

Podemos ahora entender las diferentes características de un diagrama que muestra los niveles de energía excitados ópticamente de un átomo cuyo valor de Z es pequeño o intermedio. Considere el diagrama de niveles de energía del ^{6}C que se presenta en la figura 13–13. La configuración de su estado base es $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$, de manera que hay dos electrones p que son activos ópticamente. El cero de la escala de la energía es tal que la magnitud de la energía total del estado base es igual a la energía requerida para ionizar un electrón del átomo. En consecuencia, puede compararse este diagrama directamente con los correspondientes para los átomos alcalinos y el ^{1}H, donde el cero de la energía se define del mismo modo. Los niveles de energía se designan por la configuración de los dos electrones ópticamente activos y por el símbolo espectroscópico que corresponde a s', l' y j'. No se muestra la separación de estructura fina correspondiente al valor de j', ya que es demasiado pequeña como para ser apreciada en la escala del diagrama. Considere la energía promedio de los niveles correspondientes a las diferentes configuraciones. En la configuración de menor energía, $2p^2$, ambos electrones permanecen en la misma subcapa en que se encuentran cuando el átomo está en su estado base. En las otras configuraciones, uno de los electrones permanece en esa subcapa mientras que el otro se encuentra en otra subcapa de mayor energía. Observe que las energías promedio de las configuraciones dependen de los números cuánticos n y l del electrón en la capa de mayor energía, como si el electrón fuera el ópticamente activo de un átomo alcalino. La configuración de menor energía es un ejemplo de una configuración np^2 para la que el principio de exclusión sólo permite los estados $^1S_0$, $^1D_2$ y $^3P_{0,1,2}$. Las energías de los estados $^3P_{0,1,2}$ son menores que la de los estados $^1S_0$ y $^1D_2$ puesto que corresponden a un valor más grande de s'; las energías de los estados $^1D_2$ son menores que la de los estados $^1S_0$ ya que corresponden a un valor más grande de l'. Observe que la dependencia respecto a s' es más fuerte que respecto a l'.

www.FreeLibros.me

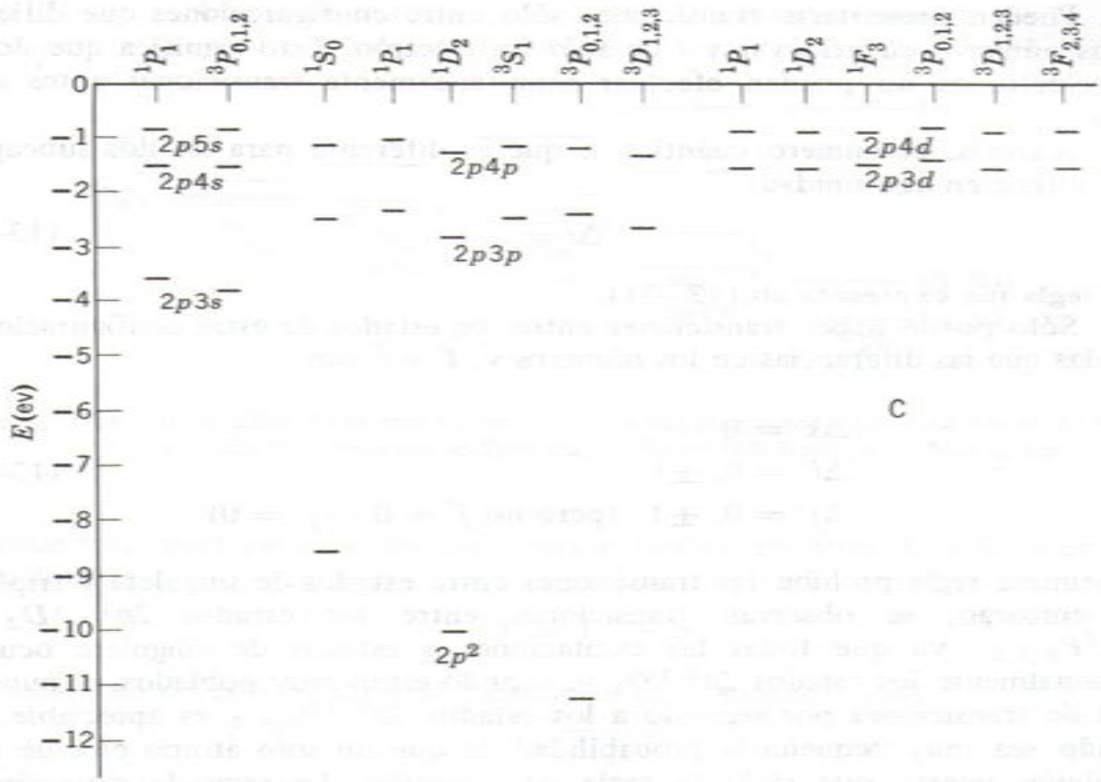

Figura 13-13. Algunos niveles de energía del átomo de carbono.

Se encuentra casi siempre que debido a la interacción residual de Coulomb las energías asociadas con el acoplamiento de los impulsos angulares de spin son mayores que las asociadas con el acoplamiento de los impulsos angulares orbitales. De los tres niveles vecinos en energía de los estados $^3P_{0,1,2}$, que podrían distinguirse en un diagrama más grande, el estado $^3P_0$ es el de menor energía, ya que corresponde al menor valor de j'. Entonces, el estado base del átomo es $2p^2\ ^3P_0$. El principio de exclusión sólo se aplica a la configuración de energía promedio menor, ya que en las otras los electrones se encuentran en subcapas distintas. En consecuencia, están presentes todos los estados predichos por la ecuación (13–40). En la configuración $2p3s$, el nivel con s' máxima es el de energía más baja, así como es el caso de la configuración $2p^2$. Desviaciones de esta regla y de la que afirma que al estado de más baja energía le corresponde una l' máxima, pueden observarse en configuraciones de energía promedio alta; no se encuentran excepciones a la regla de que j' mínima hace que la energía sea mínima. El diagrama no muestra algunos niveles de energía que se han identificado como pertenecientes a la configuración $2s2p^3$.

A partir del diagrama de niveles de energía del ^6C puede construirse su espectro óptico calculando la energía y la frecuencia de los cuantos emitidos en todas las transiciones posibles que no violen las siguientes reglas de selección:

www.FreeLibros.me

1. Pueden presentarse transiciones sólo entre configuraciones que difieren en los números cuánticos n y l de *sólo* un electrón. Esto significa que dos o más electrones no pueden efectuar simultáneamente transiciones entre subcapas.

2. Además, el número cuántico l, que es diferente para las dos subcapas, debe diferir en una unidad:

$$\Delta l = \pm 1 \tag{13-44}$$

Esta regla fue expresada en (13–31).

3. Sólo puede haber transiciones entre los estados de estas configuraciones para las que las diferencias en los números s', l' y j' son

$$\begin{aligned} \Delta s' &= 0 \\ \Delta l' &= 0, \pm 1 \\ \Delta j' &= 0, \pm 1 \quad (\text{pero no } j' = 0 \rightarrow j' = 0) \end{aligned} \tag{13-45}$$

La primera regla prohibe las transiciones entre estados de singulete y triplete. Sin embargo, se observan transiciones entre los estados $2p^2\ {}^1D_2$ y, $2p^2\ {}^3P_{0,1,2}$, ya que todas las excitaciones a estados de singulete ocupan ocasionalmente los estados $2p^2\ {}^1D_2$ y, cuando están muy poblados, el número total de transiciones por segundo a los estados $2p^2\ {}^3P_{0,1,2}$ es apreciable aun cuando sea muy pequeña la probabilidad de que un solo átomo efectúe esta transición puesto que viola la regla de selección. La segunda ecuación es semejante a (13–31) aunque no es tan restrictiva. La tercera regla es la misma que (13–30). Todas estas reglas de selección se aplican a cualquier átomo que exhiba acoplamiento *LS*.

9. El acoplamiento *JJ*

Atomos con Z pequeña, como el ^{6}C, son buenos ejemplos del acoplamiento *LS* ya que los niveles de energía están agrupados en multipletes característicos a este acoplamiento dependiendo la energía de j' muy débilmente, en comparación de la dependencia respecto a s' y l', y porque es perfectamente válida la regla de intervalo de Landé (13–43). Al aumentar Z la dependencia respecto a j' se hace más fuerte y la regla de intervalo de Landé va perdiendo validez. En la figura 13–14 se ilustra este comportamiento, al mostrar la disposición de los niveles de energía en la configuración $2p3s$ del ^{6}C y la de los niveles en las configuraciones correspondientes en átomos con Z mayor que se encuentran en la misma columna de la tabla periódica. A menudo se observan desviaciones apreciables del acoplamiento *LS* en átomos de Z grande ya que, como vimos en la sección 6, las interacciones spin-órbita crecen en importancia. De hecho, para los átomos con Z mayor, la interacción spin-órbita prevalece sobre la interacción residual de Coulomb. Se dice que estos átomos son ejemplos del *acoplamiento JJ*. En el acoplamiento de este tipo se supone que la interacción dominante spin-órbita acopla el vector de impulso angular de spin con el orbital de cada electrón ópticamente activo, formando el vector de impulso

www.FreeLibros.me

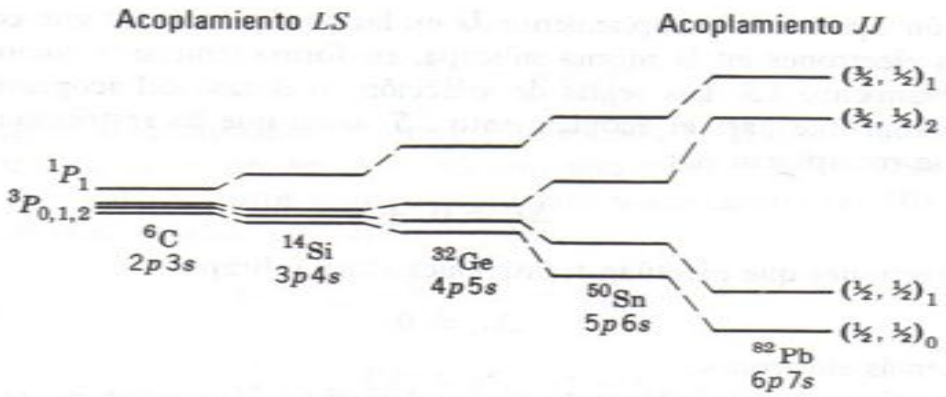

Figura 13-14. Ilustración de la transición entre los acoplamientos *LS* y *JJ*. De H. E. White, *Introduction to Atomic Spectra*, McGraw-Hill Book, Co., Nueva York, 1934.

angular total para ese electrón. Así, para el *i*-ésimo electrón, $\mathbf{L}_i$ y $\mathbf{S}_i$ se acoplan para formar

$$\mathbf{J}_i = \mathbf{L}_i + \mathbf{S}_i \tag{13–46}$$

La magnitud de este vector está cuantizada de la manera usual

$$J_i = \sqrt{j_i(j_i + 1)}\,\hbar \tag{13–47}$$

Entonces, la energía de un átomo depende de los números cuánticos j_i de todos los electrones y es mínima cuando son mínimos los valores de estos números. Al tomar en cuenta la interacción residual de Coulomb, que es más débil, se acoplan todos los vectores de impulso angular total de cada uno de los electrones para formar el vector de impulso angular total

$$\mathbf{J}' = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 + \cdots + \mathbf{J}_i + \cdots \tag{13–48}$$

que obedece las mismas reglas de cuantización (13–37), (13–38) y (13–39), como en el acoplamiento *LS*. La energía del átomo depende también de j', aunque en menor medida. Sin embargo, no es posible hacer una afirmación general acerca de a qué valores de j' les corresponde la mínima energía. Adaptando las ecuaciones (13–41) es posible encontrar los valores posibles de j_i y j'. Deben emplearse estos números cuánticos en la identificación de los estados cuánticos y en la de los niveles de energía.* En la figura 13–14 se designan, en la notación espectroscópica, los cuatro niveles de la configuración $6p7s$ del ^{82}Pb. Este átomo es un buen ejemplo del acoplamiento *JJ* ya que los niveles $(\frac{3}{2}, \frac{1}{2})_{1,2}$, con $j_1 = \frac{3}{2}$ y $j_2 = \frac{1}{2}$, casi tienen la misma energía y están bien separados de los niveles $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})_{1,0}$, con $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$. El índice inferior especifica los valores de j'. Observe que la j' más pequeña da la energía menor en uno de los pares de niveles y la energía mayor en el otro par. El principio

* Por supuesto que s' y l' no son buenos números cuánticos en un átomo que exhibe el acoplamiento *JJ*.

www.FreeLibros.me

de exclusión opera en el acoplamiento *JJ* en las configuraciones que contienen dos o más electrones en la misma subcapa, en forma semejante como lo hace en el acoplamiento *LS*. Las reglas de selección en el caso del acoplamiento *JJ* son las mismas que para el acoplamiento *LS*, salvo que las restricciones sobre $\Delta s'$ y $\Delta l'$ se reemplazan por

$$\Delta j_i = 0, \pm 1 \tag{13–49}$$

para los electrones que efectúan transiciones entre subcapas y

$$\Delta j_i = 0 \tag{13–49'}$$

para los demás electrones.

No discutiremos detalladamente el acoplamiento *JJ*, porque no se encuentran con frecuencia ejemplos de este comportamiento en los electrones ópticamente activos. La mayoría de los átomos son buenos o regulares ejemplos del acoplamiento *LS*. Sin embargo, ejemplos del acoplamiento *JJ* se encuentran frecuentemente en el comportamiento de los protones y neutrones del núcleo atómico. Los estudiaremos en la sección 8 del capítulo 16, que trata del *modelo de capas del núcleo*. El modelo explica muchas de las propiedades de los núcleos suponiendo que el movimiento de los protones y neutrones en el núcleo son muy parecidos al de los electrones en un átomo, salvo que el potencial neto $V(r)$ tiene otra dependencia respecto a r y que la interacción spin-órbita en estas partículas es muy grande.

10. El efecto Zeeman

En 1896 Zeeman observó que al colocar un átomo en un campo magnético, cada una de las líneas espectrales que emitía se rompían en varias componentes. A este fenómeno se le llama *efecto Zeeman*. Siempre que la intensidad del campo no exceda algunos miles de gauss, el rompimiento es proporcional a la intensidad, aunque pequeño en comparación con la separación de estructura fina de las líneas espectrales del átomo. Esto significa que el campo magnético hace que los niveles de energía que intervienen en la emisión de las líneas espectrales se rompan en varias componentes. En algunos casos es posible entender este efecto en términos de la teoría clásica desarrollada por Lorentz. En el caso general no es posible dar una explicación, aunque sea cualitativa, de este rompimiento: se precisa de la teoría cuántica y de la introducción del spin del electrón.

Es fácil entender el efecto Zeeman en términos de la teoría moderna. Salvo en el estado $^1S_0$, el átomo tendrá un momento magnético neto μ debido a los momentos magnéticos orbital y de spin de sus electrones ópticamente activos.* Conforme a la ecuación (11–15), cuando este momento magnético se encuentra en un campo magnético externo **H** tendrá una energía potencial de orientación

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H}$$

* Los demás electrones se encuentran en subcapas totalmente llenas y no contribuyen al valor de μ.

www.FreeLibros.me

o bien

$$\Delta E = -\mu_{\mathbf{H}} H \tag{13–50}$$

donde $\mu_{\mathbf{H}}$ es la componente de $\boldsymbol{\mu}$ en la dirección de $\mathbf{H}$. Cada nivel de energía se romperá en varios niveles cuyo número será igual al de los valores posibles de $\mu_{\mathbf{H}}$. Para calcular estos valores, evaluamos $\boldsymbol{\mu}$ aplicando (11–10) y (11–22) a cada electrón ópticamente activo. Esto es

$$\boldsymbol{\mu} = \sum_i -\frac{g_l \mu_B}{\hbar}\mathbf{L}_i + \sum_i -\frac{g_s \mu_B}{\hbar}\mathbf{S}_i$$

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{\mu_B}{\hbar}\left[\sum_i \mathbf{L}_i + 2\sum_i S_i\right]$$

donde la suma se extiende a todos los electrones ópticamente activos y se han substituido los valores de g_l y g_s dados en (11–9) y (11–26). Supongamos que el átomo en cuestión exhibe acoplamiento LS. Entonces,

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{\mu_B}{\hbar}[\mathbf{L}' + 2\mathbf{S}'] \tag{13–51}$$

Observe que μ será paralelo a

$$\mathbf{J}' = \mathbf{L}' + \mathbf{S}'$$

a menos que $\mathbf{L}' = 0$ o $\mathbf{S}' = 0$, puesto que son diferentes los factores g orbital y de spin.

En el acoplamiento LS, $\mathbf{L}'$ y $\mathbf{S}'$ precesionan alrededor de $\mathbf{J}'$, debido a la precesión de Larmor de $\mathbf{S}'$ en el campo magnético atómico asociado con $\mathbf{L}'$, con una frecuencia ω_L que es proporcional a la intensidad del campo magnético del átomo (vea 11–29). De (13–51) es claro que $\boldsymbol{\mu}$ debe precesionar alrededor de $\mathbf{J}'$ con la misma frecuencia. Por otra parte, cuando hay un campo magnético externo $\mathbf{H}$, también habrá una precesión de $\boldsymbol{\mu}$ alrededor de $\mathbf{H}$ con una frecuencia proporcional a su intensidad. Así, el movimiento de $\boldsymbol{\mu}$ es bastante complicado. Sin embargo, cuando el campo externo es pequeño en comparación con el campo atómico, la precesión de $\boldsymbol{\mu}$ alrededor del campo externo será lenta en comparación con la precesión alrededor de $\mathbf{J}'$ y no será muy complicado calcular la energía potencial de orientación ΔE. En la sección 4 del capítulo 11 hemos visto que la magnitud del campo magnético atómico es del orden de 10^4 gauss.

Supongamos que la intensidad del campo magnético externo H es pequeña respecto a $\sim 10^4$ gauss. Puesto que $\boldsymbol{\mu}$ precesiona mucho más rápidamente alrededor de $\mathbf{J}'$ que de $\mathbf{H}$, podemos evaluar $\mu_{\mathbf{H}}$ calculando $\mu_{\mathbf{J}'}$, que es la componente promedio de $\boldsymbol{\mu}$ en la dirección de $\mathbf{J}'$, y tomando entonces la componente de $\mu_{\mathbf{J}'}$ en la dirección de $\mathbf{H}$. Esto es

$$\mu_{\mathbf{J}'} = \mu\frac{\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{J}'}{\mu J'} = -\frac{\mu_B}{\hbar}\frac{(\mathbf{L}' + 2\mathbf{S}')\cdot(\mathbf{L}' + \mathbf{S}')}{J'}$$

y

$$\mu_{\mathbf{H}} = \mu_{\mathbf{J}'}\frac{\mathbf{J}'\cdot\mathbf{H}}{J'H} = \mu_{\mathbf{J}'}\frac{J'_z}{J'} = -\frac{\mu_B}{\hbar}\frac{(\mathbf{L}' + 2\mathbf{S}')\cdot(\mathbf{L}' + \mathbf{S}')J'_z}{J'^2}$$

www.FreeLibros.me

donde hemos elegido al eje z en la dirección de H. Calculando el producto escalar se tiene

$$\mu_{\mathbf{H}} = -\frac{\mu_B}{\hbar}(L'^2 + 2S'^2 + 3\mathbf{L}' \cdot \mathbf{S}')\frac{J'_z}{J'^2}$$

Al escribir la ecuación (11–48) con primas,

$$3\mathbf{L}' \cdot \mathbf{S}' = \tfrac{3}{2}(J'^2 - L'^2 - S'^2)$$

de modo que

$$\mu_{\mathbf{H}} = -\frac{\mu_B}{\hbar}(L'^2 + 2S'^2 + \tfrac{3}{2}J'^2 - \tfrac{3}{2}L'^2 - \tfrac{3}{2}S'^2)\frac{J'_z}{J'^2}$$

$$\mu_{\mathbf{H}} = -\frac{\mu_B}{\hbar}\frac{(3J'^2 + S'^2 - L'^2)}{2J'^2}J'_z$$

Conforme a la ecuación (13–50) la energía potencial de orientación es

$$\Delta E = -\mu_{\mathbf{H}}H = \frac{\mu_B H}{\hbar}\frac{(3J'^2 + S'^2 - L'^2)}{2J'^2}J'_z \qquad (13\text{–}52)$$

Este término es del orden de $\mu_B H$, que es pequeño en comparación con los otros efectos que contribuyen a la energía total del átomo. Por ejemplo, la energía de interacción spin-órbita es grande comparada con este término, ya que su orden de magnitud es μ_B multiplicado por la intensidad del campo magnético del átomo, que es grande en comparación con H. En consecuencia, podemos emplear la teoría de la perturbación para calcular $\overline{\Delta E}$, la contribución de ΔE a la energía total del átomo. Usando las funciones propias, ψ'_T, adecuadas al acoplamiento LS, que están caracterizadas por los números s', l', j' y m'_j, se tiene*

$$\overline{\Delta E} = \int \psi'^*_T \, \Delta E_{\text{op}} \psi'_T \, d\tau \qquad (13\text{–}53)$$

donde la integración se extiende sobre las coordenadas de todos los electrones ópticamente activos, y ΔE_{op} es un operador que se obtiene de ΔE al reemplazar S'^2, L'^2, J'^2 y J'_z por sus operadores asociados. Puesto que ψ'_T es función propia de estos operadores con valores propios $s'(s'+1)\hbar^2$, $l'(l'+1)\hbar^2$, $j'(j'+1)\hbar^2$ y $m'_j\hbar$, respectivamente, de las ecuaciones (13–52) y (13–53) se obtiene

$$\overline{\Delta E} = \frac{\mu_B H}{\hbar}\frac{[3j'(j'+1)\hbar^2 + s'(s'+1)\hbar^2 - l'(l'+1)\hbar^2]}{2j'(j'+1)\hbar^2}m'_j\hbar$$

* Aunque las funciones propias ψ'_T están degeneradas respecto al número cuántico m'_j, puede emplearse la expresión (13–53) de la teoría ordinaria de la perturbación para calcular $\overline{\Delta E}$, puesto que j'_z tiene un valor definido independientemente de la presencia de la perturbación, de manera que ésta no puede causar una mezcla grande de las funciones propias.

www.FreeLibros.me

Es conveniente escribirla como

$$\overline{\Delta E} = \mu_B H g m'_j \tag{13–54}$$

donde

$$g \equiv 1 + \frac{j'(j'+1) + s'(s'+1) - l'(l'+1)}{2j'(j'+1)} \tag{13–54'}$$

La cantidad g recibe el nombre de *factor g* de *Landé*. Observe que $g = 1 = g_l$ cuando $s' = 0$, y que $g = 2 = g_s$ cuando $l' = 0$, como era de esperarse. De la ecuación (13–54) vemos que bajo la acción de un campo magnético externo H cada nivel de energía se romperá en $2j' + 1$ componentes, una para cada valor de m'_j, y que la separación dependerá del valor del factor g de Landé.

En el diagrama de niveles de energía de la figura 13–15 se ilustra la ecuación (13–54). Se muestra el rompimiento de los niveles de energía $^2P_{1/2,3/2}$ y $^2S_{1/2}$ en un campo magnético débil. También se indican las posibles transiciones entre los estados $^2P_{1/2,3/2}$ y $^2S_{1/2}$ (que, por supuesto, están en una configuración diferente). Puede efectuarse una transición sólo si

$$\Delta m'_j = 0, \pm 1 \quad (\text{pero no } m'_j = 0 \rightarrow m'_j = 0 \text{ si } \Delta j' = 0) \tag{13–55}$$

Aun con esta simplificación, el rompimiento de las líneas espectrales debido al efecto Zeeman conduce a un patrón de componentes que puede ser bastante complicado en el caso de líneas que corresponden a transiciones que incluyen estados con j' grande. Sin embargo, todas las líneas provenientes de transiciones entre estados de singulete se rompen en un patrón simple de dos componentes dispuestas simétricamente respecto a una tercera de la misma frecuencia que la línea en ausencia de campo, ya que $s' = 0$ para los estados

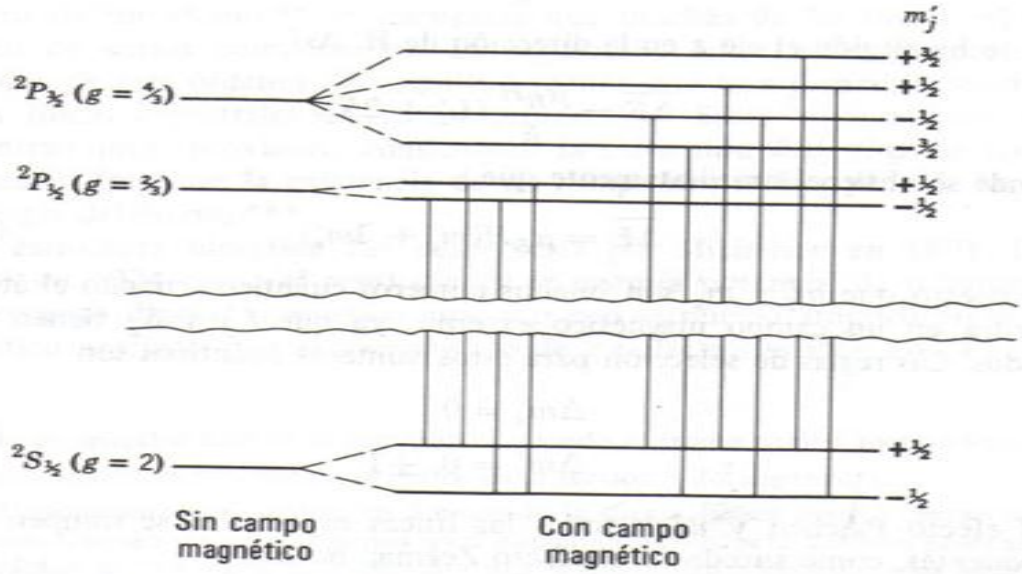

Figura 13-15. El rompimiento Zeeman de un par típico de niveles de energía y las transiciones posibles entre ellos.

www.FreeLibros.me

de singulete, de modo que todos los factores de Landé tienen el mismo valor: $g = 1$. Dibujando un diagrama semejante al de la figura 13–15 para las transiciones entre los estados de singulete, el lector podrá observar que todas las transiciones que satisfacen (13–55) sólo producen tres líneas espectrales, aun cuando el número de transiciones posibles es mayor, puesto que sólo existen tres diferencias de energía posibles para efectuar transiciones. Mencionamos anteriormente que en algunos casos era posible explicar el efecto Zeeman en términos de la teoría clásica. El lector podrá adivinar probablemente que son los casos en los cuales las líneas espectrales se rompen en tres componentes, ya que se trata de transiciones entre estados en los que el fenómeno no clásico del spin no tiene su importancia normal, puesto que $s' = 0$. A estos casos se los llama *efecto Zeeman normal;* todos los demás caen dentro del *efecto Zeeman anómalo.* Esta terminología fue empleada mucho antes de que la teoría moderna proporcionara un entendimiento completo del efecto Zeeman y, desde este punto de vista, es inapropiada.

Un campo magnético **H** débil comparado con los campos magnéticos del átomo que acoplan $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$ para formar $\mathbf{J}'$ no puede perturbar apreciablemente este acoplamiento y sólo hace precesionar lentamente a $\mathbf{J}'$ alrededor de **H**. Por el contrario, si **H** es intenso comparado con los campos magnéticos del átomo, domina el efecto de estos campos y destruye el acoplamiento entre $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$. En este caso, $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$ precesionan independientemente alrededor de **H**. Se tiene entonces el *efecto Paschen* y *Bach,* que se observa cuando los campos externos son comparables 10^4 gauss o mayores. En este caso

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{\mu_B}{\hbar}(\mathbf{L}' + 2\mathbf{S}')$$

y

$$\mu_{\mathbf{H}} = -\frac{\mu_B}{\hbar}(L'_z + 2S'_z)$$

donde se ha elegido el eje z en la dirección de **H**. Así

$$\overline{\Delta E} = \frac{\mu_B H}{\hbar}(L'_z + 2S'_z)$$

de donde se obtiene inmediatamente que

$$\overline{\Delta E} = \mu_B H(m'_l + 2m'_s) \tag{13–56}$$

Por supuesto que m'_l y m'_s son buenos números cuánticos cuando el átomo se encuentra en un campo magnético externo, ya que L'_z y S'_z tienen valores definidos. Las reglas de selección para estos números cuánticos son

$$\begin{aligned} \Delta m'_s &= 0 \\ \Delta m'_l &= 0, \pm 1 \end{aligned} \tag{13–57}$$

En el efecto Paschen y Bach todas las líneas espectrales se rompen en tres componentes, como sucede en el efecto Zeeman normal.

El efecto Zeeman es de capital importancia en la espectroscopia experimental. Al analizar el rompimiento Zeeman de las líneas espectrales de un

www.FreeLibros.me

átomo puede determinarse el rompimiento Zeeman de sus niveles de energía. Esto se emplea para identificar el número cuántico j' de cada nivel, ya que el número de componentes en las que un nivel puede romperse es $2j' + 1$. Además, la separación entre los niveles proporciona el valor de $\mu_B Hg$ y puesto que H y μ_B son conocidos, de aquí puede encontrarse el valor de g. Ya que éste depende de s', l' y j', puede emplearse para confirmar la asignación de estos números cuánticos. El número cuántico s' se encuentra contando número de niveles del multiplete del cual es miembro el nivel en cuestión. Este número es $2s' + 1$ (salvo cuando $s' > l'$, el número es $2l' + 1$). Puede asignarse el número cuántico l' para los niveles de un multiplete después que se ha asignado s', analizando la separación entre niveles adyacentes en términos de la regla de intervalo de Landé (13–43), y encontrando el valor de l' que, tomando en cuenta las restricciones impuestas por la tercera de las ecuaciones (13–41), lleva al valor de j' que dan las separaciones observadas.* Evidentemente que este procedimiento también conduce a la asignación del número cuántico j'. Al conocer los números cuánticos l' de todos los niveles de una configuración particular (los niveles pueden agruparse en configuraciones observando la semejanza de sus energías), se identifica el número cuántico l de esa configuración empleando la segunda ecuación (13–41). No es difícil identificar los números cuánticos n asociados con los diferentes valores de l si se conoce la n de la configuración del estado base, aprovechando el hecho de que las energías de las subcapas con l común aumenta monótonamente al aumentar n. La identificación del número cuántico n de la configuración del estado base se apoya en el mismo hecho.

11. La estructura hiperfina

Cuando un interferómetro de gran resolución se emplea para medir el espectro de un átomo,** se encuentra que muchas de las líneas espectrales constan de varios componentes. La separación entre estas componentes es alrededor de tres órdenes de magnitud menor que la separación característica de las líneas espectrales en la estructura fina. Estas componentes, que se encuentran muy próximas, constituyen la *estructura hiperfina* de las líneas espectrales. Implican la existencia de un *rompimiento hiperfino* de los niveles de energía del átomo.***

La estructura hiperfina fue descubierta por Michelson en 1891. Pauli la explicó en 1924 como el resultado de la energía potencial de orientación de un momento dipolar magnético asociado con el núcleo atómico en el campo magnético asociado con el movimiento de los electrones atómicos. El *momen-*

* Esto es aplicable sólo en el caso normal cuando el átomo exhibe acoplamiento *LS*.

** Los interferómetros fueron descritos en la sección 3 del capítulo 1.

*** Consideramos que todos los átomos de la fuente tienen pesos y números atómicos iguales. Cuando los átomos tienen igual número atómico, pero distintos pesos atómicos (una variedad de "isótopos"), se presenta una multiplicidad adicional en las líneas espectrales, aunque es un efecto trivial ya que se debe a la ligera dependencia de la masa reducida μ del electrón respecto del peso atómico.

www.FreeLibros.me

to dipolar magnético nuclear $\boldsymbol{\mu}_i$ se debe al *impulso angular de spin* **I** nuclear. La magnitud y la componente z de **I** están cuantizadas de acuerdo con las ecuaciones

$$I = \sqrt{i(i+1)}\,\hbar$$
$$I_z = m_i\hbar \tag{13–58}$$

donde

$$m_i = -i, -i+1, \ldots, +i-1, +i$$

Estas son las mismas que las reglas de cuantización del spin del electrón **S**. Sin embargo, la relación entre el momento dipolar magnético y el spin nuclear está dada por

$$\boldsymbol{\mu}_i = \frac{g_i\mu_N}{\hbar}\mathbf{I}$$
$$\mu_{i_z} = g_i\mu_N m_i \tag{13–59}$$

y no es la misma que la expresada por (11–22) y (11–23), que relaciona el momento dipolar magnético del electrón con su spin. El factor g_i es del orden de la unidad y es positivo para algunos núcleos y negativo para otros. La cantidad μ_N el *magnetón nuclear*, se define como

$$\mu_N \equiv \frac{e\hbar}{2Mc} = \frac{1}{1836}\frac{e\hbar}{2mc} = \frac{1}{1836}\mu_B \tag{13–60}$$

donde M es la masa del núcleo del ^{1}H y m la masa del electrón. Puesto que el magnetón nuclear μ_N es tres órdenes de magnitud menor que el magnetón de Bohr μ_B, los momentos magnéticos nucleares son más pequeños que los electrónicos por el mismo factor. En consecuencia, la energía potencial de orientación del momento magnético nuclear (estructura hiperfina) es tres órdenes de magnitud más pequeña que la energía potencial de orientación del momento magnético atómico (estructura fina), ya que ambos momentos magnéticos experimentan campos magnéticos de magnitud comparable.

La interacción del momento dipolar magnético del núcleo acopla el vector de spin **I** del núcleo con el vector de impulso angular total **J** de los electrones.* En virtud de este acoplamiento, ambos vectores precesionan alrededor del *vector de impulso angular gran total*

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J} \tag{13–61}$$

Las magnitudes de **I** y **J** permanecen constantes, aunque no sus componentes z. En consecuencia, m_i y m_j no son buenos números cuánticos cuando se considera la interacción de estructura hiperfina. Sin embargo, los dos números

* Para simplificar la notación, en esta sección no indicaremos las primas en **J** o en los números cuánticos asociados.

www.FreeLibros.me

cuánticos que especifican la magnitud y la componente z de $\mathbf{F}$ dados por las ecuaciones

$$F = \sqrt{f(f+1)}\,\hbar$$
$$F_z = m_f\hbar \tag{13–62}$$

donde

$$m_f = -f, -f+1, \ldots, +f-1, +f$$

son buenos números cuánticos y pueden emplearse para identificar los estados cuánticos y los niveles de energía. Por ejemplo, el término en la energía total del átomo que toma en cuenta el rompimiento hiperfino de los niveles de energía puede escribirse como

$$\overline{\Delta E_{\mathbf{I}\cdot\mathbf{J}}} = K[f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)] \tag{13–63}$$

Es completamente análogo a la ecuación (13–42). La ecuación (13–63) se obtiene evaluando la energía potencial de orientación del momento magnético nuclear en el campo magnético del átomo y es proporcional al valor esperado de $\mathbf{I}\cdot\mathbf{J}$; la ecuación (13–42) se obtiene evaluando la energía potencial de orientación del momento magnético de los electrones en el campo magnético del átomo y es proporcional al valor esperado para $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$.

Los valores del término $\overline{\Delta E_{\mathbf{I}\cdot\mathbf{J}}}$ dependen del valor del número cuántico f. Por una ecuación análoga a (13–41) se determinan los valores de f siendo $2i+1$ el número de los posibles (cuando $i > j$ hay $2j+1$ valores). Así, los niveles de energía estarán formados generalmente de $2i+1$ componentes de estructura hiperfina. En consecuencia, pueden determinarse los números cuánticos que especifican la magnitud del spin midiendo el espectro de estructura hiperfina del átomo y contando simplemente el número de componentes de estructura hiperfina de los niveles. Se encuentra que el número cuántico i es un entero (0, 1, 2, . . .) si el peso atómico A del átomo es par, siendo $i = 0$ cuando el número atómico Z también es par; i es semientero ($\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, .$) si el número atómico A es non.*

La cantidad K que aparece en la ecuación (13–63) depende del valor del campo magnético en el núcleo y del momento magnético nuclear. Si se dispone de las funciones propias de Hartree que describen el movimiento de los electrones atómicos, puede calcularse el campo magnético con una precisión de alrededor del 10 por ciento. Entonces, con esta precisión, puede emplearse el valor medido de $\overline{\Delta E_{\mathbf{I}\cdot\mathbf{J}}}$ para evaluar la magnitud y el signo del momento magnético nuclear. Como se mencionó, se encuentra que para todos los núcleos la magnitud del vector de momento magnético dipolar es del orden de un magnetón nuclear (esto es, $|g_i| \sim 1$) y el vector es paralelo al vector de spin en algunos núcleos y antiparalelo en otros (esto es, g_i es + ó −).

La estructura hiperfina también proporciona información sobre el *momento cuadripolar eléctrico* Q del núcleo del átomo que produce el espectro. Esta

* Nos referimos al entero A que es el más cercano al peso atómico de un "isótopo" particular del átomo. Así, el peso atómico siempre es muy cercano a un entero.

www.FreeLibros.me

cantidad especifica hasta qué grado la distribución de carga del núcleo se desvía de la simetría esférica. En todos los casos, la distribución de carga es la de un elipsoide cuyo eje de simetría tiene la dirección alrededor de la que precesiona el vector de spin del núcleo. Cuando $Q > 0$, el elipsoide está elongado en la dirección del eje y cuando $Q < 0$ está aplastado en esa dirección. Cuando $Q = 0$, la distribución de carga tiene la simetría esférica.* Cuando $Q \neq 0$ el núcleo tendrá una energía potencial de orientación en el campo eléctrico del átomo, que no es esféricamente simétrico. En un caso típico, esta energía es comparable a la energía potencial de orientación del momento dipolar magnético nuclear en el campo magnético del átomo. Sin embargo, la dependencia de la energía con los números cuánticos que especifican la orientación del núcleo en el átomo, en el caso de la interacción cuadripolar eléctrica, es distinta a la que se tiene en el caso de la dipolar magnética, lo que permite separar experimentalmente los dos efectos. Cuando se presenta la interacción cuadripolar eléctrica, se observa que el rompimiento de estructura hiperfina de los niveles de energía se desvía de las predicciones de la ecuación (13–63), que considera sólo la interacción dipolar magnética. Analizando estas desviaciones y calculando el campo eléctrico atómico en el núcleo con funciones propias de Hartree, es posible calcular el signo y la magnitud aproximada del momento cuadripolar eléctrico del núcleo. Se encuentra que $Q = 0$ para todos los núcleos con $i = 0$ o $i = \frac{1}{2}$. Esto puede entenderse por consideraciones de simetría. Por ejemplo, cuando $i = 0$ no existe algo que defina un eje de simetría con respecto al cual pueda medirse un momento cuadripolar eléctrico. Si un núcleo tiene $i \geqslant 1$, comúnmente Q es diferente de cero y que sea positivo es el caso más frecuente. El núcleo del ^{71}Lu tiene uno de los momentos cuadripolares más grandes hasta ahora conocidos. Su distribución de carga está elongada en la dirección del eje de simetría y la relación de su semieje mayor al menor es de 1.20 ± 0.05.

Las técnicas para medir los momentos magnéticos dipolares del núcleo a partir del análisis de la estructura hiperfina son de precisión limitada, ya que dependen del cálculo de la intensidad del campo magnético del átomo. En los años que siguieron a 1933, Rabi y otros, desarrollaron diversas técnicas extremadamente precisas. En todas ellas se mide la energía potencial de orientación del dipolo en un campo magnético externo de intensidad conocida. En los átomos que no tienen un momento dipolar magnético producido por los electrones atómicos (un átomo en el estado $^1S_0$), puede medirse el momento dipolar magnético de su núcleo enviando un haz de átomos a través de un aparato semejante al empleado por Stern y Gerlach. En otros casos puede investigarse la energía del momento magnético nuclear en un campo magnético externo lo suficientemente fuerte como para destruir el acoplamiento entre **I** y **J** producido por el campo magnético del átomo. En la más precisa de esas técnicas se mide el momento magnético, no en términos de la desviación de un haz atómico, sino en términos de la energía de los cuantos de radiofrecuencia que inducen transiciones entre dos niveles de energía que han sufrido rompimiento hiperfino en un campo magnético externo de intensidad conocida. Estas medidas, y la mecánica cuántica sobre la

* Una definición precisa de Q se dará en la sección 9 del capítulo 16.

www.FreeLibros.me

que se basan, forman un tema muy interesante que sólo con pesar no mencionamos para continuar la discusión de la estructura y del espectro atómicos.

12. Rapidez de transición y reglas de selección

Considere un átomo aislado que se encuentra en un estado excitado de energía E_l. Eventualmente efectuará una transición espontánea a un estado de energía menor E_k a la vez que emite un cuanto de radiación electromagnética. Deseamos calcular ahora la *rapidez de transición para la emisión espontánea*, o sea, la probabilidad por unidad de tiempo para que el átomo efectúe la transición. Este cálculo nos permitirá entender las *reglas de selección* que gobiernan la transición entre dos niveles de energía, así como las vidas medias de estos estados y las anchuras de las líneas espectrales emitidas en las transiciones.

La teoría desarrollada hasta ahora no nos dice cómo tratar la emisión espontánea, sino cómo tratar el proceso inverso, el de la absorción. En este proceso, un átomo bajo la influencia de la radiación electromagnética, al absorber un cuanto, efectúa una transición del estado de energía E_k a un estado de energía mayor E_l. Puede considerarse la acción de la radiación electromagnética como una pequeña perturbación y aplicar la teoría de la perturbación dependiente del tiempo para evaluar la probabilidad por unidad de tiempo para que esta perturbación produzca tal transición. Esta cantidad es la *rapidez de transición para la absorción*. Calcularemos primero esta rapidez de transición y, posteriormente, veremos cómo está relacionada con la rapidez de transición para la emisión espontánea.

En presencia de la radiación electromagnética, el momento magnético de un átomo interacciona con el campo magnético y sus cargas con el campo eléctrico. La interacción magnética es generalmente despreciable en comparación con la eléctrica, de modo que sólo consideraremos esta última. Aunque el campo eléctrico está descrito por el vector **E**, es posible tratar por separado la interacción con cada una de las componentes del vector. Cada componente, E_x, por ejemplo, es una función que oscila tanto en el tiempo como en el espacio. Sin embargo, las longitudes de onda características de la absorción o de la emisión del espectro óptico de un átomo ($\lambda \sim 10^3$ A) son grandes en comparación con las dimensiones lineales del átomo ($r \sim 1$ A) que, en cualquier tiempo, E_x es esencialmente constante en la región ocupada por el átomo. En consecuencia, podemos ignorar la dependencia de E_x respecto a la posición y escribirla como

$$E_x = 2E_x^0(\nu) \cos 2\pi\nu t \tag{13-64}$$

donde $2E_x^0(\nu)$ depende, en general, de la frecuencia ν. Es conveniente considerar, más bien la expresión,*

$$E_x = E_x^0(\nu)(e^{2\pi i\nu t} + e^{-2\pi i\nu t}) \tag{13-64'}$$

* En el pie de la página 177 se indica el procedimiento para demostrar la igualdad entre (13–64) y (13–64′).

www.FreeLibros.me

En el campo eléctrico E_x las cargas eléctricas del átomo tienen una energía potencial. Definamos el cero de la energía potencial en el origen del eje x que se encuentra en el centro del átomo, y calculemos la energía potencial total del átomo debida a la componente x del campo eléctrico sumando la energía potencial de cada carga. Esto es

$$v_x = -E_x \sum_j -ex_j \tag{13–65}$$

La suma se toma sobre cada electrón de carga $-e$ y coordenada x_j; el núcleo cargado no contribuye, ya que su coordenada x es igual a cero. Substituyendo E_x tenemos el potencial de la perturbación

$$v_x = E_x^0(\nu)(e^{2\pi i\nu t} + e^{-2\pi i\nu t}) \sum_j ex_j \tag{13–66}$$

que es una función que oscila en el tiempo

Encontramos el efecto de esta perturbación sobre un átomo, que en $t = 0$ se encuentra en un estado de energía E_k, resolviendo la ecuación (9–32)

$$\frac{da_m(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n a_n(t) e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} v_{x_{mn}} \tag{13–67}$$

con la condición de que para $t = 0$:

$$a_n(0) = \begin{matrix} 0, & n \neq k \\ 1, & n = k \end{matrix} \tag{13–68}$$

La cantidad $v_{x_{mn}}$ es el elemento de matriz de la perturbación v_x entre los estados n y m, esto es,

$$v_{x_{mn}} \equiv \int \psi_m^* v_x \psi_n \, d\tau$$

donde la integración se extiende sobre las coordenadas del elemento de volumen $d\tau$. Las cantidades $a_n(t)$ son los coeficientes del desarrollo

$$\Psi'(x, t) = \sum_n a_n(t) \Psi(x, t)$$

de las funciones de onda perturbadas en términos de las no perturbadas. El producto $a_n^*(t)a_n(t)$ es igual a la probabilidad de encontrar el átomo en el estado E_n al tiempo t. Si suponemos que la perturbación es suficientemente pequeña, de modo que

$$a_n(t) \begin{matrix} \ll 1, & n \neq k, \\ \simeq 1, & n = k, \end{matrix} \qquad t > 0 \tag{13–69}$$

podemos despreciar todos los términos del segundo miembro de (13–67) salvo el $n = k$. De este modo

$$\frac{da_m(t)}{dt} \simeq -\frac{i}{\hbar} a_k(t) e^{-i(E_k - E_m)t/\hbar} v_{x_{mk}}$$

www.FreeLibros.me

Haciendo $m = l$, obtenemos la ecuación diferencial para el coeficiente $a_l(t)$, en el que estamos particularmente interesados. Tomando en cuenta la condición (13–69) para $a_k(t)$, se tiene

$$\frac{da_l(t)}{dt} \simeq -\frac{i}{\hbar} e^{-i(E_k-E_l)t/\hbar} v_{x_{lk}}$$

Evaluando $v_{x_{lk}}$ y reordenando los términos,

$$\frac{da_l(t)}{dt} \simeq -\frac{i}{\hbar} \int \psi_l^* \sum_j e x_j \psi_k \, d\tau [e^{i(E_l-E_k+h\nu)t/\hbar} + e^{i(E_l-E_k-h\nu)t/\hbar}] E_x^0(\nu)$$

o sea

$$\frac{da_l(t)}{dt} \simeq -\frac{i}{\hbar} \mu_{x_{lk}} [e^{i(E_l-E_k+h\nu)t/\hbar} + e^{i(E_l-E_k-h\nu)t/\hbar}] E_x^0(\nu)$$

donde

$$\mu_{x_{lk}} \equiv \int \psi_l^* \sum_j e x_j \, \psi_k \, d\tau \tag{13–70}$$

Integrando la ecuación diferencial desde $t = 0$ hasta $t = t'$ y tomando en cuenta la condición inicial (13–68) se tiene

$$a_l(t') \simeq \mu_{x_{lk}} \left[\frac{1 - e^{i(E_l-E_k+h\nu)t'/\hbar}}{E_l - E_k + h\nu} + \frac{1 - e^{i(E_l-E_k-h\nu)t'/\hbar}}{E_l - E_k - h\nu} \right] E_x^0(\nu) \tag{13–71}$$

Consideremos el comportamiento de esta ecuación. Puesto que la perturbación es pequeña, $\mu_{x_{lk}} E_x^0(\nu)$ será pequeña. Puesto que los valores absolutos de los numeradores de los dos términos en el paréntesis están comprendidos entre 0 y 2, el segundo miembro es pequeño excepto para las frecuencias en las que se hace pequeño alguno de los denominadores. Sólo cuando

$$E_l - E_k \pm h\nu \simeq 0 \tag{13–72}$$

$a_l(t')$ tendrá un valor apreciable. Puesto que $E_l > E_k$, esta condición sólo puede satisfacerse con el signo $-$. Así, será apreciable la probabilidad de encontrar al átomo en el estado de energía E_l, que es $a_l^*(t')\, a_l(t')$ sólo si la frecuencia de la radiación electromagnética satisface aproximadamente la relación $E_l - E_k = h\nu$. Esta es precisamente la relación de Einstein entre la frecuencia y la energía del cuanto absorbido en la transición.

De estos argumentos observamos que puede despreciarse el primer término dentro del paréntesis de (13–71). Se multiplica entonces la expresión que resulta por su complejo conjugado y, empleando la relación discutida al pie de la página 172, se obtiene

$$a_l^*(t)\, a_l(t) = 4\mu_{x_{lk}}^* \mu_{x_{lk}} \frac{\operatorname{sen}^2 \left[\frac{(E_l - E_k - h\nu)}{2\hbar} t \right]}{(E_l - E_k - h\nu)^2} E_x^0(\nu)^2 \tag{13–73}$$

www.FreeLibros.me

donde hemos eliminado las primas para simplificar la notación. El lector comparará esta expresión con la ecuación (9–41), que expresa el resultado de una perturbación que se "inicia" al tiempo $E = 0$ y posteriormente permanece constante. Ambas ecuaciones varían como t^2 para valores pequeños de t. La ecuación (9–41) posteriormente varía como t^1, lo que es de esperarse intuitivamente, al integrar la ecuación. Lo mismo es válido para la ecuación (13–73). Para que corresponda a la realidad física, esta ecuación debe integrarse sobre ν, ya que la radiación electromagnética nunca tiene una frecuencia perfectamente definida sino que cubre un intervalo de frecuencias. La integración se puede efectuar desde $+\infty$ hasta $-\infty$, ya que el integrando es pequeño excepto en un pequeño intervalo de ν. El cálculo es igual al que precede a la ecuación (9–44), y el resultado es

$$P_{x_{lk}} \simeq \frac{1}{\hbar^2} \mu^*_{x_{lk}} \mu_{x_{lk}} E^0_x(\nu_{lk})^2 t \tag{13–74}$$

La cantidad $P_{x_{lk}}$ es la probabilidad de que un átomo que originalmente se encuentra en un estado de energía E_k se encuentre al tiempo t en el estado de energía E_l cuando se encuentra bajo la influencia de la componente x de un campo eléctrico de un espectro continuo de radiación electromagnética. $E^0_x(\nu_{lk})^2$ es el cuadrado de $E^0_x(\nu)$ para la frecuencia que satisface la relación

$$E_l - E_k = h\nu_{lk} \tag{13–75}$$

La contribución de la componente x del campo eléctrico a la rapidez de transición para la absorción es

$$R_{x_{lk}} \equiv \frac{dP_{x_{lk}}}{dt} \simeq \frac{1}{\hbar^2} \mu^*_{x_{lk}} \mu_{x_{lk}} E^0_x(\nu_{lk})^2 \tag{13–76}$$

Se obtienen expresiones semejantes para las contribuciones de las componentes y y z. La rapidez de transición completa para la absorción es

$$R_{lk} \simeq \frac{1}{\hbar^2} [\mu^*_{x_{lk}} \mu_{x_{lk}} E^0_x(\nu_{lk})^2 + \mu^*_{y_{lk}} \mu_{y_{lk}} E^0_y(\nu_{lk})^2 + \mu^*_{z_{lk}} \mu_{z_{lk}} E^0_z(\nu_{lk})^2] \tag{13–77}$$

Si la radiación no está polarizada, las amplitudes de las tres componentes del campo eléctrico son iguales y

$$R_{lk} \simeq \frac{1}{\hbar^2} E^0_x(\nu_{lk})^2 [\mu^*_{x_{lk}} \mu_{x_{lk}} + \mu^*_{y_{lk}} \mu_{y_{lk}} + \mu^*_{z_{lk}} \mu_{z_{lk}}] \tag{13–78}$$

Es conveniente expresar este resultado en términos de $\bar{\rho}$, el promedio respecto al tiempo de la densidad de energía de la radiación electromagnética. Tomando el promedio en el tiempo de ambos miembros de la ecuación (2–4), obtenemos

$$\bar{\rho} = \frac{1}{4\pi} \overline{E^2} \tag{13–79}$$

donde $\overline{E^2}$ es el promedio en el tiempo del campo eléctrico (hemos eliminado el índice inferior que indica transversal). Ya que se ha supuesto que son

www.FreeLibros.me

iguales las amplitudes de las tres componentes del campo eléctrico, también son iguales los promedios en el tiempo de los cuadrados de las amplitudes, esto es,

$$\overline{E_x^2} = \overline{E_y^2} = \overline{E_z^2}$$

Entonces, puesto que

$$\overline{E^2} = \overline{E_x^2} + \overline{E_y^2} + \overline{E_z^2}$$

tenemos

$$\overline{E^2} = 3\overline{E_x^2} \tag{13–80}$$

elevando al cuadrado ambos miembros de la ecuación (13–64), y promediando respecto a t, obtenemos una relación entre $\overline{E_x^2}$ y $E_x^0(\nu_{lk})^2$:

$$\overline{E_x^2} = 2E_x^0(\nu_{lk})^2 \tag{13–81}$$

De la ecuación (13–78) a la (13–81) obtenemos

$$R_{lk} \simeq \frac{2\pi}{3\hbar^2}\,\bar{\rho}(\nu_{lk})[\mu_{x_{lk}}^*\mu_{x_{lk}} + \mu_{y_{lk}}^*\mu_{y_{lk}} + \mu_{z_{lk}}^*\mu_{z_{lk}}] \tag{13–82}$$

donde hemos indicado explícitamente que la densidad de energía se calcula a la frecuencia ν_{lk}. Esta es la expresión deseada para la rapidez de transición para la absorción.

Observamos que hay una probabilidad de transición apreciable del estado de energía E_k al de energía E_l, al absorberse un cuanto, sólo cuando la ecuación (13–72) se satisface con el signo –. Sin embargo, puede satisfacerse la ecuación con el signo + cuando, al emitirse un *cuanto*, el átomo pasa del estado de energía E_l al de energía E_k. A este fenómeno se le conoce con el nombre de *emisión inducida*, ya que la interacción con el campo electromagnético induce una transición en la que se emite un cuanto. La *rapidez de transición para la emisión inducida* R_{kl} puede calcularse a partir de la ecuación (13–69) intercambiando k y l en todas partes, salvo en la condición $E_l > E_k$ y en el símbolo ν_{lk}. En este caso, el primer término en el paréntesis de la ecuación (13–71) es el que contribuye. Todo lo demás es idéntico y obtenemos

$$R_{kl} \simeq \frac{2\pi}{3\hbar^2}\,\bar{\rho}(\nu_{lk})[\mu_{x_{kl}}^*\mu_{x_{kl}} + \mu_{y_{kl}}^*\mu_{y_{kl}} + \mu_{z_{kl}}^*\mu_{z_{kl}}] \tag{13–83}$$

Fácilmente puede verse de la ecuación (13–70) que

$$\mu_{x_{kl}}^*\mu_{x_{kl}} = \mu_{x_{lk}}^*\mu_{x_{lk}}, \text{ etc.}$$

de manera que comparando (13–83) y (13–82) observamos que

$$R_{lk} = R_{kl} \tag{13–84}$$

La rapidez de transición para la absorción es igual a la rapidez para la de emisión inducida. Este es un ejemplo del principio de *reversibilidad microscópica*, que es muy importante en la mecánica estadística.

www.FreeLibros.me

No debe confundirse el proceso de emisión inducida con el de emisión espontánea. Conforme a la ecuación (13–83), la rapidez de transición para la emisión inducida es proporcional a la densidad de energía $\bar{\rho}$ de la radiación electromagnética aplicada al átomo. Si no está presente la radiación electromagnética no habrá emisión inducida. Por el contrario, habrá una emisión espontánea independientemente de la aplicación de radiación electromagnética sobre el átomo, ya que la rapidez de transición para este proceso no contiene a $\bar{\rho}$. La rapidez de transición para la emisión espontánea S_{kl} es una característica intrínseca del átomo, sin que influya el ambiente donde está colocado el átomo. Regresemos a nuestro propósito original, calcular S_{kl}.

Esto se puede lograr de dos maneras distintas. El tratamiento más riguroso se basa en la *electrodinámica cuántica*.* Presentamos aquí el otro tratamiento, desarrollado por Einstein pocos años antes de la introducción de la mecánica cuántica y que, en una forma simple, conduce a los mismos resultados. La idea consiste en establecer una relación entre la rapidez de transición para la absorción, la emisión inducida y la emisión espontánea a partir de consideraciones de equilibrio termodinámico. Imagínese una cavidad que contiene un número grande de átomos que absorben y emiten radiación electromagnética. Si el sistema se encuentra en equilibrio a la temperatura T:

1. La radiación electromagnética debe tener una distribución espectral de cuerpo negro que corresponda a esa temperatura;
2. El número total de átomos en cada estado de energía debe corresponder a una distribución de probabilidad de Boltzmann a esa temperatura y, en consecuencia,
3. El número total de átomos en cada estado debe permanecer constante.

La condición 3 exige que el número total de transiciones por unidad de tiempo del estado de menor energía E_k al de mayor energía E_l sea igual al número total de transiciones en la dirección opuesta. El número total de transiciones por unidad de tiempo del estado de menor energía al de mayor energía es

$$\mathcal{N}_{lk} = N_k R_{lk} \tag{13–85}$$

donde N_k es el número total de estados de energía E_k y la rapidez de transición para la absorción R_{lk} es la probabilidad por unidad de tiempo para que uno de los átomos efectúe una transición al estado de energía E_l. Conforme a (13–82), se puede escribir

$$R_{lk} = B_{lk}\bar{\rho}(\nu_{lk}) \tag{13–86}$$

Esta cantidad define la constante de proporcionalidad B_{lk} entre la rapidez de transición para la absorción y la densidad de energía y recibe el nombre de

* Vea la nota al pie de la página 450.

www.FreeLibros.me

*coeficiente de Einstein para la absorción.** En términos de esta cantidad, la ecuación (13–85) toma la forma

$$\mathcal{N}_{lk} = N_k B_{lk} \bar{\rho}(\nu_{lk}) \tag{13–87}$$

El número total de transiciones por unidad de tiempo del estado de energía mayor al de energía menor es

$$\mathcal{N}_{kl} = N_l [R_{kl} + S_{kl}] \tag{13–88}$$

donde N_l es el número total de átomos en el estado de mayor energía, R_{kl} es la rapidez de transición para la emisión inducida y S_{kl} es la rapidez de transición para la emisión espontánea. De (13–83) tenemos

$$R_{kl} = B_{kl} \bar{\rho}(\nu_{lk}) \tag{13–89}$$

que define el *coeficiente de Einstein para la emisión inducida* B_{kl}. Definimos

$$S_{kl} = A_{kl} \tag{13–90}$$

Como el *coeficiente de Einstein para la emisión espontánea* A_{kl}. Todos los coeficientes B_{lk}, B_{kl} y A_{kl} dependen de las propiedades intrínsecas de los átomos, y la ecuación (13–90) toma en cuenta el hecho de que la rapidez de transición para la emisión espontánea es independiente de la intensidad de la radiación electromagnética aplicada al átomo. De las dos últimas ecuaciones, la ecuación (13–88) puede escribirse como

$$\mathcal{N}_{kl} = N_l [B_{kl} \bar{\rho}(\nu_{lk}) + A_{kl}] \tag{13–91}$$

Para satisfacer la condición 3 igualamos $\mathcal{N}_{kl}$ y $\mathcal{N}_{lk}$, y obtenemos

$$\frac{N_k}{N_l} = \frac{B_{kl} \bar{\rho}(\nu_{lk}) + A_{kl}}{B_{lk} \bar{\rho}(\nu_{lk})} \tag{13–92}$$

Aplicando la condición 2 puede calcularse la cantidad N_k/N_l. La distribución de Boltzmann (2–23) afirma que a la temperatura T, la probabilidad de que un átomo tenga la energía E_k es proporcional a $e^{-E_k/KT}$, y la probabilidad de que tenga la energía E_l es proporcional a $e^{-E_l/KT}$, donde K es la constante de Boltzmann. En consecuencia, el cociente entre los números de átomos en esas dos energías es

$$\frac{N_k}{N_l} = \frac{e^{-E_k/KT}}{e^{-E_l/KT}} = e^{(E_l - E_k)/KT} \tag{13–93}$$

Conforme a la ecuación (13–75), éste es

$$\frac{N_k}{N_l} = e^{h\nu_{lk}/KT} \tag{13–94}$$

* Cuando Einstein formuló su teoría consideró, como postulado la ecuación (13–86) puesto que aún no se conocía la ecuación (13–82).

www.FreeLibros.me

Combinando esta ecuación con la (13–92) se obtiene

$$e^{h\nu_{lk}/KT} = \frac{B_{kl}\bar{\rho}(\nu_{lk}) + A_{kl}}{B_{lk}\bar{\rho}(\nu_{lk})}$$

y despejando $\bar{\rho}(\nu_{lk})$:

$$\bar{\rho}(\nu_{lk}) = \frac{A_{kl}}{B_{lk}e^{h\nu_{lk}/KT} - B_{kl}} \tag{13–95}$$

Finalmente, para satisfacer la condición 1 debe igualarse (13–95) a la distribución de densidad de energía (2–31). En términos de la notación actual ésta es

$$\bar{\rho}(\nu_{lk}) = \frac{8\pi h\nu_{lk}^3}{c^3}\frac{1}{e^{h\nu_{lk}/KT} - 1} \tag{13–96}$$

Al comparar las ecuaciones (13–95) y (13–96) se observa que los tres coeficientes de Einstein deben satisfacer las siguientes relaciones:

$$B_{lk} = B_{kl} \tag{13–97}$$

y

$$A_{kl} = \frac{8\pi h\nu_{lk}^3}{c^3}B_{kl} \tag{13–98}$$

La ecuación (13–97) muestra que este tratamiento es consistente con la ecuación (13–84). La ecuación (13–98) proporciona la relación buscada entre la rapidez de transición para la absorción y para la emisión espontánea. Este último puede obtenerse combinando (13–83), (13–89) y (13–90):

$$S_{kl} \simeq \frac{32\pi^3\nu_{lk}^3}{3\hbar c^3}[\mu_{x_{kl}}^*\mu_{x_{kl}} + \mu_{y_{kl}}^*\mu_{y_{kl}} + \mu_{z_{kl}}^*\mu_{z_{kl}}] \tag{13–99}$$

Se observa que la rapidez de transición para la emisión espontánea es proporcional al cubo de la frecuencia (o de la energía) de los cuantos emitidos. Así como acontece con la rapidez de transición para la emisión inducida y para la absorción, es también proporcional a los productos de cantidades tales como $\mu_{x_{kl}}$ y sus complejos conjugados. $\mu_{x_{kl}}$ es el *elemento de matriz de la componente x del momento dipolar eléctrico del átomo.* Las cantidades $\mu_{y_{kl}}$ y $\mu_{z_{kl}}$ son los elementos correspondientes a las componentes y y z. Se introduce esta nomenclatura ya que el término $\sum_j ex_j$, incluido en el integrando de la ecuación (13–70), es la componente x del momento dipolar eléctrico del átomo. El elemento de matriz de $\sum_j ex_j$ es su promedio con el factor de peso $\psi_k^*\psi_l$. Este factor de peso no es ni la densidad de probabilidad del estado cuántico inicial $\psi_l^*\psi_l$, ni la densidad de probabilidad del estado cuántico final $\psi_k^*\psi_k$, sino una especie de "densidad de probabilidad mixta" que encierra las funciones propias de los dos estados. La probabilidad de que un átomo radíe un cuanto dependerá no solamente de lo que el átomo hace en el estado

www.FreeLibros.me

cuántico inicial antes de que radíe, sino también de lo que hará en el estado cuántico final después de haber radiado. La razón de esto es que cuando un átomo radía no se encuentra totalmente ni en el estado inicial ni en el final, sino en una combinación lineal de ambos.

Puede emplearse este punto de vista para dar una imagen física de lo que pasa en el proceso de radiación. Considere una transición inducida de un átomo del estado inicial de energía E_l a un estado final de energía menor E_k acompañado de la emisión de un cuanto. Conforme a la ecuación (7–45), la función de onda que describe el átomo siempre puede escribirse como

$$\Psi = \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n \tag{13–100}$$

Antes de la aplicación del campo magnético que induce la transición, el átomo se encuentra en el estado propio de energía E_l. Sólo el coeficiente a_l es distinto de cero y

$$\Psi = a_l e^{-iE_l t/\hbar} \psi_l$$

La densidad de probabilidad correspondiente es

$$\Psi^*\Psi = a_l^* a_l \psi_l^* \psi_l \tag{13–101}$$

Esta cantidad especifica la distribución de carga eléctrica en el átomo. Es constante en el tiempo. En consecuencia, el momento dipolar eléctrico, así como cualquier otra cantidad derivada de la distribución de carga, son constantes en el tiempo. Clásicamente, el átomo sólo puede radiar si el momento dipolar eléctrico, o cualquier otra característica de la distribución de carga, cambia en el tiempo. Podemos entender entonces, aun en un sentido clásico, por qué un átomo no puede radiar mientras se encuentre en un estado propio. Cuando se aplica el campo electromagnético, se produce una perturbación que mezcla las contribuciones de la función de onda para el estado propio de energía E_k en la función de onda del átomo. El coeficiente a_k aumenta desde su valor cero y el coeficiente a_l disminuye al transcurrir el tiempo. Considere la función de onda del átomo cuando ambos a_k y a_l son distintos de cero,

$$\Psi = a_l e^{-iE_l t/\hbar} \psi_l + a_k e^{-iE_k t/\hbar} \psi_k \tag{13–102}$$

La densidad de probabilidad correspondiente es

$$\begin{aligned}\Psi^*\Psi = {} & a_l^* a_l \psi_l^* \psi_l + a_k^* a_k \psi_k^* \psi_k \\ & + a_l^* a_k e^{i(E_l - E_k)t/\hbar} \psi_l^* \psi_k + a_k^* a_l e^{-i(E_l - E_k)t/\hbar} \psi_k^* \psi_l\end{aligned} \tag{13–103}$$

Los dos últimos términos de $\Psi^*\Psi$ oscilan con la frecuencia

$$\nu = \frac{E_l - E_k}{h} \tag{13–104}$$

www.FreeLibros.me

Al transcurrir el tiempo el valor de a_l se reduce a cero, y la densidad de probabilidad será

$$\Psi^*\Psi = a_k^* a_k \psi_k^* \psi_k$$

Si ésta es la densidad de probabilidad, el átomo no puede radiar. Es claro que puede radiar cuando aún se encuentra en un estado descrito por la función (13–102). En este estado la densidad de probabilidad (13–103) y la distribución de carga tienen componentes que oscilan con la frecuencia (13–104), que es precisamente la frecuencia del cuanto de radiación electromagnética emitida durante la transición.

Estos argumentos proporcionan una imagen física conveniente de los procesos de emisión inducida y de absorción. Podría pensarse que no se aplica al proceso de emisión espontánea, ya que en este caso no existe la perturbación proveniente del campo electromagnético que provoque la mezcla de las funciones de onda que lleva a una densidad de probabilidad que oscila en el tiempo. La electrodinámica cuántica elimina esta dificultad. En ella se considera que tanto la radiación electromagnética como el átomo están cuantizados.* Se encuentra que estos dos sistemas interaccionan, aun cuando el campo electromagnético se encuentra en un estado de energía mínima, ya que debe existir alguna radiación electromagnética, puesto que en este estado del campo tiene energía del punto cero (como es el caso de cualquier otro sistema que efectúa oscilaciones armónicas simples).

Si se conocen las funciones propias de un átomo, evaluando integrales del tipo (13–70) pueden obtenerse los elementos de matriz del dipolo eléctrico entre cualquier par de estados excitados. A partir de (13–99) puede calcularse la rapidez de transición para la emisión espontánea entre estos estados. La rapidez de transición permite la predicción teórica de las intensidades relativas de las líneas espectrales emitidas en las transiciones entre los diferentes estados. Se observa que la concordancia entre estas predicciones y los datos experimentales es bastante buena. La rapidez de transición para la emisión espontánea fluctúa grandemente de un caso a otro. La rapidez de transición del ^1H de su primer estado excitado al estado base es aproximadamente de 10^8 seg^{-1}, lo que es un valor típico para los órdenes de magnitud que se encuentran. Sin embargo, se observan casos en los que la rapidez de transición entre pares de estados es esencialmente igual a cero. En estos casos, las líneas espectrales son sumamente débiles o están ausentes. Se predice para estos casos que la rapidez de transición es igual a cero ya que las integrales de los

* La cuantización del campo electromagnético era ya considerada en las teorías de Planck y Einstein, que afirman que este campo está formado de cuantos de energía $E = h\nu$. Sin embargo, se necesita una teoría más completa, ya que es preciso saber cómo interacciona un campo electromagnético en el límite cuántico (que contiene pocos cuantos) con un sistema externo de cargas, de la misma manera que es necesario saber cómo un campo electromagnético interacciona en el límite clásico (que contiene muchos cuantos) con un sistema externo. La teoría de Maxwell describe el límite clásico, la electrodinámica cuántica, el límite cuántico. En esta teoría se aplica la mecánica cuántica de Schrödinger a un sistema de cuantos, procedimiento que es mucho más complejo que la cuantización de un sistema de partículas, ya que el número de cuantos en un sistema puede *variar* cuando interacciona con un sistema externo.

www.FreeLibros.me

elementos de matriz del dipolo eléctrico son iguales a cero. De esta manera, *las reglas de selección son un conjunto de condiciones sobre los números cuánticos de las funciones propias de los estados inicial y final, de modo que los elementos de matriz del dipolo eléctrico son iguales a cero cuando se calculan con un par de funciones propias cuyos números cuánticos violan estas condiciones.*

En un ejemplo simple, efectuaremos parte de los cálculos de los elementos de matriz del dipolo eléctrico para un átomo con un electrón ópticamente activo. En este caso, la coraza formada por subcapas llenas no cambia en la transición, y sólo es necesario evaluar los elementos de matriz de e veces las tres componentes rectangulares del electrón ópticamente activo. Asimismo, sólo es preciso escribir las funciones propias de este electrón en las integrales de los elementos de matriz. Todos los otros factores en la función propia completa del átomo, al integrarlos, dan un factor igual a uno en virtud de las condiciones de normalización. En términos de las coordenadas esféricas, coordenadas en las que se expresan las funciones propias, las rectangulares son

$$\begin{aligned} x &= r \operatorname{sen}\theta \cos\phi \\ y &= r \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \tag{13–105}$$

Empleando las coordenadas esféricas, tenemos

$$\begin{aligned} \mu_{x_{n'l'm_l',nlm_l}} &= e\iiint \psi^*_{n'l'm_l'} r \operatorname{sen}\theta \cos\phi \psi_{nlm_l} r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi \\ &= e\int_0^\infty R^*_{n'l'} R_{nl} r^3\, dr \int_0^\pi \Theta^*_{l'm_l'}\Theta_{lm_l} \operatorname{sen}^2\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} \Phi^*_{m_l'}\Phi_{m_l} \cos\phi\, d\phi \end{aligned}$$

Considere la tercera integral

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \Phi^*_{m_l'}\Phi_{m_l} \cos\phi\, d\phi &= \int_0^{2\pi} e^{-im_l'\phi} e^{im_l\phi} \cos\phi\, d\phi \\ &= \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} [e^{-i(m_l'-m_l+1)\phi} + e^{-i(m_l-m_l-1)\phi}]\, d\phi \end{aligned}$$

El lector podrá mostrar que esta integral es igual a cero a menos que

$$m_l' - m_l = \pm 1 \tag{13–106}$$

Si esta integral no es igual a cero tampoco lo será $\mu_{x_{n'l'm_l',nlm_l}}$. Igual regla de selección se obtiene al calcular $\mu_{y_{n'l'm_l',nlm_l}}$. Para $\mu_{z_{n'l'm_l',nlm_l}}$ se tiene

$$\mu_{z_{n'l'm_l',nlm_l}} = e\int_0^\infty R^*_{n'l'} R_{nl} r^3\, dr \int_0^\pi \Theta^*_{l'm_l'}\Theta_{lm_l} \operatorname{sen}\theta \cos\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} \Phi^*_{m_l'}\Phi_{m_l}\, d\phi$$

www.FreeLibros.me

Puesto que las Φ_{m_l} son ortogonales, la tercera integral será igual a cero a menos que

$$m_l' - m_l = 0 \tag{13–107}$$

La rapidez de transición $S_{n'l'm_l',nlm_l}$ será diferente de cero sólo si se satisface (13–106) o (13–107). La regla de selección completa para m_l es

$$m_l' - m_l = \Delta m_l = 0, \pm 1 \tag{13–108}$$

lo que concuerda con la segunda de las ecuaciones (13–57), que es válida para uno o varios electrones ópticamente activos. Las líneas espectrales correspondientes a las transiciones que satisfacen la relación (13–107) están polarizadas linealmente en la dirección z; aquellas que satisfacen la relación (13–106) tienen componentes linealmente polarizadas tanto en la dirección x como en la y, que se combinan para producir una radiación circularmente polarizada. Estas predicciones se comprueban experimentalmente al medir la polarización de la radiación emitida en el efecto Paschen y Bach para diferentes valores de Δm_l.

Pueden obtenerse las reglas de selección para l calculando las integrales sobre $d\theta$. Es un cálculo bastante tedioso y pueden obtenerse algunos de los resultados en una forma simple a partir de consideraciones de las paridades de las funciones propias. En la sección 4 del capítulo 8 definimos la *paridad* de una función que depende de una sola coordenada. La paridad describe el comportamiento de la función propia cuando se cambia el signo de la coordenada. Esto es, funciones propias que satisfacen la ecuación

$$\psi(-x, -y, -z) = +\psi(x, y, z) \tag{13–109}$$

tienen *paridad par;* las que satisfacen la ecuación

$$\psi(-x, -y, -z) = -\psi(x, y, z) \tag{13–110}$$

tienen *paridad non.* No es difícil mostrar que la mayoría de las funciones propias que son soluciones a la ecuación de Schrödinger con potencial cuyo valor no varía al cambiar el signo de las coordenadas tendrán una *paridad definida*, esto es, tendrán paridad par o paridad non.*

* Escriba la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo como

$$e_{op}(x, y, z)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

y cambie el signo de las coordenadas

$$e_{op}(-x, -y, -z)\psi(-x, -y, -z) = E\psi(-x, -y, -z)$$

Ya que e_{op} contiene solamente $V(x, y, z)$ y términos tales como $\partial^2/\partial x^2$, $e_{op}(-x, -y, -z) = e_{op}(x, y, z)$ si $V(-x, -y, -z) = V(x, y, z)$. Entonces

$$e_{op}(x, y, z)\psi(-x, -y, -z) = E\psi(-x, -y, -z)$$

Ya que $\psi(-x, -y, -z)$ y $\psi(x, y, z)$ satisfacen la misma ecuación diferencial, debe tenerse

$$\psi(-x, -y, -z) = K\psi(x, y, z)$$

www.FreeLibros.me

Es conveniente expresar las ecuaciones (13–109) y (13–110) en coordenadas esféricas. Al considerar los diagramas de la figura 13–16 observamos que cuando se cambia el signo de las coordenadas rectangulares el comportamiento de las coordenadas esféricas es el siguiente:

$$r \to r, \quad \theta \to \pi - \theta, \quad \phi \to \pi + \phi \tag{13–111}$$

Inspeccionando las funciones propias del átomo de hidrógeno (10–39) se observa que

$$\Phi_{m_l}(\pi + \phi) = (-1)^{|m_l|}\Phi_{m_l}(\phi)$$

y

$$\Theta_{lm_l}(\pi - \theta) = (-1)^{l+|m_l|}\Theta_{lm_l}(\theta)$$

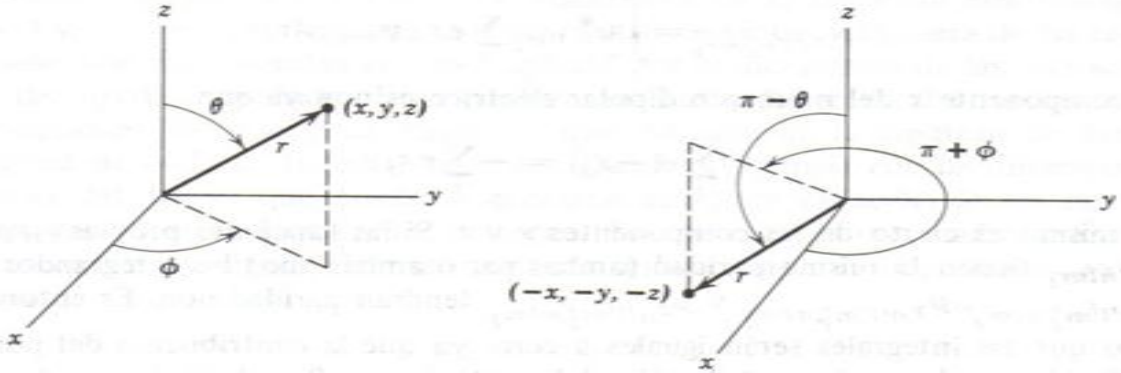

Figura 13-16. Ilustración de la operación de paridad.

---

donde K es una constante. Cambie el signo de las coordenadas en esta ecuación:

$$\psi(x, y, z) = K\psi(-x, -y, -z)$$

Multiplicando esta ecuación por la anterior, se obtiene

$$K^2 = 1$$

o sea

$$K = \pm 1$$

de manera que

$$\psi(-x, -y, -z) = \pm\psi(x, y, z); \qquad \text{Q.E.D.}$$

Esta prueba no se aplica cuando dos o más funciones propias linealmente independientes satisfacen la ecuación diferencial con el mismo valor de E, esto es, cuando existe degeneración. Pero aun en este caso las funciones propias tendrán paridades definidas si se eligen apropiadamente las combinaciones lineales. Las ψ_{nlm_l} son ejemplos de funciones propias degeneradas que tienen paridad definida, como se muestra en la ecuación (13–112). La onda viajera (15–64) es un ejemplo de función degenerada que no tiene paridad definida.

www.FreeLibros.me

De este modo

$$R_{nl}(r)\,\Theta_{lm_l}(\pi-\theta)\Phi_{m_l}(\pi+\phi) = (-1)^{l+|m_l|}(-1)^{|m_l|}R_{nl}(r)\,\Theta_{lm_l}(\theta)\,\Phi_{m_l}(\phi)$$

o sea

$$\psi_{nlm_l}(r, \pi-\theta, \pi+\phi) = (-1)^l\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) \qquad (13\text{–}112)$$

Esto es cierto para todas las funciones propias del átomo de hidrógeno. Efectivamente, ya que la transformación (13–111) no afecta a la coordenada r, la ecuación (13–112) es válida para todas las funciones propias de un potencial con simetría esférica, ya que todas ellas pueden escribirse en la forma $R_{nl}(r)\,\Theta_{lm_l}(\theta)\,\Phi_{m_l}(\phi)$ donde $\Theta_{lm_l}(\theta)$ y $\Phi_{m_l}(\phi)$ son idénticas a las del átomo de hidrógeno. Entonces, *la paridad de todas las funciones de potenciales con simetría esférica es* $(-1)^l$; *o sea, par si l es par y non si l es non.*

Consideremos ahora el elemento de matriz de la componente x del momento dipolar eléctrico,

$$\mu_{x_{n'l'm'_l,nlm_l}} = \int \psi^*_{n'l'm'_l} \sum_j ex_j\,\psi_{nlm_l}\,d\tau$$

La componente x del momento dipolar eléctrico es non ya que

$$\sum_j e(-x_j) = -\sum_j ex_j$$

Lo mismo es cierto de las componentes y y z. Si las funciones propias $\psi_{n'l'm'_l}$ y ψ_{nlm_l} tienen la misma paridad (ambas par o ambas non) los integrandos de $\mu_{x_{n'l'm'_l,nlm_l}}$, $\mu_{y_{n'l'm'_l,nlm_l}}$ y $\mu_{z_{n'l'm'_l,nlm_l}}$ tendrán paridad non. Es entonces claro que las integrales serán iguales a cero, ya que la contribución del punto (r, θ, ϕ) cancelará a la contribución del punto $(r, \pi-\theta, \pi+\phi)$. La rapidez de transición será igual a cero. En consecuencia, se tendrá una regla de selección para la paridad relativa de las funciones propias inicial y final en una transición de dipolo eléctrico:

La paridad debe cambiar. (13–113)

La ecuación (13–112) permite expresar lo anterior en términos del cambio en el número cuántico l:

$$\Delta l = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \ldots \qquad (13\text{–}113')$$

Esta es sólo una parte de la regla de selección (13–31). El resto se puede justificar considerando (13–108), que es $\Delta m_l = 0, \pm 1$, regla de selección que permite entender por qué están prohibidas transiciones en las que $\Delta l = \pm 3, \pm 5, \ldots$ ya que en algunas $\Delta m_l > 1$. Como se ha mencionado, también puede obtenerse la regla de selección (13–31) evaluando los elementos de matriz.

Para calcular las reglas de selección para el número cuántico j es preciso conocer la forma exacta de las funciones propias adecuadas a la interacción spin-órbita. Podemos asegurar al lector qué cálculos con estas funciones propias verifican la regla de selección (13–30). Lo mismo es cierto de las reglas de selección (13–45) para los números cuánticos de un átomo con varios electrones ópticamente activos que sea un ejemplo de acoplamiento LS.

www.FreeLibros.me

Una de ellas, $\Delta s' = 0$, tiene una interpretación tan simple que debemos mencionarla. La regla de selección establece que el acoplamiento de los vectores de impulso angular de spin no pueden cambiar en la transición. La razón es simplemente que la interacción entre la radiación electromagnética y los spines se efectúa a través de la interacción entre el campo magnético y los momentos magnéticos. Estas interacciones son tan débiles que normalmente no afecta a los spines.

Sin embargo, en algunas circunstancias pueden observarse algunas líneas espectrales débiles que violan la regla de selección (vea la discusión al final de la sección 8). Entonces, esta regla de selección no prohíbe absolutamente transiciones que la violan, sino que sólo las hace sumamente improbables. Si la transición no se puede efectuar por el mecanismo normal de la interacción que comprende los momentos dipolares eléctricos y los campos eléctricos, a través de una interacción de *dipolo eléctrico*, existe sólo una probabilidad muy pequeña de que pueda efectuarse a través de una interacción entre momentos dipolares magnéticos y los campos magnéticos de la radiación electromagnética. Esto es, es muy pequeña la probabilidad de violar cualquiera de las reglas de selección mencionadas en este capítulo por el mecanismo de las interacciones de *dipolo magnético*. Esto también se puede llevar a cabo mediante las interacciones de *cuadripolo eléctrico*, que no cumplen la hipótesis de que la longitud de onda de la radiación es tan grande comparada con las dimensiones lineales del átomo que puede despreciarse cualquier variación de los campos eléctricos sobre el átomo. Sin embargo, las transiciones efectuadas mediante interacciones de dipolo eléctrico son, con mucho, las más importantes en los átomos.

13. Vida media y anchura de la línea

Considere un sistema de átomos de los cuales, al tiempo $t = 0$, $N(0)$ se encuentran en el estado de energía E_l. Calculemos el número $N(t)$ de los que permanecen en ese estado al tiempo t, suponiendo que se conoce la rapidez de transición para la transición espontánea S_{kl}, para toda k tal que $E_k < E_l$, y que son mucho mayores que cualquier rapidez de transición para la emisión inducida R_{kl}, puesto que es sumamente pequeña la densidad promedio $\bar{\rho}$ de la radiación electromagnética. La probabilidad por segundo de que uno de los átomos en el estado de energía E_l efectúe una transición a otro de energía E_k es igual a la suma de S_{kl} para toda k tal que $E_k < E_l$. Sea λ esta probabilidad:

$$\lambda = \sum_k S_{kl} \tag{13-114}$$

En el intervalo de tiempo de t a $t + dt$, el número total promedio de estas transiciones será igual a

$$N(t)\lambda\, dt$$

www.FreeLibros.me

ya que al iniciarse el intervalo hay $N(t)$ átomos en el estado inicial y cada uno tiene la probabilidad $\lambda\, dt$ de efectuar transición en el tiempo dt. Esta cantidad es igual al decremento de $N(t)$ durante ese intervalo. Así

$$dN(t) = -N(t)\lambda\, dt$$

o sea

$$\frac{dN(t)}{N(t)} = -\lambda\, dt \tag{13–115}$$

Integrando desde $t = 0$ hasta $t = t'$, se tiene

$$\int_0^{t'} \frac{dN(t)}{N(t)} = -\lambda \int_0^{t'} dt$$

o sea

$$\ln\,[N(t') - N(0)] = -\lambda t'$$

o bien

$$\ln \frac{N(t')}{N(0)} = -\lambda t'$$

Así

$$\frac{N(t')}{N(0)} = e^{-\lambda t'}$$

o bien

$$N(t) = N(0)e^{-\lambda t} \tag{13–116}$$

donde se han eliminado las primas para simplificar la notación. El número de átomos que al tiempo t permanecen en el estado inicial decrece exponencialmente en el tiempo y al tiempo $t = 1/\lambda$ el número de ellos se ha reducido por el factor e^{-1}. La *vida media* τ de este estado se define como el tiempo promedio que permanece un átomo en el estado inicial antes de efectuar una transición, o sea,

$$\tau = \frac{\int_0^\infty tN(t)\, dt}{\int_0^\infty N(t)\, dt} = \frac{\int_0^\infty N(0)te^{-\lambda t}\, dt}{\int_0^\infty N(0)e^{-\lambda t}\, dt}$$

Ya que este cociente entre integrales tiene la misma forma que el cociente en (2–19), podemos emplear los resultados de los cálculos que se hicieron a continuación de la ecuación y escribir

$$\tau = 1/\lambda \tag{13–117}$$

o sea

$$\tau = \left[\sum_k S_{kl}\right]^{-1} \tag{13–118}$$

www.FreeLibros.me

Puesto que τ comprende la suma sobre varios S_{kl}, las variaciones en estas cantidades se promedian y proporcionan vidas medias que son del orden de 10^{-9} seg para muchos estados. Sin embargo, el número de excepciones es grande.

Existe una relación muy interesante entre la vida media de un estado excitado de un átomo y la anchura de la línea espectral correspondiente a la transición a partir de ese estado. Las líneas espectrales no son perfectamente nítidas (si lo fueran, no se observarían). Tienen una anchura finita, que puede medirse, bajo circunstancias favorables, empleando un equipo de gran resolución. Generalmente esta anchura se debe al corrimiento Doppler al azar en las frecuencias de los cuantos emitidos, que resulta del movimiento térmico al azar de los átomos en la fuente espectral. Sin embargo, este *ensanchamiento de Doppler* puede reducirse empleando fuentes de baja temperatura, encontrándose que las líneas que se originan en estados de vida media corta aparecen con una anchura que puede medirse. Esta es una manifestación del principio de incertidumbre (6–28), que establece que si la medida de la energía de un sistema se efectúa durante el tiempo Δt debe tener una incertidumbre ΔE tal que

$$\Delta E\,\Delta t \sim \hbar$$

Considere una transición de algún estado excitado al estado base del átomo. Una medida de la frecuencia del cuanto emitido en esta transición proporciona una medida de la energía del átomo en el estado excitado. Además, la medida deberá efectuarse dentro de un lapso comparable con τ, la vida media del estado excitado. Así, el principio de incertidumbre requiere que la energía del cuanto tenga cualquier valor dentro del intervalo

$$\Delta E \sim \hbar/\tau \tag{13–119}$$

y la frecuencia cualquier valor dentro del intervalo

$$\Delta\nu = \frac{\Delta E}{h} \sim \frac{\hbar}{h\tau} = \frac{1}{2\pi\tau} \tag{13–119'}$$

y la línea espectral asociada tendrá la correspondiente anchura. Este es el *ensanchamiento natural* que puede observarse experimentalmente si es baja la presión en la fuente espectral. A presiones elevadas el tiempo entre dos colisiones consecutivas del átomo emisor con otros átomos será menor que la vida media del estado excitado y, ya que no es posible efectuar una medida sin perturbación dentro de un lapso comparable con τ, la anchura de la línea será mayor que su *anchura natural*. A este efecto se le denomina *ensanchamiento por colisión*.

Si la línea espectral es emitida en una transición de algún estado inicial a otro final de una vida media mucho mayor (al estado base, por ejemplo), su anchura natural se debe enteramente a la vida media del estado inicial. En estas circunstancias, la anchura natural de la línea espectral, expresada en unidades de energía, es igual a la anchura del estado inicial. La idea de que un estado tiene una anchura diferente de cero si tiene una vida media finita se

www.FreeLibros.me

introduce directamente en la teoría cuántica mediante el principio de incertidumbre, como lo hemos discutido, y no contradice lo establecido en el capítulo 7 referente a que la energía de un sistema de partículas ligadas sólo puede ser igual a una de un conjunto discreto (esto es, de anchura cero) de energías. Pudimos hacer esta afirmación porque habíamos ignorado en el capítulo 7 la posibilidad de transiciones entre los estados y, en esta aproximación, todos los estados tienen vidas medias infinitas o anchura cero.

Aun en la teoría clásica tiene sentido hablar de una anchura distinta de cero para una vida media finita. Considere cualquier sistema resonante, tal como un circuito eléctrico que contiene inductancia y capacitancia. Si la resistencia del circuito es igual a cero, la teoría de los circuitos eléctricos predice que el circuito tiene una frecuencia de resonancia perfectamente nítida ν_0 y que, al ser excitado por alguna fuente de frecuencia variable, aceptará energía sólo si la frecuencia de la fuente es exactamente igual a ν_0. Pero, por supuesto, todos los circuitos poseen alguna resistencia, lo que implica, de acuerdo con la teoría, que la frecuencia de resonancia no está perfectamente definida y que la potencia P que puede aceptar depende de la frecuencia ν de la fuente de acuerdo con la relación

$$P(\nu) \propto \frac{1}{(\nu - \nu_0)^2 + (\Delta\nu/2)^2} \tag{13–120}$$

La cantidad $P(\nu)$, cuya gráfica se muestra en la figura 13–17, es la curva conocida de resonancia. La anchura $\Delta\nu$ que tiene cuando llega a la mitad del valor máximo es una función sencilla de la resistencia y aumenta con ella. Si el circuito acepta una cierta cantidad de energía de la fuente y se lo desconecta de ella, la energía E del circuito decrecerá en el tiempo porque se disipa en la resistencia. La teoría de los circuitos eléctricos muestra que

$$E(t) = E(0)e^{-t/\tau} \tag{13–121}$$

donde

$$\tau = \frac{1}{2\pi\,\Delta\nu} \tag{13–121'}$$

Todas estas ecuaciones para los circuitos eléctricos han sido verificadas experimentalmente.

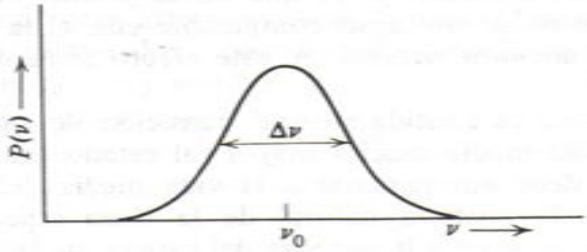

Figura 13-17. Curva de resonancia.

www.FreeLibros.me

Considere ahora un átomo en su estado base, expuesto a una fuente de radiación electromagnética que emite cuantos de todas las frecuencias. El átomo sólo puede absorber un cuanto de energía igual a la de alguno de sus estados excitados pero, ya que estos estados tienen anchuras distintas de cero, es posible que sea absorbido un cuanto en una transición a un estado particular si su energía se encuentra dentro de un intervalo igual a la anchura de ese estado. De hecho, la teoría cuántica muestra que la rapidez de transición R para la absorción que lleve al átomo a un estado particular depende de la energía $h\nu$ del cuanto de acuerdo con la relación

$$R(h\nu) \propto \frac{1}{(h\nu - h\nu_0)^2 + (h\,\Delta\nu/2)^2} \tag{13–122}$$

donde $h\nu_0$ es la energía media de ese estado y $h\,\Delta\nu$ es la anchura cuando llega a la mitad del valor máximo. Además, la teoría muestra que la anchura $h\,\Delta\nu$ está relacionada con la vida media τ del estado por la ecuación

$$\tau = \frac{h}{2\pi h\,\Delta\nu} \tag{13–123}$$

Generalmente se designa por Γ la anchura $h\,\Delta\nu$ del estado y (13–122) se expresa en términos de la energía E del cuanto como

$$R(E) \propto \frac{1}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \tag{13–124}$$

donde E_0 es la energía del estado y Γ su anchura. Así,

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma} \tag{13–125}$$

expresa la relación entre la vida media τ de un estado y su anchura Γ. Ya que la rapidez de transición para la emisión espontánea es proporcional a la rapidez de transición para la absorción, esta última tendrá la dependencia funcional (13–124) respecto a la energía. En consecuencia, la anchura natural de la línea espectral emitida en una transición de un estado inicial de anchura Γ a un estado final de anchura mucho menor será Γ, como se mencionó anteriormente.

Observe que la ecuación (13–125) concuerda con el límite impuesto por la relación de incertidumbre (6–28). También que los resultados (13–122) y (13–123) de la teoría cuántica para absorción en resonancia de cuantos por un estado, que radía posteriormente, son esencialmente idénticos a los resultados (13–120) y (13–121′) de la teoría clásica para la absorción en resonancia de la energía por un sistema que posteriormente disipa. Se ha verificado experimentalmente la forma de la línea espectral predicha por (13–124). Por el contrario, no se puede verificar experimentalmente la ecuación (13–125) midiendo τ y Γ simultáneamente ya que, debido a la pequeña magnitud de $\hbar$, sólo alguno de ellos es susceptible de medida. A pesar de esto, se supone su validez y frecuentemente se emplea para predecir el valor de Γ a partir del valor medido de τ, e inversamente.

www.FreeLibros.me

BIBLIOGRAFIA

Herzberg, G., *Atomic Spectra and Atomic Structure*, Dover Publications, Nueva York, 1944.

Leighton, R. B., *Principles of Modern Physics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1959.

Richtmyer, F. K., E. H. Kennard y T. Lauritsen, *Introduction to Modern Physics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

White, H. E., *An Introduction to Atomic Spectra*, McGraw-Hill Boock Co., Nueva York, 1934.

EJERCICIOS

1. Calcule $V(r)$ y $\rho(r)$ en la teoría de Thomas y Fermi para el átomo de A ($Z = 18$), y compare sus resultados con la figura 13–3.

2. Use la aproximación (13–22), el Z_n para el átomo de A y la ecuación para un electrón (10–44), y estime el radio de las capas $n = 1$, 2 y 3 de este átomo. Compare sus resultados con la figura 13–3.

3. Demuestre que los diagramas vectoriales de la figura 13–11 cumplen las ecuaciones (13–40). Construya también un conjunto semejante de diagramas vectoriales para $l_1 = 2$, $s_1 = \frac{1}{2}$ y $l_2 = 2$, $s_2 = \frac{1}{2}$.

4. Efectúe un cálculo semejante al que condujo a la tabla (13–8) para la configuración np^3 y verifique los resultados alistados en la tabla (13–9) para esa configuración.

5. Considere un átomo que exhibe el acoplamiento LS en una configuración $nd\,n'd$ en la que son normales tanto el orden de los niveles de energía conforme a s', l' y j' como la dependencia de las intensidades relativas de la energía respecto a s' y l'. Dibuje esquemáticamente un diagrama de niveles de energía para esta configuración, empleando la misma escala (exagerada) para la separación de estructura fina de todos los niveles dentro de un multiplete. Use la notación espectroscópica en cada uno de los niveles.

6. Indique los niveles del diagrama del ejercicio 5 que no se presentarían si $n' = n$.

7. Sobre el mismo diagrama de niveles de energía del ejercicio 6, dibuje a la misma escala (sumamente exagerada) el rompimiento debido al efecto Zeeman de cada nivel en sus diferentes componentes bajo la influencia de un campo magnético débil.

8. Cuente el número total de componentes, esto es, el número total de estados cuánticos diferentes en la configuración, obtenidos en el ejercicio 7. Muestre que este número es igual a la degeneración de la configuración antes de aplicar la perturbación, que es igual al producto de los factores de degeneración $2(2l + 1)$ para cada uno de los dos electrones ópticamente activos de la configuración.

9. En un átomo que exhibe el acoplamiento LS, las separaciones relativas entre niveles adyacentes de un multiplete particular son 4:3:2:1. Emplee el procedimiento bosquejado al final de la sección 10 para asignar a estos niveles los números cuánticos s', l' y j'. Haga lo mismo para los multipletes con separaciones relativas 7:5:3 y 9:7:5:3.

10. Verifique la ecuación (13–74).

11. Verifique la ecuación (13–112).

12. Calculando directamente los elementos de matriz del dipolo eléctrico con las funciones propias (10–39), muestre que es válida la regla de selección (13–31) en las transiciones $n = 2 \rightarrow n = 1$ en el átomo de ^{1}H.

13. Calcule algunos de los elementos de matriz de la transición dipolar eléctrica empleando las funciones propias (8–118) para un oscilador armónico simple cargado en una

www.FreeLibros.me

dimensión. Muestre que sus valores concuerdan con la regla de selección $\Delta n = \pm 1$. Compare estos resultados con la discusión de la sección 8 del capítulo 5.

14. Considere un gas de moléculas de H_2 a temperatura y presión ambientes, donde los átomos de H efectúan transiciones espontáneas del primer estado excitado al estado base. Tome en cuenta que la rapidez de transición para la emisión espontánea es del $\sim 10^8$ seg^{-1} para estimar el ensanchamiento natural de la línea espectral resultante. Use la expresión de la teoría cinética elemental que relaciona la distancia promedio entre colisiones con la densidad del gas y la sección geométrica de las moléculas, la ley del gas perfecto y la ley de la equipartición de la energía para estimar el ensanchamiento por colisión. Mediante la ley de la equipartición de la energía y la ecuación clásica del corrimiento Doppler estime el ensanchamiento Doppler.

www.FreeLibros.me

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 14

Los rayos X

1. El descubrimiento de los rayos X

Salvo la breve descripción del efecto Compton y algunas otras observaciones, hemos pospuesto el estudio de los rayos X hasta este capítulo, debido a que es muy conveniente analizar los espectros de rayos X después de los ópticos. Aunque esta secuencia puede haberle dado al lector una impresión equivocada del impacto histórico de los rayos X, ésta se corregirá en cuanto describamos su importancia en el desarrollo de la física moderna.

Röntgen descubrió los rayos X en 1895, mientras estudiaba el fenómeno de la descarga en gases. Cuando utilizaba un tubo de rayos catódicos (vea el capítulo 3) con una alta tensión de varias decenas de kilovolts observó que las sales de bario fluorescían cuando las aproximaba al tubo, aunque no se percibía ninguna emisión visible de éste. Este efecto persistió cuando envolvió el tubo con una cubierta de cartón negro. Röntgen determinó en muy poco tiempo que la causa de esta fluorescencia se originaba en el punto en el que la corriente de electrones energéticos chocaba con la pared de vidrio del tubo y, puesto que desconocía su naturaleza, le dio el nombre de *rayos X*. Röntgen encontró que los rayos X podían manifestarse obscureciendo placas fotográficas envueltas, descargando electroscopios y produciendo fluorescencia en diferentes substancias. Encontró también que los rayos X pueden penetrar en materiales de número atómico bajo de espesores considerables, mientras que las substancias de número atómico alto son relativamente opacas.* Röntgen efectuó los primeros pasos para identificar la naturaleza de los rayos X, usando un sistema de rendijas para demostrar que 1) *se desplazan en línea recta* y que 2) *no tienen carga,* ya que no son desviados por campos eléctricos o magnéticos.

El descubrimiento de los rayos X despertó el interés de todos los físicos y muchos de ellos se unieron para investigar sus propiedades. En 1899, Haga y Wind efectuaron un experimento de difracción con una sola rendija con los rayos X, que demostró que 3) *los rayos X son un fenómeno ondulatorio* y, de acuerdo con el tamaño del patrón de difracción, su longitud de onda se

* Esta propiedad es la base de la técnica de fotografía de rayos X de huesos, en tejidos vivos, una técnica que usaban ya los cirujanos pocos meses después del descubrimiento de Roentgen.

www.FreeLibros.me

calculó en $\lambda \sim 10^{-8}$ cm. En 1906, Barkla comprobó que 4) *las ondas son transversales,* al demostrar que se pueden polarizar al dispersarlas en diversos materiales.

Por supuesto, en la actualidad ya no existe nada desconocido respecto a la naturaleza de los rayos X. Se trata de radiaciones electromagnéticas que tienen exactamente la misma naturaleza que la luz visible, salvo que su longitud de onda es varios órdenes de magnitud más pequeña. Se llegó a esta conclusión después de comparar las propiedades 1 a 4 con propiedades similares de la luz visible; pero fue Thomson quien realmente la estableció varios años antes de que se conocieran todas estas propiedades. Thomson defendía la idea de que los rayos X son una radiación electromagnética, ya que podía esperarse que este tipo de radiación se emitiera desde el punto en el que los electrones chocan con la pared del tubo de rayos catódicos. Ahí, los electrones se aceleran muy rápido al detenerse totalmente y, de acuerdo con la teoría electromagnética clásica, todas las partículas cargadas aceleradas emiten radiaciones electromagnéticas. Más tarde veremos que esta explicación de la producción de los rayos X es, parcialmente correcta.

Los rayos X, al igual que otras radiaciones electromagnéticas, manifiestan aspectos característicos de las partículas y otros que son típicamente ondulatorios. El lector recordará que el efecto Compton (vea el capítulo 3), que es una de las demostraciones más convincentes de la existencia de los cuantos, se observó originalmente con la radiación electromagnética en la región de longitudes de onda de los rayos X.

2. Medida del espectro de rayos X

El problema de medir el espectro de longitudes de onda de la radiación emitida desde un tubo de rayos X pareció algo sumamente difícil de hacer en un principio. Roentgen había demostrado que el índice de refracción de todas las substancias para los rayos X es muy cercano a la unidad. En consecuencia, un espectrómetro de prisma no es un instrumento apropiado para los rayos X. Una alternativa consiste en usar una rejilla de difracción. No obstante, la longitud de onda de los rayos X es tan pequeña en comparación con el espaciamiento de las líneas de las mejores rejillas que se pueden producir, que estos dispositivos parecen ser también inútiles. El problema quedó resuelto en 1912, cuando von Laue sugirió que se usara un cristal como rejilla de difracción para los rayos X, porque los átomos de un cristal están acomodados en una red regular, con una separación de los planos de red que es muy semejante a las longitudes de onda de los rayos X. Friedrich y Knipping fueron los primeros en poner en práctica esta sugerencia y Bragg fue quien perfeccionó la técnica.

Veamos, por ejemplo, un cristal de NaCl. Las características macroscópicas de este cristal sugieren claramente que, en una escala microscópica, los átomos están acomodados en una red cúbica regular. En la figura 14–1 se muestra una sección bidimensional de esta red, y en ella se intenta indicar también la distribución de densidad de los electrones dentro de cada átomo. De acuerdo con lo que vimos en el estudio de los átomos con varios electrones, sabemos

www.FreeLibros.me

que existe una región con una densidad electrónica muy alta cerca del centro del átomo, y que los electrones de esta región están muy firmemente enlazados a él. Consideremos un haz de rayos X que incide sobre el cristal. Al penetrar en el cristal una parte lo atraviesa completamente y otra se dispersa entre los átomos del cristal. Existen varios mecanismos que producen esta dispersión, que se estudiarán más tarde. Por el momento sólo nos interesa aquél mediante el cual los rayos X se dispersan sin cambiar su longitud de onda ni su fase, a causa de los electrones firmemente enlazados cercanos al núcleo del átomo. Cada átomo dispersa rayos X mediante este mecanismo en todos los ángulos, aunque la mayor intensidad de la dispersión es en la dirección del haz incidente.

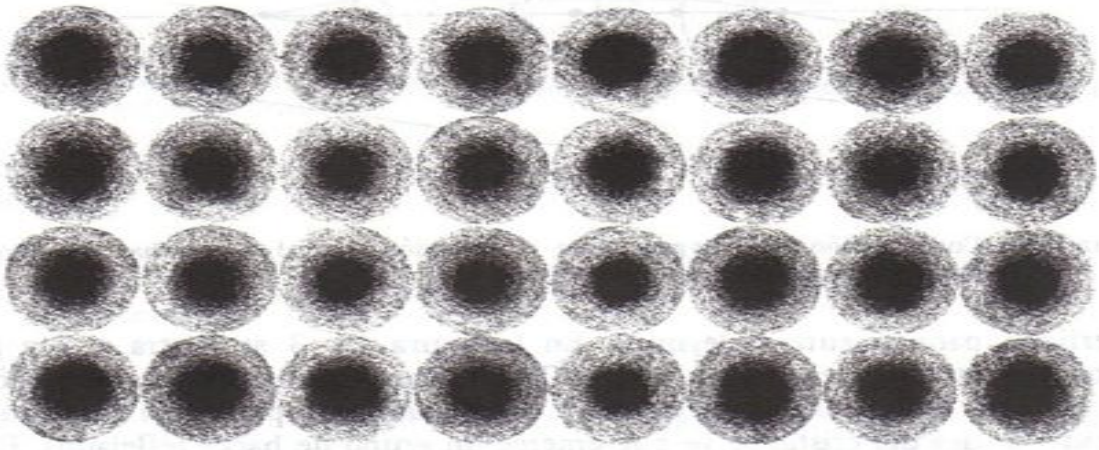

Figura 14-1. Sección bidimensional de un cristal de cloruro de sodio.

En la región exterior a cualquier átomo, el patrón de intensidad de los rayos X que dispersa es tal que parece como si toda la dispersión sucediera en su centro. Por esta razón, se puede analizar la dispersión hecha por el cristal en función de un cristal modelo, que consta de un grupo de centros de dispersión con las mismas ubicaciones relativas que los centros de los átomos del cristal real. En consecuencia, estos centros de dispersión están ubicados sobre los planos de la red uniformemente espaciados.

Imagine que un haz de rayos X monocromático incide sobre el cristal modelo con un ángulo θ medido desde su superficie. Parte del haz es dispersado por los centros de dispersión de *cada* plano de la red. Veamos ahora *uno* de estos planos. En el lenguaje ondulatorio, el haz incidente de rayos X se puede describir como una sucesión de frentes de onda (superficies de fase constante) que se mueven sobre los centros de dispersión del plano de la red. Cada vez que un frente de onda atraviesa un centro de dispersión, éste reemite una onda esférica sin ningún cambio de fase, que se mueve en todas las direcciones. En la figura 14–2 se muestran varios frentes de onda incidentes y un grupo de ondas reemitidas. De acuerdo con la construcción de Huygens, es evidente que las ondas reemitidas se combinan para producir un

www.FreeLibros.me

grupo de frentes de onda reflejados, varios de ellos se muestran en la figura. Estos frentes de onda constituyen un haz reflejado por el plano de la red. Como se puede ver en la figura, el ángulo de reflexión es igual al de incidencia.

Este resultado nos permite trabajar con un cristal modelo más simple, compuesto de un grupo de planos de la red que podemos suponer como

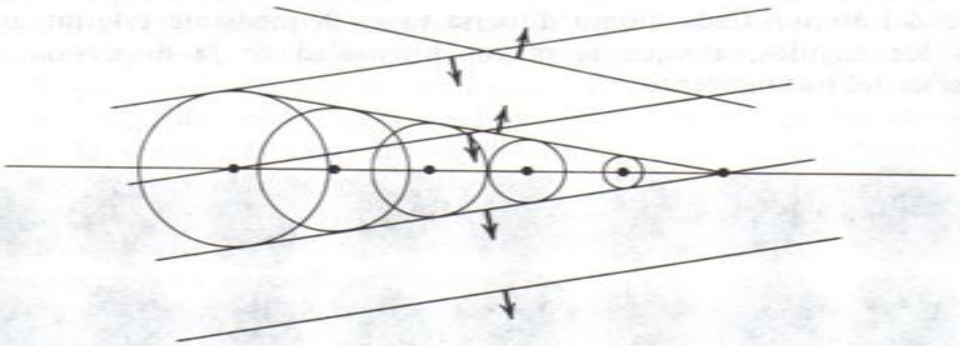

Figura 14-2. Construcción de Huygens para la reflexión parcial de un haz de rayos X, desde un plano de red de un cristal.

superficies parcialmente reflejantes. En la figura 14–3 se ilustra el haz incidente que atraviesa el cristal y es reflejado parcialmente por cada plano de red. En esta figura, el haz incidente y el reflejado se representan como rayos, y desde la cara del cristal se ve que emerge un grupo de haces reflejados. Estos haces interfieren entre sí destructivamente, a menos que cada haz esté en fase con todos los demás. Para una separación dada de los planos de la red, d, esta condición se satisface sólo para ciertos valores del ángulo de incidencia y reflexión θ. Para determinar estos ángulos, consideremos un par típico de haces reflejados, r y $r + 1$. Puesto que no hay un cambio de fase en la reflexión, estos haces estarán en fase si la diferencia entre la longitud de la trayectoria de la radiación que sigue el haz $r + 1$ y la que sigue el haz r, es igual a un número entero de longitudes de onda. Esto es, que estarán en fase si

$$\delta + \varepsilon = n\lambda, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Puesto que,

$$d/\delta = \operatorname{sen} \theta$$

y

$$\varepsilon/\delta = \cos \phi = \cos (180° - 2\theta)$$

esta condición se puede expresar como sigue:

$$\frac{d}{\operatorname{sen} \theta} + \frac{d}{\operatorname{sen} \theta} \cos (180° - 2\theta) = n\lambda$$

www.FreeLibros.me

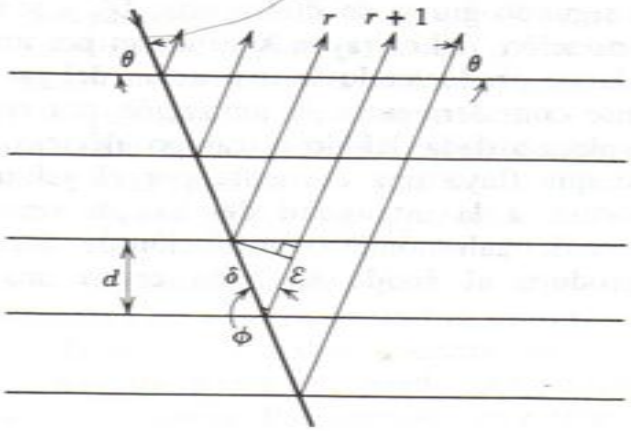

Figura 14-3. Ilustración de la reflexión parcial de un haz de rayos X, de cada plano de la red de un cristal.

Esto es,

$$\frac{d}{\operatorname{sen}\theta}(1 - \cos 2\theta) = \frac{d}{\operatorname{sen}\theta}(1 - 1 + 2\operatorname{sen}^2\theta) = n\lambda$$

o bien,

$$2d \operatorname{sen}\theta = n\lambda, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{14–1}$$

Esta condición se conoce con el nombre de *ley de Bragg*. Para un haz incidente de rayos X de longitud de onda λ, se encontrará un haz reflejado sólo si θ es una de las soluciones a esta condición. La solución que corresponde a $n = 1$, da la *reflexión de primer orden;* $n = 2$ da la *reflexión de segundo orden,* etc. La intensidad del haz que corresponde a la reflexión de primer orden es mayor que la de segundo orden, ésta es mayor que la de tercer orden y así sucesivamente, porque la intensidad de la radiación que dispersan los átomos disminuye a medida que aumenta el ángulo de dispersión, esto es, para valores cada vez mayores de n. Por esta razón se hace necesario, a menudo, usar la reflexión de primer orden, aunque los órdenes superiores dan una mejor resolución espectral.

En la figura 14–4 se muestra un tubo de rayos X y un espectrómetro de cristal. De acuerdo con el diseño de Coolidge (1913), los tubos modernos de rayos X funcionan a altos vacíos y el haz electrónico se produce en el filamento calentado, *F*. Se aplica un alto voltaje entre el filamento y el ánodo para acelerar los electrones hacia el ánodo *A*, el cual comúnmente debe enfriarse con agua. Para obtener un máximo rendimiento de los rayos X, se usa un material pesado para el ánodo, por ejemplo el tungsteno; sin embargo, se puede usar casi cualquier substancia sólida. Los rayos X emitidos por el ánodo se coliman en un haz por medio de los diafragmas de plomo, *D*, y se reflejan mediante el cristal, *C*. Para un ángulo θ dado se reflejarán sólo las longitudes de onda para las que se satisfaga la ley de Bragg. El haz reflejado se

www.FreeLibros.me

colima mediante un segundo grupo de diafragmas, D', y se detecta por medio de una cámara de ionización, I. Los rayos X penetran por una ventana delgada y pasan entre dos placas, produciendo la ionización del gas contenido en esta región (posteriormente consideraremos la ionización por rayos X). Los iones son atraídos por la placa aislada debido al campo eléctrico producido por la batería, B, haciendo que fluya una corriente por el galvanómetro, G, cuya potencia es proporcional a la intensidad del haz de rayos X reflejado. Al determinar la corriente del galvanómetro en función del ángulo θ,* el espectro de rayos X que produce el ánodo se mide como una función de este

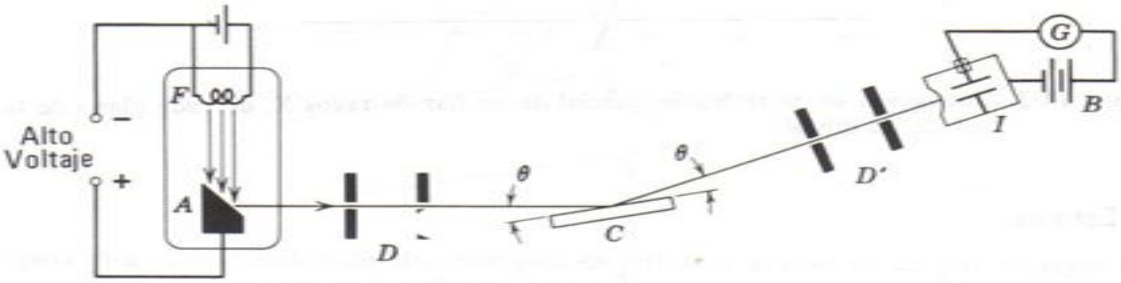

Figura 14-4. Aparato que se usa para medir los espectros de rayos X.

parámetro. Si se conoce el espaciamiento d de la red, éste puede convertirse en un espectro en función de la longitud de onda, utilizando la ley de Bragg (14–1), ya que es fácil identificar el orden de la reflexión.

Se puede obtener el espaciamiento de red, d, correspondiente a un cristal cúbico simple como el NaCl, utilizando los conocimientos que se tienen del número de Avogadro N, la densidad ρ del cristal y su peso molecular. Si W es el peso molecular del NaCl, entonces, N moléculas pesan W gramos, que ocuparán un volumen W/ρ cm^3 y en ese volumen se tendrán $2N$ átomos. Para el NaCl, estos átomos están localizados en los vértices de un cubo de arista d. De donde,

$$\frac{W}{\rho}\frac{1}{2N} = d^3$$

Si substituimos los valores conocidos de N, W y ρ, obtenemos:

$$d = 2.820 \times 10^{-8} \text{ cm para el NaCl}$$

Este valor se ha verificado empleando la ley de Bragg para determinar d en función de las longitudes de onda conocidas de ciertos rayos X. Estas longitudes de onda se obtuvieron realmente de las medidas que emplean una rejilla de difracción graduada con un espaciamiento de líneas que puede medirse en

* Es necesario hacer una rotación tanto de la cámara de ionización como del cristal, para mantenerlos a ambos en ángulos iguales a θ.

www.FreeLibros.me

forma directa. Aunque el espaciamiento de líneas de cualquier rejilla graduada es muy grande en comparación con las longitudes de onda de los rayos X, con todo, se pueden emplear las rejillas graduadas si los rayos X inciden a un ángulo rasante, porque, en estas circunstancias, el espaciamiento efectivo de las líneas (es decir, el proyectado) es muy pequeño. Esta técnica es muy difícil y no es muy apropiada para las medidas rutinarias de los espectros de rayos X; sin embargo, es valiosa para fines de calibración y constituye la base de una de las determinaciones experimentales más precisas del valor del número de Avogadro.

Los rayos X son sumamente útiles para estudiar las propiedades de los cristales. Si se bombardea un cristal con un haz de rayos X, cuya composición de longitudes de onda se conoce, y se determinan los ángulos a los que se registran las reflexiones de Bragg, se puede determinar la estructura y las dimensiones de la red cristalina. Por ejemplo, este tipo de medidas confirma nuestra suposición de que los átomos de NaCl están ubicados en una red cúbica regular. No obstante, no describiremos los resultados de estos experimentos, porque nos interesa más describir los resultados de los experimentos recíprocos en los que se mide la composición de longitudes de onda de un haz de rayos X, empleando un espectrómetro con un cristal de propiedades conocidas. En la figura 14–5 se indican algunos resultados típicos que representan el contenido de energía por unidad del intervalo de longitud de onda emitida por un tubo de rayos X, con un ánodo de ^{74}W. Se muestra el espectro de la longitud de onda para dos valores diferentes del voltaje de aceleración V, es decir, para dos valores distintos de energía cinética $E = eV$ de los electrones incidentes al ánodo. Parece ser que el espectro observado puede descomponerse en un conjunto de líneas nítidas superpuestas sobre un

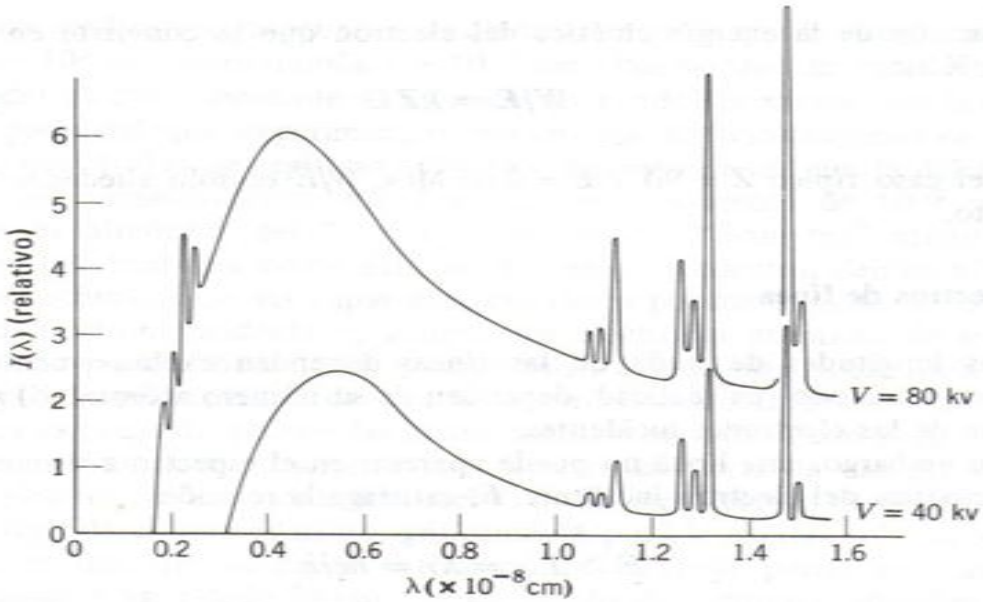

Figura 14-5. Espectros típicos de los rayos X.

www.FreeLibros.me

continuo. Esta descomposición es conveniente porque las medidas que utilizan una variedad de materiales anódicos y voltajes de aceleración, demuestran que las propiedades de los espectros del continuo son bastante diferentes de las del espectro lineal. A continuación se describen algunas de estas propiedades.

(I) Espectro continuo

1. La forma del espectro continuo depende sólo de la energía de los electrones incidentes al ánodo y no de su naturaleza.

2. En particular, el punto de corte de la longitud de onda corta λ_0 es inversamente proporcional a la energía cinética del electrón incidente E. La frecuencia de corte $\nu_0 = c/\lambda_0$ sigue la ley empírica:

$$h\nu_0 = E \tag{14–2}$$

en donde h concuerda bastante bien desde el punto de vista numérico con el valor de la constante de Planck obtenida del efecto fotoeléctrico, etc.

3. La energía total de los rayos X por cada electrón incidente, W, que es proporcional a la integral sobre λ de la parte del continuo del espectro, obedece la ecuación empírica

$$W = kZE^2 \tag{14–3}$$

en donde

$$k \sim 0.7 \times 10^{-4} \quad \text{para } W \text{ y } E \text{ en Mev}$$

y

$$Z \text{ es el número atómico del material del ánodo}$$

La fracción de la energía cinética del electrón que se convierte en energía de rayos X es:

$$W/E = kZE \tag{14–3'}$$

Para el caso típico $Z = 90$ y $E = 0.05$ Mev, W/E es sólo alrededor del 0.3 por ciento.

(II) Espectros de línea

1. Las longitudes de onda de las líneas dependen exclusivamente de la naturaleza del ánodo (en realidad, dependen de su número atómico Z) y no de la energía de los electrones incidentes.

2. Sin embargo, una línea no puede aparecer en el espectro a menos que la energía cinética del electrón incidente, E, satisfaga la relación

$$E \geqslant E_T = h\nu = hc/\lambda \tag{14–4}$$

en donde ν es la frecuencia y λ la longitud de onda de la línea.

www.FreeLibros.me

3. La energía total de rayos X emitida en una línea en particular, aumenta al incrementarse la energía cinética del electrón incidente de acuerdo con la ecuación empírica

$$I \propto (E - E_T)^n \tag{14-5}$$

en donde

$$n \sim 1.5$$

Los orígenes de los espectros continuo y el de líneas son tan diferentes como sus propiedades. Por esta razón, es conveniente estudiarlos por separado.

3. Espectros de línea de rayos X

El origen de los espectros de línea de rayos X se puede comprender al analizar uno de los procesos por los que un electrón energético es obligado a reducir su velocidad al pasar al ánodo de un tubo de rayos X. Este proceso es la transferencia de energía del electrón incidente a los átomos del ánodo, por medio de las colisiones por interacción de Coulomb, entre el electrón incidente y los electrones de los átomos.

Un electrón energético que incide sobre un átomo puede transferir una fracción apreciable de su energía cinética a un electrón atómico sólo cuando el choque es lo suficientemente frontal. Esta afirmación puede justificarse y hacerla cuantitativa, analizando la energía potencial de interacción de Coulomb entre dos electrones:

$$V(r) = e^2/r$$

Al evaluar mediante esta ecuación la distancia r en la que la energía potencial es $V(r) \sim 10^2$ ev, encontramos $r \sim 10^{-9}$ cm. Puesto que la transferencia de energía del electrón incidente al atómico no puede ser mayor que la máxima energía potencial que experimentan, vemos que las transferencias de energía mayores que 100 ev se registran sólo en colisiones en las que la distancia de máximo acercamiento entre los dos electrones es menor de 10^{-9} cm. Esta distancia es alrededor del 10 por ciento de un "diámetro" atómico. Las colisiones tan frontales como ésta no son muy frecuentes, debido a que los electrones atómicos de las capas más exteriores pueden alejarse de la trayectoria del electrón incidente y, aunque los electrones atómicos de las capas interiores no pueden hacer esto, ya que están firmemente enlazados al centro del átomo, la probabilidad de que el electrón incidente se acerque a estos electrones es pequeña, porque las capas internas son igualmente pequeñas. Casi todas las colisiones se relacionan con una transferencia de energía de unos cuantos electrón volts o, cuando mucho, de algunas decenas de electrón volts. En este tipo de colisiones es energéticamente posible excitar sólo un electrón atómico de una de las capas exteriores. El electrón puede excitarse para hacerlo pasar a un estado ligado o a un estado de continuo, abandonando el átomo ionizado. En ambos casos, este electrón, o cualquier otro, regresará eventualmente atravesando los diversos estados excitados hasta llegar al estado

www.FreeLibros.me

base y el átomo emitirá líneas de su espectro óptico. En una colisión en la que sólo se transfiere una pequeña cantidad de energía no se dispone de la energía suficiente para excitar un electrón atómico de una capa interna. Estos electrones se encuentran en niveles energéticos sumamente negativos* y, si hay que excitarlos, deberá hacerse hasta uno de los niveles energéticos ligados ligeramente negativos o bien, a uno de los niveles energéticos positivos del continuo, porque todos los niveles energéticos que intervienen están totalmente ocupados (vea la sección 5 del capítulo 13).

Sin embargo, hay colisiones ocasionales en las que la transferencia de energía es una fracción importante de la energía total del electrón incidente. Siempre que esta energía sea suficientemente grande (vea la ecuación 14–4), se puede excitar un electrón atómico de una capa interna desde su nivel energético altamente negativo, hasta uno menos negativo o bien, a niveles energéticos positivos. Esto deja al átomo en un estado extremadamente excitado. El átomo volverá eventualmente a su estado base y en este proceso emite un conjunto de cuantos de energía sumamente alta, que forman parte de su espectro lineal de rayos X. Por ejemplo, supongamos que un electrón se desprende inicialmente de la capa $n = 1$. En el primer paso del proceso de desexcitación, un electrón de una de las capas de n mayor baja al hueco de la capa $n = 1$; por ejemplo, un electrón de la capa $n = 2$ puede pasar a ocupar ese hueco. Esto dejaría un hueco en la capa $n = 2$; pero la energía de excitación del átomo se habría reducido considerablemente, puesto que un electrón de la capa $n = 2$ está sujeto con menos firmeza que uno de la capa $n = 1$. La energía se conserva al emitirse un cuanto que tiene una energía igual a la disminución de la energía de excitación del átomo. En el siguiente paso del proceso de desexcitación, un electrón de una capa de $n > 2$ desciende al hueco de la capa $n = 2$, produciendo un hueco en la capa de la que ha salido y se emite entonces un cuanto de la energía apropiada. Observe que el efecto neto de cada uno de estos pasos es que un hueco salta a una capa de n superior. Estos pasos continúan hasta que el hueco llega a la capa más externa en donde se llena con el electrón que se expulsó inicialmente de la capa $n = 1$ o con cualquier otro.

Los niveles de energía de un átomo que participan en la emisión de su espectro de rayos X pueden representarse convenientemente en función de un diagrama de niveles de energía. En la figura 14–6 se muestra un diagrama del átomo de ^{92}U, en el que se indican todos sus niveles energéticos de rayos X hasta $n = 4$. En él, la energía del átomo en su estado base se define como cero. En una escala logarítmica cada nivel da la energía del átomo cuando falta un electrón de los números cuánticos indicados, n, l, j.** Entonces

* Por ejemplo, la energía de un electrón en la capa más interna de ^{74}W es -7×10^4 ev.

** Observe que los números cuánticos n, l, j que especifican completamente la energía de un átomo con un electrón en una de las subcapas, especifica también en forma total la energía de un átomo con un hueco en la subcapa. Puesto que el acoplamiento del spin individual y los momentos orbitales angulares requeridos por el principio de exclusión para los electrones de una subcapa, la magnitud de los impulsos angulares totales, orbitales y de spin de una subcapa que tiene un hueco, es la misma que si la subcapa contuviera sólo un electrón que correspondiera al hueco. En cualquiera de ambos casos, el número cuántico que especifica la magnitud del impulso angular de spin no se escribe, ya que sólo puede ser $\frac{1}{2}$. Vea la explicación de la tabla (13–9).

www.FreeLibros.me

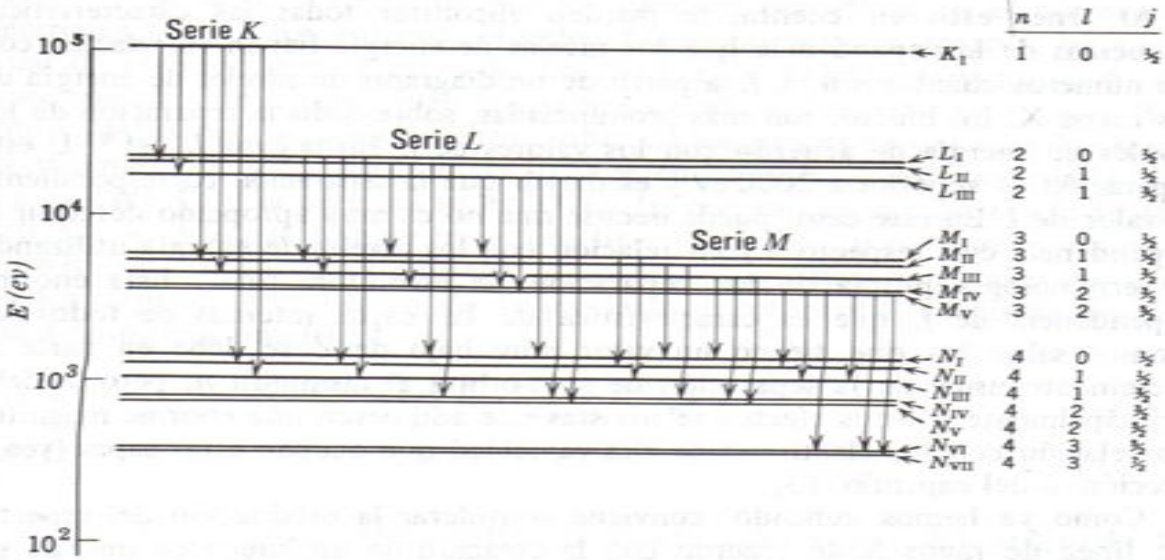

Figura 14-6. Niveles de mayor energía de rayos X que corresponden al átomo de uranio y las transiciones posibles entre esos niveles.

podemos considerar esto como un diagrama de niveles de energía para un hueco con los números cuánticos n, l, j. Puesto que falta un electrón de energía negativa, las energías de todos estos niveles son positivas. Los niveles energéticos se identifican también mediante una notación que se usa comúnmente en la espectroscopia de rayos X. De acuerdo con esta notación, el valor del número cuántico n se especifica conforme al esquema que se muestra en la tabla 14–1. Los subíndices en números romanos que aparecen en la figura 14–6 marcan los niveles conforme decrece la energía, pero no especifican los valores de l y j.

Puesto que un diagrama de los niveles de energía de los rayos X da los niveles de energía de un hueco, el ordenamiento de energía de los niveles con respecto a los números cuánticos n, l, j, es inverso al que se tiene en un diagrama de los niveles ópticos dando los correspondientes a un electrón. Esto sucede porque si la energía de un átomo con un electrón de número cuántico n, l, j, es particularmente negativa, la energía de un átomo con un hueco correspondiente es particularmente positiva, ya que se debe comunicar más energía al átomo a fin de expulsar al electrón.

TABLA 14–1
Notación espectroscópica para n

n	1	2	3	4	5	. . .
Notación espectroscópica	K	L	M	N	O	. . .

www.FreeLibros.me

Al tener esto en cuenta, se pueden encontrar todas las características conocidas de la dependencia que los niveles de energía tienen en relación con los números cuánticos n, l, j, a partir de un diagrama de niveles de energía de los rayos X. En efecto, son más pronunciadas, sobre todo la separación de los niveles de energía de acuerdo con los valores de j. En la capa L del ^{92}U esta separación es superior a 2000 ev y es mayor que la separación correspondiente al valor de l. En este caso, puede decirse que no es muy apropiado describir la dependencia con respecto a j en relación con los niveles de energía utilizando la terminología propia de la "separación de estructura fina". Esta enorme dependencia de j, que es característica de las capas internas de todos los átomos salvo los que tienen un valor muy bajo de Z se debe en parte al incremento usual en la separación de spin-órbita al disminuir n; pero se debe principalmente a otros efectos relativistas que adquieren una enorme magnitud en relación con los electrones de alta velocidad que ocupan estas capas (vea la sección 6 del capítulo 13).

Como ya hemos indicado, conviene considerar la producción del espectro de línea de rayos X de acuerdo con la creación de un hueco en uno de sus niveles más altos de energía, y el salto subsiguiente de este hueco a través de sus niveles de energía menor, emitiendo en cada salto un cuanto de rayos X que lleva el exceso de energía. La frecuencia ν del cuanto satisface la relación usual de la energía E que porta: $E = h\nu$. Sin embargo, no todas las transiciones son posibles. Existe el siguiente conjunto de reglas de selección para el cambio en los números cuánticos del hueco:

$$\begin{aligned} \Delta l &= \pm 1 \\ \Delta j &= 0, \pm 1 \end{aligned} \tag{14–6}$$

Observe que son las mismas que las reglas de selección (13–30) y (13–31), que gobiernan al electrón ópticamente activo en un átomo alcalino.* En el diagrama de niveles de energía de los rayos X, correspondiente al ^{92}U, indicamos las transiciones que obedecen la ecuación (14–6). La totalidad de rayos X que se emiten en estas transiciones (más otros que se emiten con poca frecuencia contrariando estas reglas), constituye el espectro total de rayos X del átomo. Es conveniente agrupar las líneas producidas por las transiciones de la capa K en la llamada serie K, de la capa L en la serie L, etc. Los diagramas de niveles de energía de los rayos X se obtienen experimentalmente mediante un análisis de los espectros observados de rayos X. Este análisis puede facilitarse enormemente mediante este agrupamiento.

Una de las diferencias más notables entre el espectro de rayos X y el óptico, es que los primeros varían ligeramente de un elemento a otro, es decir, no hay cambios abruptos de un elemento al siguiente, contrariamente a lo que sucede en los espectros ópticos. La razón es que las características de los espectros de rayos X dependen, básicamente, de las energías de amarre de los electrones de las capas internas. Al aumentar el número atómico Z estas energías de amarre aumentan de modo uniforme, debido a la mayor carga

* Esta es una manifestación de la simetría descrita en la nota anterior, entre las propiedades de una subcapa con un electrón y una subcapa con un hueco correspondiente.

www.FreeLibros.me

nuclear y no se ven afectados por los cambios periódicos en el número de electrones de la capa externa. Moseley fue el primero en observar la regularidad de los espectros de rayos X. En 1913, poco después de la invención del espectrómetro de cristal, hizo una investigación del espectro de rayos X y obtuvo datos para varios elementos sobre las longitudes de onda de dos líneas prominentes, K_α y L_α. La primera línea se emite en las transiciones de la capa K a la capa L, y la segunda se emite en las que van de la capa L a la M. (En realidad, K_α y L_α se componen de dos líneas cada una; pero Moseley no pudo resolver esta estructura.) Moseley descubrió que estas longitudes de onda pueden representarse dentro de la precisión experimental, mediante las fórmulas empíricas simples:

Para K_α:
$$1/\lambda = C_{K\alpha}(Z - 1)^2 \tag{14–7}$$

Para L_α:
$$1/\lambda = C_{L\alpha}(Z - 7.4)^2 \tag{14–7'}$$

en donde $C_{K\alpha}$ y $C_{L\alpha}$ son constantes cuyos valores son del orden de la constante de Rydberg para un núcleo infinitamente pesado, R_∞, definida por (5–15). Moseley interpretó estos resultados, basándose en la teoría de Bohr del átomo, que fue propuesta en el mismo año en que realizó sus experimentos. De acuerdo con la ecuación (5–14), la teoría de Bohr predice que la energía de un electrón de la capa de número cuántico n para un núcleo infinitamente pesado es:

$$E_n = -R_\infty hc\frac{Z^2}{n^2} \tag{14–8}$$

Puesto que la energía de excitación de un átomo que ha perdido un electrón de la capa de número cuántico n es igual a $|E_n|$, la energía E del cuanto de rayos X emitido cuando el hueco salta de la capa n_i a la n_f es

$$E = R_\infty hcZ^2(1/n_i^2 - 1/n_f^2)$$

Esta energía se relaciona con la frecuencia ν del cuanto por

$$E = h\nu = hc/\lambda$$

de manera que

$$hc/\lambda = R_\infty hcZ^2(1/n_i^2 - 1/n_f^2)$$

o bien,

$$1/\lambda = R_\infty Z^2(1/n_i^2 - 1/n_f^2) \tag{14–9}$$

Para K_α, $n_i = 1$ y $n_f = 2$ y para L_α, $n_i = 2$ y $n_f = 3$. Por lo tanto, la teoría de Bohr predice que:

Para K_α:
$$1/\lambda = [R_\infty(1/1^2 - 1/2^2)]Z^2 \tag{14–10}$$

Para L_α:
$$1/\lambda = [R_\infty(1/2^2 - 1/3^2)]Z^2 \tag{14–10'}$$

www.FreeLibros.me

En cada caso, el valor de la constante dentro de los paréntesis rectangulares concuerda bastante bien con la constante C de las ecuaciones (14–7) y (14–7′). Moseley explicó que el hecho de que estas ecuaciones empíricas contengan $(Z - 1)$ y $(Z - 7.4)$ en lugar de Z se debe a que los electrones atómicos blindan la carga nuclear (lo cual no tomó en cuenta Bohr al deducir la ecuación 14–8). De acuerdo con Moseley, el electrón que queda en la capa K durante la transición del hueco desde la capa K a la L, blinda al núcleo en tal forma que Z se reduce a $(Z - 1)$ para la emisión de la línea K_α. De la misma manera, los nueve electrones que quedan en las capas K y L blindan al núcleo durante la transición de un hueco de la capa L a la M. Sin embargo, este blindaje no es perfecto y Z para la emisión de la línea L_α se reduce a sólo $(Z - 7.4)$. La descripción de Moseley respecto a este blindaje se relaciona íntimamente con la descripción dada en relación con la ecuación (13–22), y ambas sólo son aproximaciones de la descripción más precisa de la teoría de Hartree. Además, otras medidas posteriores han demostrado que las fórmulas empíricas (14–7) y (14–7′) sólo son aproximaciones.

Con todo, el trabajo de Moseley fue un paso importante en el desarrollo de la física moderna. Su aplicación simple y acertada de la teoría de Bohr a los espectros de línea de rayos X, dio una de las primeras confirmaciones de esta teoría. Usando las fórmulas empíricas (14–7) y (14–7′) para determinar Z, Moseley estableció una correlación entre la carga nuclear de un átomo y su posición en la tabla periódica de los elementos. Por ejemplo, descubrió que el número atómico del ^{27}Co es menor que el de ^{28}Ni, a pesar de que su peso atómico es mayor. También demostró que existían lagunas en la tabla periódica, como más tarde se demostró, para $Z = 43$, 61, 72 y 75. Los elementos con estos números atómicos se descubrieron posteriormente.

4. Rayos X del espectro continuo

La transferencia de energía de un electrón incidente a los electrones de los átomos del ánodo de un tubo de rayos X, es un proceso que constituye el factor más importante para reducir la velocidad del electrón incidente, y que lleva también (en el caso poco común de una gran transferencia de energía) a la emisión de los espectros de línea de los rayos X. Sin embargo, no es lo único que producen los electrones incidentes. Otro es la dispersión por interacción de Coulomb de estos electrones, en choques cercanos al núcleo de los átomos que forman parte del ánodo. En una colisión de este tipo, las aceleraciones de un electrón incidente son muy grandes y puede ser dispersado un ángulo grande. Aunque el electrón no pierde energía, transfiriéndola al núcleo, por ser la masa de éste muy grande y no retroceder mucho, ocasionalmente pierde energía en forma de radiación electromagnética. Esta radiación es la que forma el espectro continuo de rayos X.*

Tanto la teoría clásica como la cuántica predicen que un electrón dispersado emite radiación electromagnética. Conforme a la teoría clásica, siempre

* Los rayos X del espectro del continuo se denominan, a menudo, radiación por frenamiento.

www.FreeLibros.me

que hay una dispersión se emiten cantidades pequeñas de radiación, ya que de la ecuación de Maxwell se deduce que las partículas cargadas emiten radiaciones al ser aceleradas. No sucede lo mismo en la teoría cuántica. Por el contrario, en un proceso de dispersión se emiten ocasionalmente grandes cantidades de radiación (cuantos). Esta situación puede compararse con la que existe en el caso del átomo —la teoría clásica predice la emisión constante de radiación por los electrones acelerados que giran alrededor del núcleo, mientras que la teoría cuántica predice la emisión ocasional de radiación, cuando el electrón cambia sus estados cuánticos. En el caso del electrón atómico ligado sabemos que las conclusiones derivadas de la teoría cuántica son siempre correctas, y que las que se derivan de la clásica son casi siempre incorrectas. En el caso del electrón dispersado no ligado es cierto también que la teoría cuántica conduce siempre a conclusiones correctas; sin embargo, en este caso, la teoría clásica no nos lleva a conclusiones que son generalmente incorrectas. En realidad, la teoría clásica describe bastante bien ciertas características de la producción de rayos X del espectro continuo. El contraste entre los dos casos refleja el hecho de que las diferencias entre una teoría cuantizada y una no cuantizada no son tan fundamentales en el caso de una partícula no ligada como lo son en el de una partícula ligada.

Conforme a la ecuación (2–7) de la teoría clásica, una partícula de carga ze con una aceleración a, emitirá energía en forma de radiación electromagnética con la rapidez

$$R = \frac{2}{3}\frac{(ze)^2a^2}{c^3} \qquad (14\text{–}11)$$

Cuando un núcleo de carga Ze dispersa esta partícula, experimenta una fuerza de Coulomb que es proporcional a zZe^2 y, si la masa de la partícula es m, su aceleración es proporcional a zZe^2/m. En consecuencia, la rapidez de emisión de energía electromagnética, se puede expresar como

$$R \propto z^2a^2 \propto z^4Z^2/m^2 \qquad (14\text{–}12)$$

El factor $1/m^2$ predice que la emisión de radiación electromagnética es más importante para los electrones de lo que lo es para los protones o de cualquier otra partícula pesada. Está probado que la energía emitida en forma de rayos X del espectro continuo por una partícula pesada cargada al atravesar materia, es tan pequeña que resulta casi imposible medirla. El factor Z^2 predice que los ánodos de número atómico elevado son los productores más eficientes de estos rayos X* lo cual puede comprobarse experimentalmente. Si se evalúa la constante de proporcionalidad de (14–12) y se integra a lo largo de la trayectoria (promedio) del electrón incidente, al llegar al reposo en el ánodo, puede calcularse la energía total de los rayos X del espectro continuo, W, que se emite. Los resultados concuerdan bastante bien con la ecuación empírica (14–3).

* La dependencia de Z^2 demuestra también que la radiación emitida en la dispersión desde un electrón atómico (es decir para $Z = 1$), es tan pequeña que puede despreciarse.

www.FreeLibros.me

La teoría clásica puede explicar razonablemente la polarización de los rayos X del espectro continuo. Esta teoría predice que los rayos X, emitidos en la dirección **r** durante una aceleración **a**, se polarizan con el vector eléctrico perpendicular a **r**, en el plano definido por **r** y **a**. Ahora, los rayos X de energía más alta se emiten en choques "frontales" en los que **a** siempre es, aproximadamente, antiparalelo a **i**, la dirección del haz incidente de electrones. En consecuencia, estos rayos X tienen una polarización neta grande. En los choques que producen la emisión de rayos X de menor energía, la dirección de **a** no está tan restringida y, como resultado, la polarización neta es pequeña.

La teoría electromagnética clásica da una predicción exacta de la distribución angular de la energía de rayos X emitida en el espectro continuo. En el caso de electrones incidentes de energías no relativistas, la distribución angular predicha por la ecuación (2–6) es

$$I(\theta) \propto \operatorname{sen}^2 \theta \tag{14–13}$$

en donde θ es el ángulo que forma **r** y la dirección promedio de aceleración, que es $-\mathbf{i}$.* Para electrones incidentes de energías relativistas, algunos efectos relativistas de transformación cambian la distribución angular en la dirección de **i**.

El único aspecto de la emisión de los rayos X del espectro continuo que la teoría clásica no puede explicar es la forma del espectro; este aspecto puede explicarse sólo mediante la teoría cuántica. Veamos la frecuencia de corte (ecuación 14–2) que es, con toda seguridad, la característica más notable del espectro.

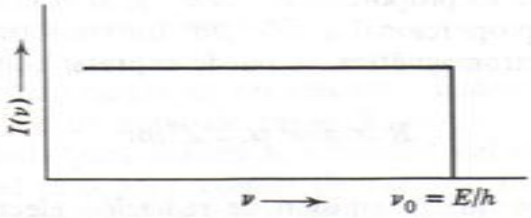

Figura 14-7. Espectro continuo de frecuencias de rayos X de un ánodo delgado.

Este corte existe porque el cuanto de mayor energía que puede emitir un electrón con energía cinética E, tiene una energía de $h\nu_0 = E$, en donde ν_0 es su frecuencia. En efecto, ésta fue una de las primeras pruebas que respaldó la teoría de los cuantos de Einstein. Desgraciadamente, otras características del espectro no pueden explicarse mediante una teoría cuántica tan elemental, sino sólo por medio de la electrodinámica cuántica. Este tema supera con mucho el nivel de este libro, por lo que nos limitaremos a describir los

* Esta distribución angular tiene la misma forma que la de la energía que emiten en forma de radiación de radiofrecuencia los electrones acelerados a lo largo de una antena lineal. Desde el punto de vista de la teoría clásica, este proceso es prácticamente el mismo que el que se sigue en la emisión de rayos X.

www.FreeLibros.me

resultados de dicha teoría. Para electrones de energía E incidente sobre un ánodo, tan delgado que sus energías se mantienen básicamente constantes al atravesarlo, la teoría predice que el espectro tendrá la forma simple que se ilustra en la figura 14–7. $I(\nu)$ es la energía de rayos X por unidad de intervalo de frecuencia. Para compararla con los datos presentados en la sección 2, convertimos en $I(\lambda)$, la energía de rayos X por unidad de longitud de onda. La relación entre dos cantidades como éstas ya se obtuvo anteriormente (vea la ecuación 2–27):

$$I(\lambda) = \frac{c}{\lambda^2} I(\nu)$$

Ahora, puesto que

$$I(\nu) \simeq \text{constante}, \qquad \nu < \nu_0 = E/h$$

$I(\lambda)$ puede expresarse como

$$I(\lambda) \simeq \text{constante}/\lambda^2, \qquad \lambda > \lambda_0 = c/\nu_0 = ch/E$$

En la figura 14–8 se ilustra este espectro. El espectro de longitud de onda predicho, correspondiente a un ánodo delgado, concuerda con las medidas

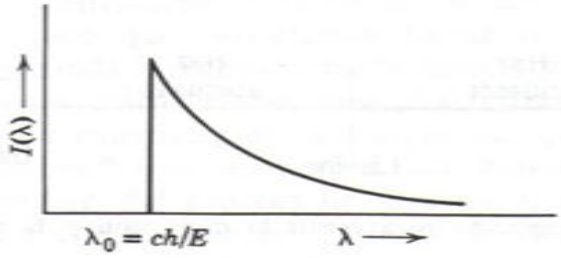

Figura 14-8. Espectro continuo en función de la longitud de onda de rayos X de un ánodo delgado.

hechas con ánodos delgados. Concuerda también con las medidas más típicas que usan ánodos "gruesos" en los que se detienen los electrones incidentes. Esto se ilustra en la figura 14–9, generando un espectro de ánodo grueso,

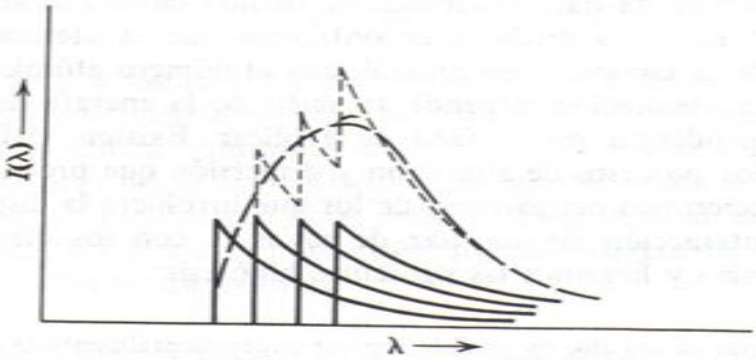

Figura 14-9. Ilustración de la composición de un espectro continuo de longitud de onda de rayos X de un ánodo grueso.

www.FreeLibros.me

mediante la suma de varios espectros de ánodo delgado. Se usan cuatro valores de E para representar el intervalo de energías electrónicas presentes en el ánodo. La línea punteada indica los resultados de este cálculo aproximado. La línea de trazos cortos señala los resultados de un cálculo exacto, incluyendo la integración sobre la energía del electrón. Como podemos ver, está de acuerdo con los datos experimentales, como los que se presentaron en la sección 2.

5. La dispersión de rayos X

Como ya hemos estudiado la naturaleza y la producción de los rayos X, veremos ahora su interacción con la materia. Tomemos por caso un haz de rayos X que atraviesa una hoja metálica y llega a un detector de rayos X, como se muestra esquemáticamente en la figura 14–10. Puede obtenerse una medida cuantitativa de la interacción de los rayos X con el material de una lámina metálica, midiendo la intensidad del haz atenuado que choca con el detector y, después de quitar la hoja metálica, se mide la intensidad del haz incidente. Los resultados se expresan, en términos de la *atenuación* de la lámina, para los rayos X, que se define como el decremento fraccional de la intensidad del haz.

Figura 14-10. Aparato empleado para medir la dispersión y la absorción de un haz de rayos X.

Al atravesar el papel metálico, los rayos X pueden ser absorbidos totalmente y, también, dispersados. Si el ángulo que el detector subtiende al papel metálico es pequeño, casi todos los rayos X dispersados no pasarán a través del detector y la medida dará la atenuación debida tanto a la absorción como a la dispersión.* En estas medidas encontramos que la atenuación aumenta con el espesor de la lámina y, en general, con el número atómico del material que contiene. La atenuación depende también de la energía de los rayos X, aunque esta dependencia no es fácil de explicar. Existen varios fenómenos interesantes en los procesos de absorción y dispersión que producen la atenuación. En esta sección nos ocuparemos de los que involucra la dispersión.

Veamos la interacción de un haz de rayos X con los electrones de los átomos de la lámina y hagamos las siguientes hipótesis:

* Si se hace variar el ángulo, es posible separar experimentalmente la atenuación debida a la absorción de la que se debe a la dispersión y medir esas cantidades en forma independiente. La atenuación producida por la dispersión puede medirse también por separado mediante un experimento en el que se detecta la dispersión de los rayos X.

www.FreeLibros.me

1. La longitud de onda de los rayos X es pequeña comparada con las dimensiones características de los átomos:

$$\lambda \ll 10^{-8}\ \text{cm} \tag{14–14}$$

2. La energía de un cuanto de rayos X es grande respecto a la energía de amarre de los electrones atómicos:

$$h\nu \gg \text{B.E.} \tag{14–15}$$

3. La energía de un cuanto de los rayos X es pequeña en comparación con la energía en reposo de un electrón:

$$h\nu \ll mc^2 \tag{14–16}$$

Posteriormente examinaremos la validez de estas hipótesis. Por lo pronto, veamos sus consecuencias. La primera hipótesis implica que la relación de la fase de los rayos X que dispersan los electrones de átomos diferentes o del mismo átomo serán básicamente al azar o incoherentes. Excluye los efectos de interferencia entre diferentes átomos (como los que se vieron en la sección 2), al igual que los efectos de interferencia dentro del mismo átomo. Si esta hipótesis es válida, la interacción de cualquier electrón con los rayos X es independiente de las interacciones de todos los demás electrones de la lámina y, por tanto, lo único que necesitamos tomar en cuenta es una de estas interacciones. La segunda hipótesis permite ignorar los amarres de los electrones con los átomos y considerarlos libres. La tercera suposición nos permite ignorar los aspectos cuánticos de los rayos X, que se manifiestan en la dispersión de Compton.* Una vez hechas estas hipótesis, hacemos un análisis clásico electromagnético del proceso de dispersión, debido a Thomson (alrededor de 1900). En este estudio se considera que los rayos X son un haz de ondas electromagnéticas incidentes sobre un solo electrón libre. La interacción de los rayos X con el electrón se debe, entonces, a la interacción de su carga con el campo eléctrico que oscila sinusoidalmente. (La interacción con el campo magnético es despreciable.) El vector **E** describe el campo eléctrico donde está ubicado el electrón. Este campo eléctrico que actúa sobre el electrón produce una fuerza $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$, y una aceleración

$$\mathbf{a} = \mathbf{F}/m = -e\mathbf{E}/m \tag{14–17}$$

donde **E**, **F** y **a** oscilan sinusoidalmente con la frecuencia ν de las ondas electromagnéticas incidentes. Bajo la influencia de esta aceleración la posición del electrón oscilará sinusoidalmente con la frecuencia ν, y emitirá ondas electromagnéticas de la misma frecuencia que las ondas incidentes en fase con ellas. La energía emitida por estas ondas la proporcionan las ondas electromagnéticas incidentes. Por esto el electrón absorbe energía del haz de rayos X y la dispersa en todas las direcciones.

* La ecuación (3–17) demuestra que, si la expresión (14–16) es válida, el cambio de la longitud de onda en la dispersión de rayos X desde un electrón libre, se puede despreciar.

www.FreeLibros.me

La rapidez de emisión de energía de un átomo acelerado, es decir, la rapidez con la que el electrón dispersa energía, está dada por la ecuación (14–11), donde $z = -1$:

$$S = \tfrac{2}{3}e^2a^2/c^3$$

y S mide la dispersión. Al emplear la ecuación (14–17), se convierte en:

$$S = \tfrac{2}{3}e^4E^2/m^2c^3 \tag{14–18}$$

Ya que E cambia constantemente al transcurrir el tiempo, también S, por lo que es muy conveniente considerar su promedio temporal.

$$\bar{S} = \overline{\tfrac{2}{3}e^4E^2/m^2c^3} = \tfrac{2}{3}e^4\overline{E^2}/m^2c^3 \tag{14–19}$$

La cantidad $\bar{S}$ es la energía promedio emitida en todas las direcciones, en forma de radiación electromagnética, y definimos esta cantidad como la intensidad de la radiación dispersada.

A continuación, evaluaremos $\bar{I}$, la intensidad de la radiación incidente. Definimos esta cantidad como la energía promedio que porta el haz por segundo, a través de un área de un centímetro cuadrado, con orientación normal en relación con la dirección del haz.* La ecuación (2–5) indica que la relación entre $\bar{I}$ y la densidad promedio de energía $\bar{\rho}$ es

$$\bar{I} = \bar{\rho}c \tag{14–20}$$

Conforme a la ecuación (2–4), $\bar{\rho}$ es

$$\bar{\rho} = \overline{E^2}/4\pi$$

en donde se suprime el subíndice para la transversal. Entonces $\bar{I}$ puede expresarse como:

$$\bar{I} = c\overline{E^2}/4\pi \tag{14–21}$$

Ahora, al comparar las ecuaciones (14–19) y (14–21), observaremos que tanto $\bar{S}$ como $\bar{I}$ son proporcionales $\overline{E^2}$. Por lo que $\bar{S}$ e $\bar{I}$ serán proporcionales entre sí, es decir,

$$\bar{S} = \sigma_T\bar{I} \tag{14–22}$$

en donde σ_T es una constante de proporcionalidad. Al evaluar σ_T de las ecuaciones (14–19) y (14–21), tenemos que,

$$\sigma_T = \frac{8\pi}{3}(e^2/mc^2)^2 = 6.66 \times 10^{-25}\ \text{cm}^2 \tag{14–23}$$

Esta cantidad, denominada *sección del electrón de Thomson*, describe una propiedad característica de un electrón libre. Por medio de la ecuación (14–22), σ_T indica la fracción de la intensidad de un haz de rayos X

* Observe que las dimensiones de $\bar{S}$ son ergs-seg^{-1}, mientras que las de $\bar{I}$ son ergs-cm^{-2}-seg^{-1}.

www.FreeLibros.me

que un electrón libre dispersa en todas las direcciones debido al proceso de la *dispersión de Thomson.*

Es razonable denominar σ_T "sección" porque sus dimensiones son centímetros cuadrados; pero este nombre tiene un significado más profundo, que puede comprenderse si nos imaginamos al electrón en el centro de un disco imaginario que tiene una orientación normal al haz y área igual a σ_T cm^2 Entonces, si toda la radiación del haz que incide sobre el disco se dispersara, la relación de la intensidad dispersada $\bar{S}$ con la incidente, $\bar{I}$, sería precisamente σ_T, en acuerdo con la ecuación (14–22). Podemos verlo fácilmente en la figura 14–11 (en la que el área de σ_T se ha amplificado por un factor de

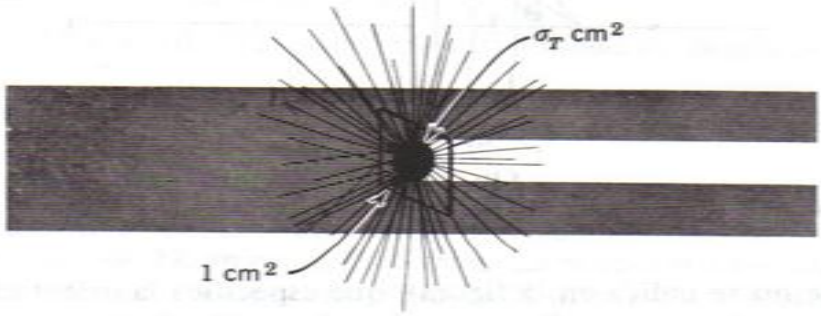

Figura 14-11. Interpretación geométrica de una sección.

10^{23}). La energía promedio incidente por segundo sobre un área de un centímetro cuadrado es igual, por definición, a la intensidad incidente $\bar{I}$. La fracción de esta energía que choca contra el disco imaginario es precisamente la relación σ_T cm^2/1 cm^2 = σ_T. Si toda esta radiación se dispersara, la energía dispersada por segundo, que es la intensidad dispersada $\bar{S}$, sería $\sigma_T\bar{I}$, lo cual corrobora nuestra suposición. La interpretación geométrica de una sección es conveniente para representarla e incluso, calcularla; pero no se debe tomar tan literalmente que conduzca a la conclusión de que existe realmente una distancia bien definida r que satisfaga la ecuación $2\pi r^2 = \sigma_T$, de tal manera que todos los rayos X que pasan dentro de esta distancia del electrón sean dispersados, mientras que todos los demás no lo serán.

La teoría electromagnética clásica hace predicciones también en relación con la distribución angular de los rayos X que dispersa un electrón, de acuerdo con el proceso de dispersión de Thomson. Estudie la figura 14–12. La dirección del haz incidente de rayos X, está dado por el vector **i**. El vector

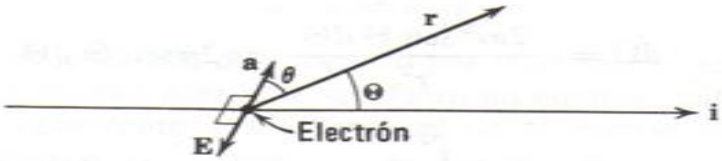

Figura 14-12. Ilustración de la relación entre los vectores que determina la polarización de los rayos X dispersados.

www.FreeLibros.me

E, que es perpendicular a **i**, es la dirección del vector eléctrico de una componente típica de polarización del haz, y la aceleración **a**, que esta componente le da al electrón, queda en dirección opuesta. La distribución angular de la radiación que emite el electrón acelerado en esta forma está dada por la figura 14–13, en donde θ es el ángulo que forman la dirección de la aceleración **a** y la dirección de emisión de la radiación **r**. Esta distribución angular puede expresarse también en función del ángulo Θ que forman **r** e **i**, y

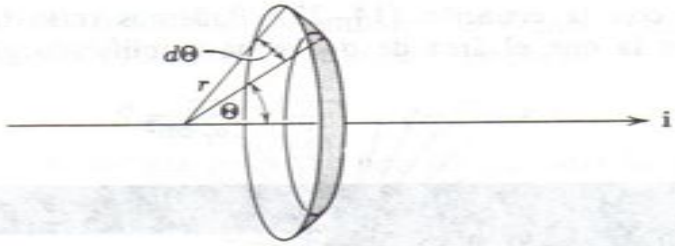

Figura 14-13. El elemento del ángulo sólido entre Θ y $\Theta + d\Theta$.

el ángulo (que no se indica en la figura), que especifica la orientación azimutal de **E**. Al hacer esto y promediar después sobre todas las orientaciones azimutales posibles, para analizar el caso de un haz incidente no polarizado, se obtiene la distribución angular en función del ángulo Θ, que es

$$\bar{S}(\Theta) \propto (2 - \operatorname{sen}^2 \Theta) \tag{14–24}$$

en donde $\bar{S}(\Theta)$ es la energía promedio emitida por segundo por unidad de ángulo sólido, al ángulo Θ.* La integral de $\bar{S}(\Theta)$ sobre todo el ángulo sólido es igual a la energía total promedio emitida por segundo, o la intensidad de la radiacion emitida $\bar{S}$. Podemos expresar la ecuación (14–24) como

$$\bar{S}(\Theta) = K(2 - \operatorname{sen}^2 \Theta) \tag{14–24'}$$

y evaluemos la integral:

$$\bar{S} = \int \bar{S}(\Theta)\, d\Omega$$

El elemento del ángulo sólido $d\Omega$ es igual al área de una esfera que interceptan conos de semiángulos Θ y $\Theta + d\Theta$, dividida por el cuadrado del radio de la esfera, como se ilustra en la figura 14–13. El área es $2\pi r^2 \operatorname{sen} \Theta d\Theta$, de donde,

$$d\Omega = \frac{2\pi r^2 \operatorname{sen} \Theta\, d\Theta}{r^2} = 2\pi \operatorname{sen} \Theta\, d\Theta \tag{14–25}$$

En consecuencia,

$$\bar{S} = 2\pi K \int_0^{\pi} (2 - \operatorname{sen}^2 \Theta) \operatorname{sen} \Theta\, d\Theta \tag{14–26}$$

* Puesto que el ángulo sólido no tiene dimensiones, las de $\bar{S}(\Theta)$ son ergs-seg^{-1}.

www.FreeLibros.me

Conforme a las ecuaciones (14–22) y (14–23),

$$\bar{S} = \frac{8\pi}{3}(e^2/mc^2)^2 \bar{I} \tag{14–27}$$

Efectuando la integración de (14–26) e igualando la expresión resultante con (14–27), obtenemos K. Una vez obtenido este valor, la ecuación (14–24′) se convierte en

$$\bar{S}(\Theta) = \tfrac{1}{2}(e^2/mc^2)^2(2 - \operatorname{sen}^2 \Theta)\bar{I}_0 \tag{14–28}$$

Si definimos

$$\begin{aligned} d\sigma_T/d\Omega &= \tfrac{1}{2}(e^2/mc^2)^2(2 - \operatorname{sen}^2 \Theta) \\ &= 3.98 \times 10^{-26}(2 - \operatorname{sen}^2 \Theta)\ \text{cm}^2/\text{unidad de ángulo sólido} \end{aligned} \tag{14–29}$$

la ecuación (14–28) puede escribirse como sigue:

$$\bar{S}(\Theta) = \frac{d\sigma_T}{d\Omega}\bar{I} \tag{14–30}$$

La cantidad $d\sigma_T/d\Omega$, cuyas dimensiones son también de cm², se denomina *sección diferencial de Thomson del electrón.* La ecuación (14–30), indica qué fracción de la intensidad de un haz de rayos X dispersa un electrón libre en el proceso de dispersión de Thomson, por unidad de ángulo sólido en la dirección del ángulo Θ, tal y como especifica σ_T en la ecuación (14–22), la fracción de la intensidad que dispersa un electrón libre en ese proceso en todo el ángulo sólido. Puede hacerse una interpretación geométrica de una sección diferencial, similar a la que dimos antes para una sección. No obstante, les recordamos nuevamente a los lectores que no tomen estas interpretaciones en un sentido demasiado literal.

Al haber concluido nuestro estudio de la dispersión de Thomson de rayos X por un electrón libre, volvamos al problema más real de la dispersión de rayos X por un átomo. Si se satisfacen las hipótesis (14–14) y (14–15), este problema es trivial, ya que cada uno de los Z electrones del átomo dispersa rayos X en forma independiente y la intensidad total que dispersa el átomo es Z veces la que dispersa cada electrón. Al evaluar esta intensidad mediante la ecuación (14–22), obtenemos para la $\bar{S}$ total:

$$\bar{S} = Z\sigma_T \bar{I}$$

Al definir

$$\sigma_{S_a} = Z\sigma_T \tag{14–31}$$

podemos expresarlo como

$$\bar{S} = \sigma_{S_a}\bar{I} \tag{14–32}$$

La cantidad σ_{S_a} es la sección de *dispersión por el átomo,* y tiene el valor dado por la ecuación (14–31), sólo si se satisfacen las hipótesis antes mencionadas. Si es así, *la sección transversal diferencial de dispersión por el átomo* es también, sencillamente,

$$\frac{d\sigma_{S_a}}{d\Omega} = Z\frac{d\sigma_T}{d\Omega} \tag{14–33}$$

www.FreeLibros.me

Esto se relaciona con $\bar{S}(\Theta)$ total mediante la ecuación

$$\bar{S}(\Theta) = \frac{d\sigma_{S_a}}{d\Omega} I \tag{14–34}$$

Con estas secciones de dispersión por el átomo es fácil calcular la atenuación previsible, debida a la dispersión, de una lámina que contiene una cantidad conocida de átomos por unidad de volumen.* Al comparar esta predicción con los resultados de los experimentos que se describieron al principio de esta sección, encontramos una coincidencia del 10 al 20 por ciento para átomos con $Z \lesssim 15$ y para rayos X cuya longitud es de alrededor de $\lambda = 0.2 \times 10^{-8}$ cm. Esto formó la base de los experimentos realizados por Barkla en 1909, que constituyeron la primera medida de Z, es decir, el número de electrones que contiene un átomo.

La energía del rayo X, cuya longitud es $\lambda = 0.2 \times 10^{-8}$ cm, es $h\nu = 6 \times 10^4$ ev. Puesto que esta longitud de onda y la energía satisfacen las suposiciones (14–14) y (14–15) para átomos con Z pequeño (y satisfacen también la 14–16), podemos comprender por qué las secciones para un átomo medidas con estos rayos X concuerdan más o menos con los valores previstos. También podemos comprender por qué no concuerdan con medidas hechas con rayos X de longitudes de onda mayores y átomos con Z mayores. Para estos casos, la longitud de onda de los rayos X es comparable o mayor que las dimensiones características de los átomos y, de igual manera, los electrones no actúan como si estuvieran libres. Por estas dos razones, los electrones del átomo no interaccionan independientemente con el haz incidente de rayos X. En el límite de longitudes de onda muy grandes y energías cuánticas muy bajas las interacciones no son independientes, porque, en estas circunstancias, los electrones ligados del átomo oscilan bajo la influencia de las ondas electromagnéticas incidentes con la misma fase y las ondas electromagnéticas que emite un electrón están totalmente en fase con las que emiten los demás. Debido a esta coherencia de fase, la intensidad dispersada será mucho mayor. Es fácil comprender esto, pensando que todos los electrones Z oscilan juntos como un "electrón gigantesco" cuya carga es Ze y cuya masa es Zm. De acuerdo con la ecuación (14–17), la aceleración de este objeto será la misma que la de un solo electrón; pero, de acuerdo con la ecuación (14–11), la energía que irradia será mayor que la que irradia un solo electrón por un factor de Z^2. De donde, en este límite, la sección real de dispersión por átomo, σ_{S_a}, será Z^2 veces la sección de Thomson del electrón, σ_T, y Z veces mayor que la predicha por la ecuación (14–31). La sección diferencial real de dispersión por átomo, $d\sigma_{S_a}/d\Omega$, será también Z^2 veces mayor que la sección diferencial de Thomson del electrón, $d\sigma_T/d\Omega$, y Z veces mayor que lo que predice la ecuación (14–33).

Para los rayos X cuyas longitudes de onda y energías cuánticas son tales que la dispersión de varios electrones atómicos no es del todo coherente ni del todo incoherente, la situación es mucho más complicada; pero, con todo, puede resolverse también mediante la electrodinámica clásica. Suponiendo que

* Este cálculo se efectuará al final de la sección 7.

www.FreeLibros.me

la distribución de los electrones en el átomo es esféricamente simétrica, la amplitud de la onda electromagnética que dispersa cada elemento de volumen se evalúa y, luego, se suman las contribuciones de todos los elementos de volumen, sumando las amplitudes con factores de fase relativa, que dependen de la ubicación del elemento de volumen, el ángulo de dispersión y la longitud de onda. Si elevamos al cuadrado la amplitud neta, encontraremos la intensidad total dispersada en el ángulo en cuestión. Al dividir esto entre la intensidad incidente, obtendremos la sección diferencial de dispersión por átomo, que puede expresarse como:

$$\frac{d\sigma_{S_a}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_T}{d\Omega}|F(\chi)|^2 \tag{14–35}$$

en donde

$$F(\chi) = \int_0^\infty \rho(r)(\text{sen}\,\chi r/\chi r)4\pi r^2\,dr \tag{14–35'}$$

con

$$\chi = 2K\,\text{sen}\,(\Theta/2)$$

y

$$K = 2\pi/\lambda$$

En estas expresiones, λ es la longitud de onda de los rayos X, Θ es el ángulo de dispersión y $\rho(r)$ es la densidad electrónica del átomo en unidades de la carga electrónica. Puesto que

$$\int_0^\infty \rho(r)4\pi r^2\,dr = Z$$

vemos que la función $F(\chi)$, que se conoce como *factor de forma atómico*, adquiere su valor máximo, el número atómico Z, cuando $\text{sen}\,\chi r/\chi r = 1$. Esta condición se satisface cuando $\chi \to 0$, que se presenta para todos los valores de Θ cuando $K \to 0$, y que sucede también para $\Theta \to 0$.

El comportamiento de $F(\chi)$ para $K \to 0$, o $\lambda \to \infty$, confirma las conclusiones del penúltimo párrafo. Su comportamiento para $\Theta \to 0$ corrobora la razón por la que se mencionó en la sección 2 el ángulo pequeño del pico o máximo de la intensidad dispersada. En la figura 14–14 se compara la sección diferencial de dispersión por átomo, medida con rayos X incidentes en átomos de ^{6}C, cuya longitud de onda es $\lambda = 0.71 \times 10^{-8}$ cm, que predice la ecuación (14–33). La discrepancia a ángulos pequeños entre los valores medidos de $d\sigma_{S_a}/d\Omega$ y las predicciones de la ecuación (14–33), proporcionan pruebas convincentes de los efectos coherentes en el proceso de dispersión. Para comparar los valores medidos de $d\sigma_{S_a}/d\Omega$ con las predicciones de la ecuación (14–35), que toma en cuenta estos efectos coherentes, es necesario conocer la densidad electrónica que entra en el factor de forma (14–35′). Si se usa la densidad electrónica obtenida de la teoría de Hartree del átomo, se obtendrá un resultado que concuerda satisfactoriamente. De otra manera, las ecuaciones (14–35), (14–35′) se pueden usar para determinar la densidad electrónica de un átomo, $\rho(r)$, a partir de las medidas de su sección diferencial, $d\sigma_{S_a}/d\Omega$. Los rayos X nos permiten "ver" no sólo la estructura invisible

www.FreeLibros.me

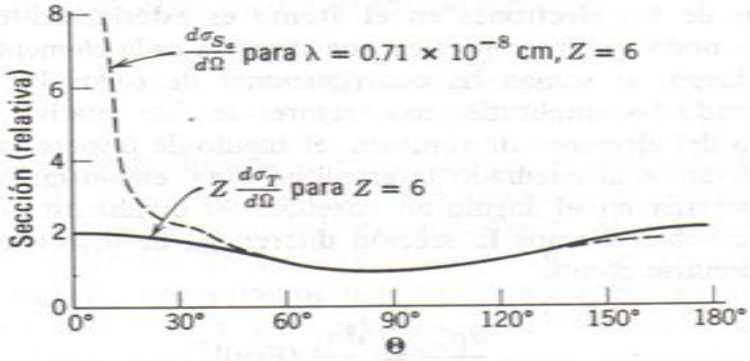

Figura 14-14. La sección diferencial de dispersión por átomo para rayos X de $\lambda = 0.71$ A incidentes al carbono. Tomado de A. H. Compton y S. K. Allison, *X-rays in Theory and Experiment*, D. Van Nostrand Co., Princeton, N.J., 1935.

de los huesos en tejidos vivos, sino también la estructura invisible de los átomos.

Al integrar $d\sigma_{S_a}/d\Omega$ de la ecuación (14–35) para todos los ángulos sólidos, el valor predicho de la sección transversal de dispersión por átomo, σ_{S_a}, se obtiene como una expresión que implica la densidad electrónica $\rho(r)$. Para los casos en que esta expresión se puede evaluar, gracias a que se conoce $\rho(r)$, los resultados concuerdan bastante bien con el experimento, siempre y cuando λ sea mayor de alrededor de 0.2×10^{-8} cm. Los datos experimentales aparecen ilustrados en la figura 14–15. La relación entre la sección transversal de dispersión por átomo, observada, y lo que predice la ecuación (14–31), se representó gráficamente como función de la longitud de onda de los rayos X. Las curvas se han identificado con el número atómico. Observe que estos casos proporcionan ejemplos del hecho antes mencionado, de que las secciones transversales de dispersión por átomo que se observaron, concuerdan con la ecuación (14–31) para $\lambda \simeq 0.2 \times 10^{-8}$ cm; pero que se hace mayor que esta predicción al incrementarse λ debido a los efectos de la coherencia.

Nos damos cuenta también de que las secciones de dispersión por átomos observadas, se hacen más pequeñas que las que predice la teoría electromagnética clásica (con o sin coherencias), cuando λ se hace menor que $\sim 0.2 \times 10^{-8}$ cm. Para rayos X de estas longitudes de onda, la energía cuántica $h\nu$ deja de ser muy pequeña en comparación con el resto de energía de masa de un electrón, $mc^2 = 5.1 \times 10^5$ ev.

Esto viola la hipótesis (14–16), de manera que la expresión no puede analizarse ya a través de la teoría clásica y es necesario recurrir a la cuántica. Ya hemos visto los aspectos energéticos de la teoría cuántica para la dispersión de rayos X por electrones libres. Encontrará esto bajo el encabezado "*El efecto Compton*" en la sección 8, capítulo 3 (sería apropiado que repasara en este momento ese análisis).

Los espectros presentados en el capítulo 3 son para el caso de la dispersión de ^{6}C. Para este átomo de Z pequeña, los datos demuestran que la probabilidad de dispersión con un incremento en la longitud de onda de los rayos X (dispersión de Compton) es comparable con la probabilidad de dispersión sin

www.FreeLibros.me

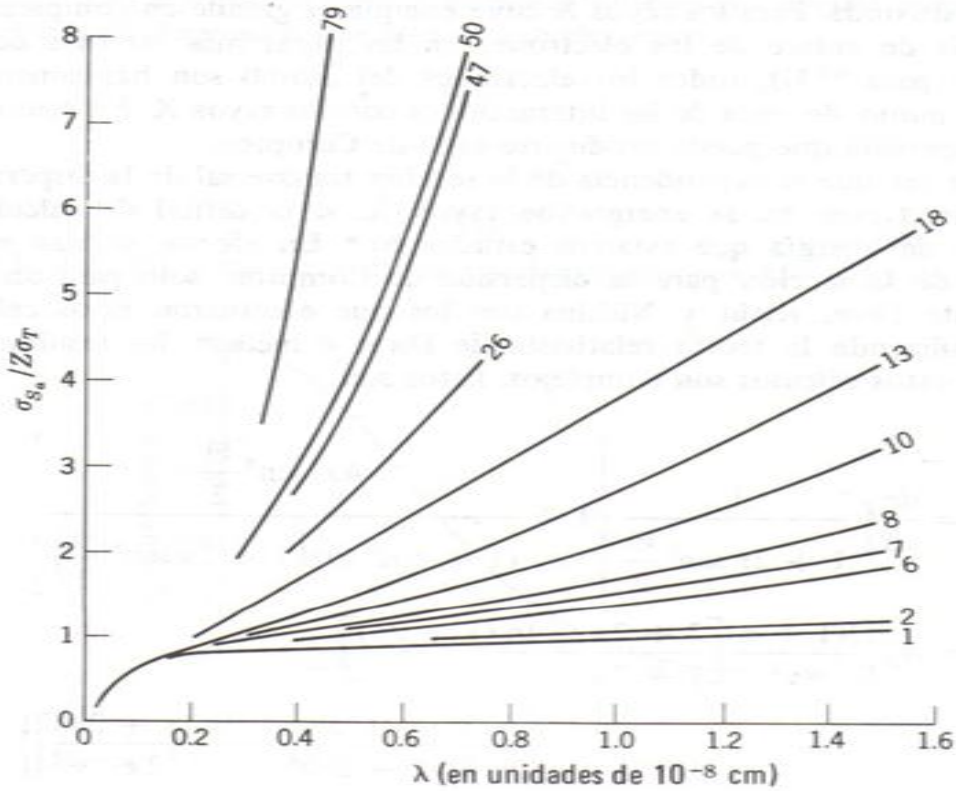

Figura 14-15. Las secciones transversales de dispersión por átomo, para varios átomos y una gama de longitudes de onda. Cada curva se caracteriza por el número atómico del átomo. Tomado de A. H. Compton y S. K. Allison, *X-ray in Theory and Experiment*, D. Van Nostrand Co., Princeton, N.J., 1935.

cambio en la longitud de onda (dispersión de Thomson), incluso cuando las longitudes de onda incidentes son de hasta 0.7×10^{-8} cm, que corresponde a las energías cuánticas tan bajas como 2×10^4 ev. Esto no es muy típico de la situación para energías de rayos X tan bajas como ésa. Para átomos de Z intermedia o grande, la sección transversal para la dispersión de Thomson es muy grande en comparación con su valor para ^{6}C, debido a la coherencia; pero la sección para la dispersión de Compton es en gran parte la misma que para ^{6}C, ya que la dispersión de Compton se produce sólo en electrones *esencialmente libres*. En el caso de rayos X de energía baja, esto significa que la dispersión de Compton puede incluir sólo a electrones de energía de enlace relativamente pequeña y se encuentran en las capas externas del átomo. Al aumentar la energía de los rayos X, se tendrá una mayor disponibilidad de electrones atómicos para la dispersión de Compton. Sin embargo, para energías intermedias, la dispersión de Thomson se puede producir todavía por electrones muy ligados en las capas internas —incluso desde el punto de vista cuántico—, porque estos electrones están unidos en forma inseparable a un núcleo de masa grande, y no pueden absorber energía mediante el retroceso, de manera que el cuanto se dispersa sin ningún cambio en la energía o la

www.FreeLibros.me

longitud de onda. Para los rayos X cuya energía es grande en comparación con la energía de enlace de los electrones en las capas más internas del átomo ($\sim 10^5$ ev para ^{92}U), todos los electrones del átomo son básicamente libres desde el punto de vista de las interacciones con los rayos X. En este límite, la única dispersión que puede producirse es la de Compton.

Parece ser que la dependencia de la sección transversal de la dispersión para un átomo típico en la energía de rayos X, sería difícil de calcular en el intervalo de energía que estamos estudiando.* En efecto, se han efectuado cálculos de la sección para la dispersión de Compton, sólo para un electrón totalmente libre. Klein y Nishina son los que efectuaron estos cálculos en 1928, utilizando la teoría relativista de Dirac e incluso, los resultados obtenidos de estos cálculos son complejos. Estos son:

$$\frac{d\sigma_S}{d\Omega} = \frac{d\sigma_T}{d\Omega}\,\frac{1}{1 + 2\alpha \operatorname{sen}^2 \frac{\Theta}{2}}\left\{1 + \frac{4\alpha^2 \operatorname{sen}^4 \frac{\Theta}{2}}{(1 + \cos^2 \Theta)\left(1 + 2\alpha \operatorname{sen}^2 \frac{\Theta}{2}\right)}\right\} \tag{14-36}$$

$$\sigma_S = \sigma_T\left\{\frac{3(1+\alpha)}{4\alpha^2}\left[\frac{2+2\alpha}{1+2\alpha} - \frac{\ln(1+2\alpha)}{\alpha}\right] - \frac{3}{4}\left[\frac{1+3\alpha}{(1+2\alpha)^2} - \frac{\ln(1+2\alpha)}{2\alpha}\right]\right\} \tag{14-37}$$

en donde

$$\alpha \equiv \frac{h\nu}{mc^2} = \frac{h\nu}{0.51 \text{ Mev}} = \frac{\text{energía del cuanto}}{\text{energía del electrón en reposo}}$$

En las figuras 14–16 y 14–17 se muestran las gráficas de las secciones para la dispersión de Compton por un electrón libre, formadas a partir de estas dos ecuaciones. Para la dispersión de Compton de rayos X cuya energía cuántica es grande en comparación con la energía de enlace de los electrones

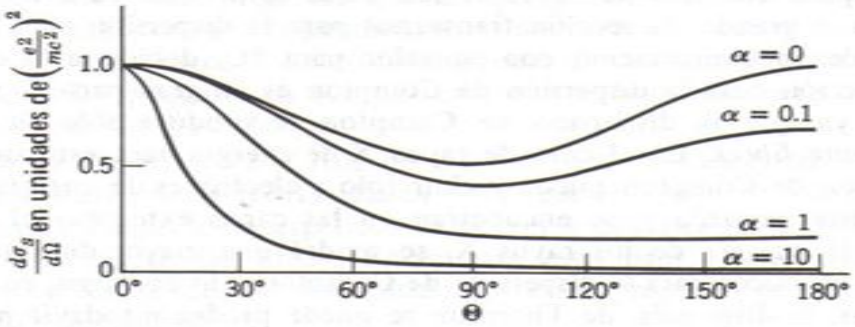

Figura 14-16. Sección diferencial de dispersión de Compton por un electrón libre.

* Sin embargo, se puede medir la sección de la dispersión. En la sección 7 se darán algunos datos adicionales al respecto.

www.FreeLibros.me

en la capa más interna del átomo, se puede obtener un cálculo aproximado de las secciones de dispersión por átomo, estableciendo

$$\frac{d\sigma_{S_a}}{d\Omega} = Z\frac{d\sigma_S}{d\Omega} \tag{14–38}$$

y

$$\sigma_{S_a} = Z\sigma_S \tag{14–39}$$

en donde $d\sigma_S/d\Omega$ y σ_S están dados por las ecuaciones (14–36) y (14–37).

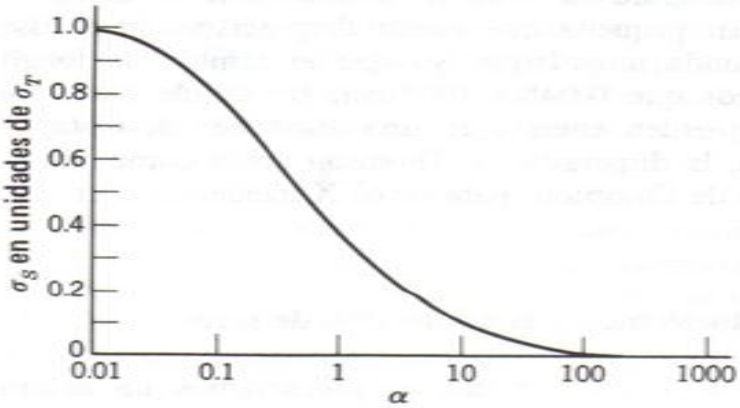

Figura 14-17. Sección de dispersión de Compton por un electrón libre.

Puesto que la dispersión de Compton se describe en función de cuantos, es conveniente que, al analizar este proceso, expresemos las intensidades de los rayos X incidentes y dispersados como flujos de cuantos. Así que, debemos redefinir $\bar{I}$ como el número promedio de cuantos portados por el haz incidente por segundo, a través de un área de 1 cm² normal al haz; redefinir a $\bar{S}$ como el número promedio de cuantos dispersados por segundo en todas las direcciones, y redefinir $\bar{S}(\Theta)$ como el número promedio de los cuantos dispersados por segundo y por unidad de ángulo sólido, en la dirección Θ medido desde la dirección del haz incidente. Estas definiciones difieren de las anteriores sólo por un factor igual a $h\nu$, la energía portada por cuanto. Puesto que, para la dispersión de Thomson, la energía del cuanto dispersado es igual a la del cuanto incidente, todas las ecuaciones que se han dado para la dispersión de Thomson pueden transformarse en expresiones que incluyan las nuevas definiciones, lo cual se hace dividiendo ambos miembros por el factor $h\nu$. Por supuesto, esto no cambia la forma de las ecuaciones, que siguen siendo

$$\bar{S} = \sigma_{S_a}\bar{I} \tag{14–40}$$

$$\bar{S}(\Theta) = \frac{d\sigma_{S_a}}{d\Omega}\bar{I} \tag{14–41}$$

en donde, para la dispersión de Thomson, las secciones tienen exactamente los mismos valores que antes. Para la dispersión de Compton, las secciones del

www.FreeLibros.me

párrafo anterior satisfacen también las ecuaciones (14–40) y (14–41), cuando se usan las nuevas definiciones. En conscuencia, estas nuevas definiciones permiten que todos los procesos de dispersión (y también los de absorción) puedan estudiarse, utilizando el mismo lenguaje y, por esta razón, usaremos exclusivamente estas definiciones u otras equivalentes.

Terminaremos esta sección señalando que las ecuaciones de Klein y Nishina, es decir, las (14–36) y (14–37), muestran que la sección de Compton se reduce a la sección de Thomson de electrón libre, en el límite de energías cuánticas de rayos X muy bajas. Además, la ecuación (3–17) indica que el incremento de longitud de onda en la dispersión de Compton de un electrón libre se hace tan pequeña que puede despreciarse en el caso de rayos X de longitudes de onda muy largas, ya que el cambio de longitud de onda no puede ser mayor que 0.048×10^{-8} cm. De donde los rayos X de energías muy bajas no pierden energía en una dispersión de Compton. Desde ambos puntos de vista, la dispersión de Thomson actúa como límite de energía baja de la dispersión de Compton, para rayos X incidentes a un electrón libre.

6. El efecto fotoeléctrico y la producción de pares

En la sección 7 del capítulo 3, presentamos un análisis elemental del *efecto fotoeléctrico* para la radiación electromagnética en la región de frecuencias ópticas. El lector debe revisar esa sección porque el efecto óptico fotoeléctrico se limita al efecto fotoeléctrico de rayos X a medida que la energía cuántica se hace muy pequeña en comparación con la energía en reposo del electrón, es decir, en el límite $h\nu \ll mc^2$.

En este límite, $h\nu$ puede compararse a la energía de amarre de electrones atómicos de las capas externas; pero es mucho más pequeña que la energía de amarre de los electrones de las capas internas. Así, el efecto óptico fotoeléctrico sólo puede conducir a la emisión de los electrones ópticamente activos. Por el contrario, el efecto fotoeléctrico de rayos X para $h\nu$ muy grande puede llegar a la emisión de cualquier electrón.

La diferencia fundamental entre el efecto fotoeléctrico y el Compton, es que en el primero, un átomo absorbe por completo al cuanto incidente, mientras que en el segundo, el cuanto se dispersa por un electrón esencialmente libre y sufre sólo una reducción en su energía. El lector, como ejercicio, deberá demostrar que, en el efecto Compton, no se puede conservar *tanto* la energía relativista total *como* el impulso, si un electrón esencialmente libre absorbe toda la energía de un cuanto. Por otro lado, la absorción completa del cuanto incidente en el efecto fotoeléctrico no viola la conservación energía-impulso, puesto que, en este proceso, el electrón atómico que participa no es esencialmente libre, sino que, por el contrario, está ligado al núcleo, mediante fuerzas electrostáticas. Esto permite que el núcleo participe en el proceso, retrocediendo para conservar el impulso. Puesto que la masa nuclear es muy grande y $p = \sqrt{2ME}$, el núcleo en retroceso puede adquirir el impulso requerido sin absorber suficiente energía cinética como para afectar en forma notable el equilibrio de energía entre el cuanto y el electrón.

www.FreeLibros.me

Por todo lo expuesto, podemos ver que la probabilidad de una absorción fotoeléctrica en un electrón atómico dado debe aumentar, al reducirse la energía puesto que, para los cuantos de poca energía, el electrón está relativamente más unido al núcleo y, por lo tanto, es más fácil que éste absorba el impulso requerido. Sin embargo, cuando la energía del cuanto se hace menor que la de amarre del electrón, la probabilidad de una absorción fotoeléctrica en este electrón se reduce bruscamente a cero, ya que no habrá suficiente energía disponible para emitir al electrón del átomo. Este comportamiento puede verse en la sección transversal medida para la absorción fotoeléctrica por átomos de ^{82}Pb, que aparece en la figura 14–18. La probabilidad de una absorción fotoeléctrica se expresa en términos de una *sección fotoeléctrica por átomo*, σ_{PE_a}, que se define de modo que $\bar{A}$, el número promedio de cuantos absorbidos por este proceso por segundo y por átomo en un haz de $\bar{I}$ cuantos por segundo por centímetro cuadrado sea:

$$\bar{A} = \sigma_{PE_a} \bar{I} \tag{14–42}$$

Esto es un ejemplo del uso del concepto de sección para describir procesos de absorción. Debido a las razones que acabamos de mencionar, la sección de la absorción fotoeléctrica aumenta rápidamente al reducirse la energía; pero presenta cambios bruscos en las energías iguales a las energías de amarre de los electrones, en cada una de las subcapas del átomo. Estas energías se identifican con las designaciones de subcapas de rayos X que se establecieron en la sección 3. Los datos que se relacionan con energías más bajas que las que se indican en la figura 14–18 demuestran que la sección transversal de la

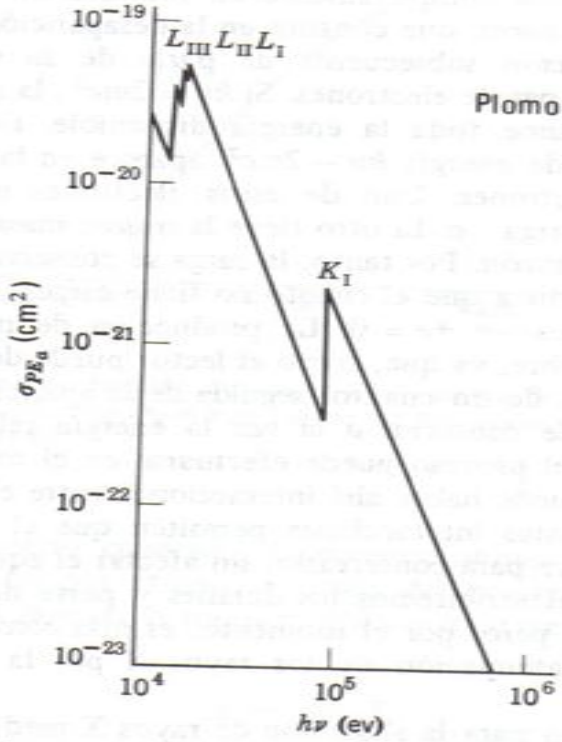

Figura 14-18. Sección de la absorción fotoeléctrica por átomo en el caso del plomo.

www.FreeLibros.me

absorción fotoeléctrica continúa su aumento general, conforme se reduce la energía, excepto por cortes de severidad decreciente en los valores de energías de las subcapas M y N. Estos datos proporcionan una medida directa de las energías de amarre de los electrones en las diversas subcapas de un átomo, y se pueden usar para confirmar o suplementar los valores de energía de amarre obtenidos en un análisis del espectro de líneas de rayos X del átomo.

No podremos calcular, por ahora, la sección para la absorción fotoeléctrica, ya que ese cálculo requiere la teoría de la electrodinámica cuántica. Nos limitaremos a presentar algunos resultados. La sección predicha por átomo para la absorción fotoeléctrica en un *electrón de la capa K*, es

$$\sigma_{PE_a} = \sigma_T 4\sqrt{2}(1/137)^4 Z^5 (mc^2/h\nu)^{7/2} \qquad (14\text{–}43)$$

para $h\nu >$ energía de amarre del electrón K; pero $h\nu < mc^2$. El experimento muestra que, en la región energética indicada, la capa de absorción K representa casi el 90 por ciento de todas las absorciones fotoeléctricas y que la ecuación (14–43) concuerda perfectamente con los datos. La dependencia respecto a Z de σ_{PE_a}, refleja el hecho de que un electrón de la capa K se une con mayor firmeza al núcleo al aumentar Z, de manera que el núcleo tiene mayor facilidad para absorber el impulso que debe absorber en un proceso fotoeléctrico.

Para los rayos X de energías que sobrepasan dos veces la energía en reposo, existe un mecanismo además del efecto fotoeléctrico a través del cual los rayos X pueden absorberse completamente en interacciones con la materia. Este es la *producción de pares*, que consiste en la desaparición completa de un cuanto y la *materialización* subsecuente de parte de su energía $h\nu$ en la energía en reposo de un par de electrones. Si $h\nu = 2mc^2$, la materialización de los dos electrones consume toda la energía disponible. En el caso general $h\nu > 2mc^2$, y el exceso de energía $h\nu - 2mc^2$ aparece en la forma de energía cinética de los dos electrones. Uno de estos electrones es de la variedad normal, con masa m y carga $-e$. El otro tiene la misma masa m, pero su carga es $+e$ y se denomina *positrón*. Por tanto, la carga se conserva en el proceso de producción de par, debido a que el cuanto no tiene carga, y la carga total del electrón y el positrón es $-e + e = 0$. La producción de pares no se puede efectuar en un espacio libre, ya que, como el lector puede demostrar con toda facilidad, la desaparición de un cuanto, seguida de la aparición de un electrón y un positrón, no puede conservar *a la vez* la energía relativista total y el impulso. No obstante, el proceso puede efectuarse en el campo de Coulomb de un átomo, ya que puede haber ahí interacciones entre el par de partículas cargadas y el núcleo. Estas interacciones permiten que el núcleo absorba el momento que se requiere para conservarlo, sin afectar el equilibrio de energía. En la siguiente sección describiremos los detalles y parte de la teoría de este proceso tan interesante; pero, por el momento, es más conveniente completar nuestro estudio de la atenuación de los rayos X por la materia, antes de proseguir con ese tema.

La sección por átomo para la absorción de rayos X mediante el proceso de producción del par, sólo puede calcularse con la ayuda de la teoría de Dirac.

www.FreeLibros.me

Los resultados son:

$$\sigma_{PR_a} = \sigma_T \frac{3}{8\pi} \frac{Z^2}{137} f(\alpha) \tag{14–44}$$

en donde $\alpha \equiv h\nu/mc^2$. La dependencia de Z^2 de la *sección de producción de pares por átomo*, σ_{PR_a}, es una consecuencia del hecho de que la interacción de transferencia de impulso requerida entre el núcleo y el par de partículas cargadas se logra con mayor facilidad en átomos de Z grande. La función $f(\alpha)$ tiene prácticamente la misma forma para todos los átomos. En la figura 14–19 se muestra una gráfica de $f(\alpha)$ para el átomo ^{82}Pb. Esto muestra que σ_{PR_a} aumenta lentamente desde un valor cero en la *energía de umbral* $h\nu = 2mc^2 = 1.02$ Mev, y para $h\nu$, muy grande, se acerca a un valor constante, a medida $f(\alpha)$ tiende a

$$f(\infty) = \frac{28}{9} \ln \frac{183}{Z^{1/3}} - \frac{2}{27} \tag{14–45}$$

No podemos escribir una ecuación para $f(\alpha)$ sola, ya que esta función se obtiene de una integración numérica. En un haz incidente de $\bar{I}$ cuantos por

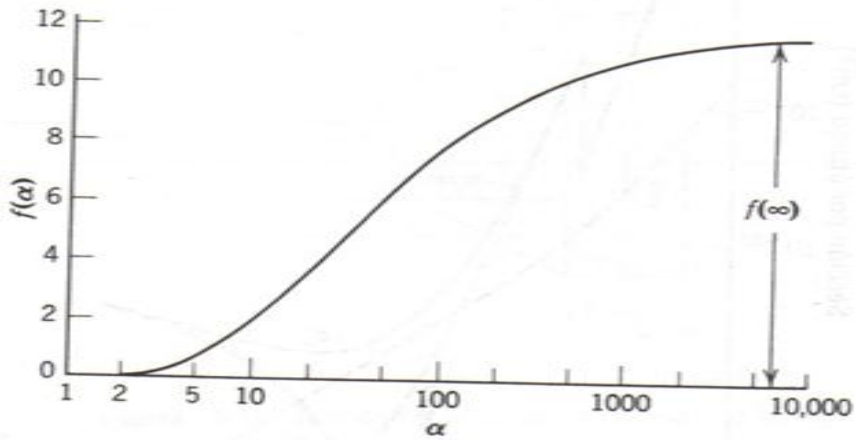

Figura 14-19. Gráfica de una función que surge en la teoría de la producción de pares. De W. Heitler. *The Quantum Theory of Radiation*, Oxford University Press, Londres, 1944.

segundo y por centímetro cuadrado, el número promedio $\bar{A}$ de los cuantos absorbidos por segundo por átomo, a través del proceso de producción de pares, se relaciona con la sección transversal $\bar{I}(x + dx)$, mediante la relación

$$\bar{A} = \sigma_{PR_a} \bar{I} \tag{14–46}$$

www.FreeLibros.me

7. Las secciones totales y el coeficiente de atenuación

Ya hemos visto todos los procesos de dispersión y absorción que contribuyen a la atenuación de un haz de rayos X que atraviesa la materia. Veamos ahora la forma en que estos procesos se combinan para producir la atenuación total observada en un experimento, tal y como el que se describió al principio de la sección 5. El número promedio $\bar{A}$ de los cuantos que se dispersan o absorben por segundo por átomo, en un haz de $\bar{I}$ de cuantos incidentes por segundo por centímetro cuadrado, puede evaluarse sumando las ecuaciones (14–40), (14–42) y (14–46):

$$\bar{A} = \sigma_{S_a}\bar{I} + \sigma_{PE_a}\bar{I} + \sigma_{PR_a}\bar{I} = \sigma_a\bar{I}$$

en donde

$$\sigma_a \equiv \sigma_{S_a} + \sigma_{PE_a} + \sigma_{PR_a} \tag{14–47}$$

La cantidad σ_a se llama sección total por átomo, y especifica la fracción del haz incidente de rayos X que sufre cualquiera de las interacciones atenuantes del haz con un átomo dado. En la figura 14–20 se muestran las secciones

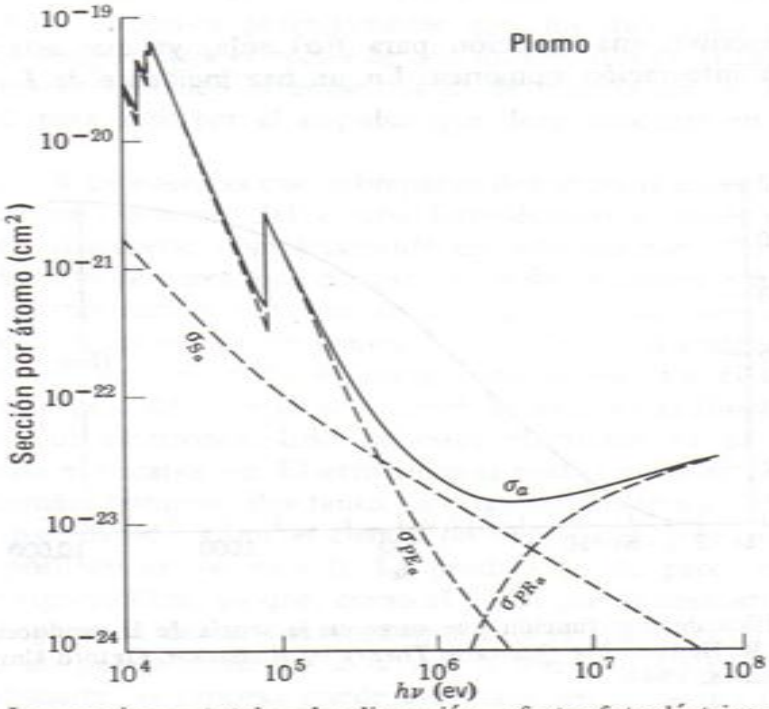

Figura 14-20. Las secciones totales de dispersión, efecto fotoeléctrico y formación de pares por átomo, en el caso del plomo.

transversales σ_{S_a}, σ_{PE_a}, σ_{PR_a}, y σ_a para el átomo de ^{82}Pb. Para el ^{82}Pb, las gamas de energía en las que cada uno de estos tres procesos contribuye mayormente a σ_a, son alrededor de:

Efecto fotoeléctrico: $h\nu < 5 \times 10^5$ ev

Dispersión: 5×10^5 ev $< h\nu < 5 \times 10^6$ ev

Producción de pares: 5×10^6 ev $< h\nu$

www.FreeLibros.me

Debido a las diferentes dependencias en Z que tienen las secciones de estos procesos, las gamas de energía en las que predominan sobre σ_a, son muy diferentes para átomos de número atómico bajo. Para ^{13}Al, estas gamas de energía son, más o menos,

$$\text{Efecto fotoeléctrico:} \quad h\nu < 5 \times 10^4 \text{ ev}$$
$$\text{Dispersión:} \quad 5 \times 10^4 \text{ ev} < h\nu < 1 \times 10^7 \text{ ev}$$
$$\text{Producción de pares:} \quad 1 \times 10^7 \text{ ev} < h\nu$$

Mediante el uso de la sección total por átomo σ_a, calculemos la atenuación total de un haz de rayos X, que atraviesa un papel metálico de espesor t cm y que contiene N átomos por cm^3. Vea la situación que se muestra en la figura 14–21. El flujo (o intensidad) del haz, que es el número promedio de cuantos que atraviesan 1 cm^2 por segundo, disminuye conforme el haz penetra en la lámina. Sea $\bar{I}(x)$ el flujo después de penetrar x cm; entonces, $\bar{I}(0)$ es el flujo incidente, y $\bar{I}(t)$ es el flujo atenuado que sale de la lámina. Sea una

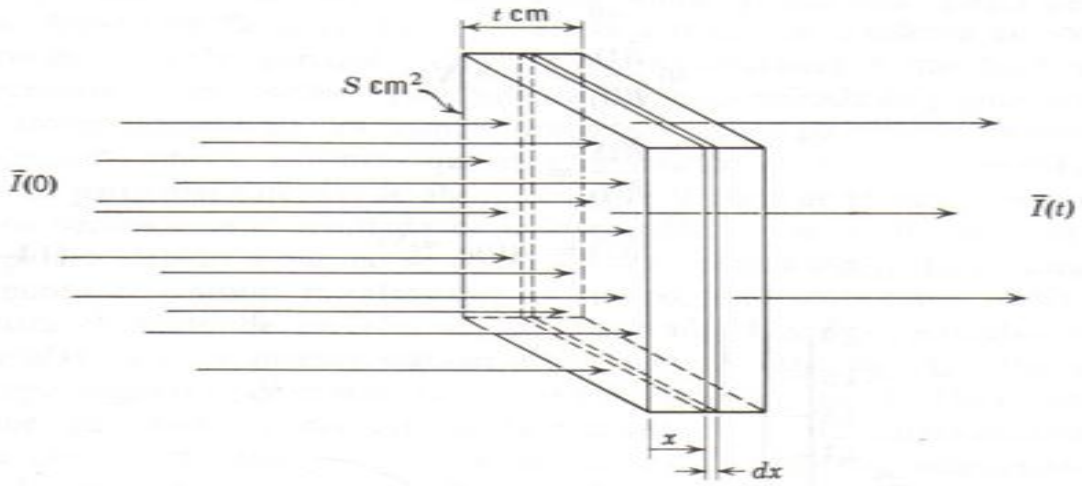

Figura 14-21. Haz de rayos X que atraviesa una lámina.

lámina de espesor dx en x. El número de átomos en la lámina es N veces el volumen de ésta, o sea $NS\,dx$, en donde S es el área de la lámina en centímetros cuadrados. La probabilidad de que *uno* de estos átomos separe un cuanto del haz, es igual a la probabilidad de que el cuanto choque con un disco imaginario cuya área sea σ_a cm^2. Esto es igual a σ_a cm^2/S cm^2, la relación del área del disco con el área de la lámina. La probabilidad neta de que *cualquiera* de los átomos de la lámina absorba un cuanto del haz, es igual a esta relación por el número de átomos, esto es $(\sigma_a/S)NS\,dx = \sigma_a N\,dx$. Puesto que un promedio de $\bar{I}(x)$ cuantos son incidentes en un cm^2 de lámina en un segundo, el número promedio de cuantos del haz que la lámina absorbe

www.FreeLibros.me

por cm² por segundo es $\bar{I}(x)\sigma_a N\,dx$. El número de cuantos por cm² por segundo que salen de la lámina, $\bar{I}(x+dx)$, es igual al número incidente menos la cantidad de cuantos eliminados, de manera que

$$\bar{I}(x+dx) = \bar{I}(x) - \bar{I}(x)\sigma_a N\,dx$$

o bien

$$d\bar{I}(x) \equiv \bar{I}(x+dx) - \bar{I}(x) = -\bar{I}(x)\sigma_a N\,dx \qquad (14\text{-}48)$$

Podemos encontrar $\bar{I}(t)$ mediante la integración de esta expresión en función de x:

$$\frac{d\bar{I}(x)}{\bar{I}(x)} = -\sigma_a N\,dx$$

$$\int_0^t \frac{d\bar{I}(x)}{\bar{I}(x)} = -\sigma_a N \int_0^t dx$$

$$\Big[\ln \bar{I}(x)\Big]_0^t = -\sigma_a N t$$

$$\ln \frac{\bar{I}(t)}{\bar{I}(0)} = -\sigma_a N t$$

$$\frac{\bar{I}(t)}{\bar{I}(0)} = e^{-\sigma_a N t}$$

$$\bar{I}(t) = \bar{I}(0)e^{-\sigma_a N t} \qquad (14\text{-}49)$$

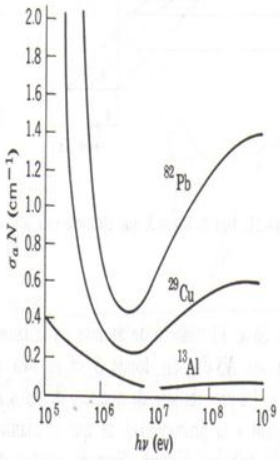

Figura 14-22. Coeficientes de atenuación para varios átomos y una gama de energías.

El flujo del haz atenuado disminuye exponencialmente, al aumentar t. La cantidad $\sigma_a N$, que se denomina *coeficiente de atenuación*, tiene las dimen-

www.FreeLibros.me

siones de cm^{-1} y es la recíproca del espesor de la lámina que se requiere para atenuar el haz en un factor e. El espesor se denomina longitud de atenuación Λ. Es decir,

$$\Lambda = 1/\sigma_a N \tag{14-50}$$

Por supuesto, el coeficiente de atenuación tiene la misma dependencia de energía que la sección total. En la figura 14–22 se muestran los coeficientes de atenuación de ^{82}Pb, ^{50}Sn y ^{13}Al, para rayos X de energía relativamente alta.

8. Los positrones y otras antipartículas

En 1933, Anderson obtuvo las primeras pruebas experimentales sobre el proceso de producción de pares y la existencia de los positrones, mientras investigaba la radiación cósmica. Esta radiación consiste en un flujo de rayos X de energía sumamente alta y partículas cargadas incidentes sobre la Tierra y que provienen de fuentes extraterrestres. Anderson usó una cámara de niebla (un dispositivo lleno de vapor supersaturado que se condensa en los iones formados por las partículas cargadas que lo atraviesan y que hace que sus trayectorias sean visibles), que contenía una placa delgada de plomo, con todo el aparato dentro de un campo magnético. Al exponer este aparato a la radiación cósmica, encontró que muy de cuando en cuando se expulsaba un par de partículas cargadas de algún punto de la placa de plomo. Se supuso que estos hechos eran el resultado de la interacción de un cuanto de rayos X con el plomo, debido a que no se podía ver que chocara una partícula cargada en el punto de emisión, mientras que un cuanto, al no tener carga, podía chocar contra el punto de emisión, sin ser observado. Las dos partículas cargadas emitidas en estos sucesos seguían direcciones opuestas bajo la influencia del campo magnético, de donde, sus cargas eran de signo opuesto. Otras consideraciones permitieron demostrar que las magnitudes de estas cargas eran iguales a una carga electrónica y que sus masas eran, cuando menos, aproximadamente iguales a la de un electrón. Después del descubrimiento de estos primeros *pares de electrón-positrón,* se han podido observar muchísimos otros, en diferentes experimentos. En éstos, se ha establecido con gran exactitud que la masa en reposo, la carga, los spins, el carácter de simetría y el momento magnético del positrón y el electrón son iguales, excepto que los signos de la carga y el momento magnético del positrón son opuestos a los del electrón.

El descubrimiento del proceso de producción de pares explicó el origen de una discrepancia existente entre la teoría aceptada en aquel entonces de la atenuación de los rayos X y los coeficientes de atenuación medidos de varios materiales para rayos X de 2.6 Mev (rayos gamma obtenidos de una fuente radioactiva). Puesto que la teoría original no incluía la producción de pares, los coeficientes de atenuación previstos eran demasiado pequeños; después de incluirse el proceso de producción de pares, se ha encontrado una mayor concordancia entre el experimento y la teoría. Sin embargo, la importancia real del descubrimiento de Anderson residía en la confirmación fehaciente que da respecto a la teoría relativista de Dirac sobre la mecánica cuántica.

www.FreeLibros.me

La teoría de Dirac lleva a la predicción de que los valores permitidos de la energía relativista total E para un electrón libre son:

$$E = \pm\sqrt{c^2p^2 + (mc^2)^2} \tag{14–51}$$

en donde m es la masa del electrón en reposo. Estas son, sencillamente, las soluciones para E de la ecuación (1–25). No obstante, la solución con el signo menos corresponde a una energía relativista total negativa —un concepto tan extraño a la mecánica relativista como lo es una energía total negativa a la mecánica clásica. Dirac no se limitó a desechar la parte negativa de la ecuación (14–51), basándose en el hecho de que no es físicamente posible, sino que, por el contrario, examinó las consecuencias de la ecuación completa, lo cual le llevó a algunas conclusiones muy interesantes. Examine la figura 14–23, que es un diagrama de niveles de energía que representan a la

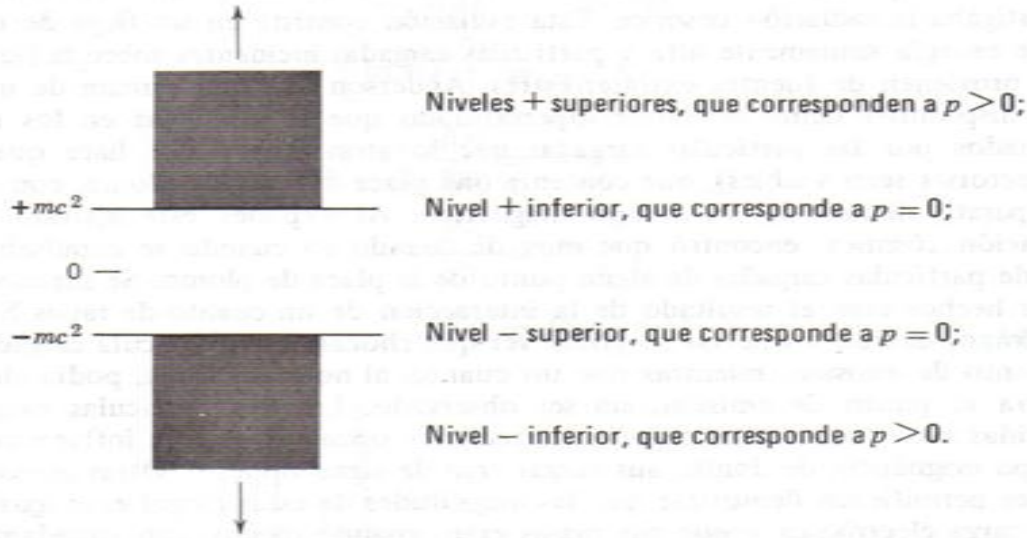

Figura 14-23. Los niveles de energía de un electrón libre, de acuerdo con Dirac.

ecuación (14–51). Si existe el continuo de los niveles de energía negativa indicados, todos los electrones libres de energía positiva deben estar en la posibilidad de efectuar transiciones hacia estos niveles, acompañados de la emisión de cuantos de la energía apropiada. Evidentemente, esto se opone al experimento, porque, por lo general, no se ha observado que los electrones libres emitan en forma espontánea cuantos de energía $h\nu \geqslant 2mc^2$. Sin embargo, Dirac señaló que esta dificultad se puede resolver, suponiendo que todos los niveles negativos de energía están ocupados casi siempre en todos los puntos del espacio. Entonces, el principio de exclusión prohibiría que un electrón libre descendiera a cualquiera de esos niveles. De acuerdo con esta suposición, *un vacío consiste en un mar de electrones en los niveles negativos de energía.* Claro que esto no está en desacuerdo con el experimento. Por ejemplo, la carga negativa no se podría detectar, ya que se supone que está

www.FreeLibros.me

uniformemente distribuida y, por lo tanto, no ejerce ninguna fuerza en un cuerpo cargado. Un razonamiento similar le demostrará al lector que todas las propiedades "normales" de un mar de electrones de energía negativa son tales que su presencia no sería aparente en ninguno de los experimentos "habituales". Sin embargo, la teoría de Dirac del vacío no es del todo inútil, porque predice algunas propiedades nuevas, que pueden comprobarse por medio de experimentos.

El diagrama de niveles de energía de un electrón libre sugiere la posibilidad de excitarlo de un nivel de energía negativa, mediante la absorción de un cuanto. Puesto que todos los niveles de energía negativa se suponen ocupados, el electrón debe excitarse a uno de los niveles desocupados de energía positiva. La energía cuántica mínima que se requiere para este proceso es, evidentemente, $h\nu = 2mc^2$, y el proceso da como resultado la producción de un electrón en un nivel positivo de energía, además de un hueco en uno negativo. A continuación demostraremos que un hueco en un nivel negativo de energía tiene las mismas propiedades que un positrón de energía positiva. En consecuencia, éste es el proceso de producción de pares que observó Anderson experimentalmente, tres años después de que Dirac lo predijera teóricamente.*

Veamos la excitación de un electrón desde un nivel de energía total relativista $-E_1$ a un nivel energía total relativista $+E_2$. La energía del cuanto que se requiere es:

$$h\nu = +E_2 - (-E_1) = E_2 + E_1 \tag{14–52}$$

Si usamos el símbolo e^- para designar al electrón que queda en el nivel $+E_2$, su energía relativista total es:

$$E_{e^-} = E_2$$

y, de acuerdo con las ecuaciones (1–22′) y (1–24), su energía cinética es:

$$T_{e^-} = E_{e^-} - mc^2 \tag{14–53}$$

en donde m es su masa en reposo. Estas relaciones se ilustran en el diagrama de niveles de energía de la figura 14–24. Ahora, se tendrá una energía relativista total positiva que denominaremos E_{e^+}, relacionada con la ausencia de un electrón en el nivel de energía relativista total $-E_1$. La relación entre estas dos cantidades es:

$$E_{e^+} = -(-E_1) = E_1$$

De acuerdo con la figura 14–24, vemos que $-E_1$ puede descomponerse en la siguiente forma:

$$-E_1 = -mc^2 - T_{e^+}$$

* En la sección 6 mencionamos que la conservación del impulso requiere que la producción de pares se produzca en presencia de un núcleo. Sin embargo, la masa del núcleo no afecta al equilibrio de energía, de manera que se puede usar un diagrama de niveles de energía de un electrón libre para describir el proceso.

www.FreeLibros.me

que puede considerarse como una definición de la energía positiva T_{e^+}. De donde

$$E_{e^+} = -(-mc^2 - T_{e^+}) = mc^2 + T_{e^+}$$

o bien,

$$T_{e^+} = E_{e^+} - mc^2 \tag{14-54}$$

Si comparamos esta ecuación con la (14–53), podemos identificar T_{e^+} como la energía cinética y mc^2 como la energía positiva de masa en reposo. Entonces, tenemos una energía relativista total positiva E_{e^+}, una energía cinética positiva T_{e^+} y una masa positiva en reposo m, relacionada con el

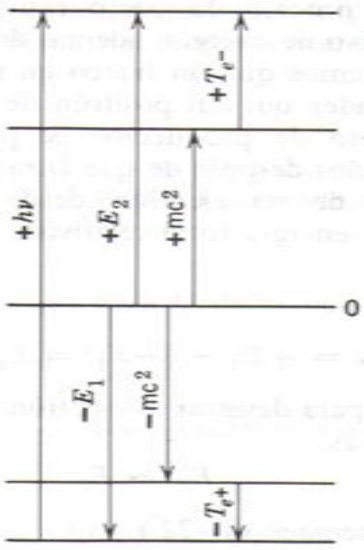

Figura 14-24. Diagrama de niveles de energía que ilustran la producción de pares.

hueco en un nivel negativo de energía. Por tanto, el hueco tiene todas las propiedades mecánicas (masa en reposo, inercia, etc.) de una partícula de masa en reposo igual a una masa electrónica. Es claro que se tendrá una carga positiva $+e$ relacionada con la ausencia de un electrón de carga $-e$. También hay un impulso angular de spin y un momento magnético relacionado con la ausencia de un electrón en un nivel de energía previamente lleno. La magnitud del impulso angular de spin es la misma que la de un nivel que contiene sólo un electrón (vea la nota al pie de la página 472). El momento magnético es de la misma magnitud que el de un electrón; pero el signo es opuesto, porque la carga relacionada con el hueco es opuesta a la de un electrón. Podemos ver que en todos los aspectos, las propiedades relacionadas con un hueco en un nivel negativo de energía, son idénticas a las propiedades de un positrón, que designamos con el signo e^+, observadas experimentalmente.

El positrón es una partícula completamente estable, siempre y cuando se mantenga alejada de los electrones; sin embargo, un positrón que pasa a través

www.FreeLibros.me

de la materia chocará eventualmente con un electrón y las dos partículas se *aniquilarán*. De acuerdo con la teoría de Dirac, podemos considerar que esta es una transición en la que el electrón desciende al hueco que constituye el positrón, emitiendo la energía liberada en la forma de cuantos. La aniquilación se produce normalmente cuando el positrón se desplaza muy lentamente, ya que, entonces, la probabilidad de chocar con un electrón es mucho mayor. Si la aniquilación ocurre con un electrón libre, deben emitirse dos cuantos en direcciones opuestas, a fin de conservar el impulso. Si el electrón está enlazado a un núcleo, se puede producir la aniquilación con la emisión de sólo un cuanto. El tiempo promedio requerido para que un positrón lento se aniquile en ^{82}Pb es $\sim 10^{-10}$ seg.

El electrón y el positrón son sólo un ejemplo de una *partícula* y su *antipartícula*. La teoría ha predicho la existencia de varios otros ejemplos, que se han verificado experimentalmente. Por ejemplo, el *antiprotón*, una partícula de carga $-e$ y cuya masa es igual a la masa del protón M, fue observado por Segre y sus colaboradores, en 1955. Puesto que la energía en reposo del protón $Mc^2 = 931$ Mev es muy grande, se pueden generar antiprotones sólo en la radiación cósmica o en aceleradores de partículas de alta energía. El experimento de Segre produjo antiprotones en colisión entre protones estacionarios y protones con energía cinética de 6200 Mev, en un gran acelerador de partículas.

BIBLIOGRAFIA

Compton, A. H. y S. K. Allison, *X-rays in Theory and Experiment*, D. Van Nostrand Co., Princeton, N.J., 1935.

Evans, R. D., *The Atomic Nucleus*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

Ritchtmyer, F. K., E. H. Kennard y T. Lauritsen, *Introduction to Modern Physics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

EJERCICIOS

1. Verifique la ecuación (14–24).

2. Verifique la ecuación (14–28).

3. Demuestre que un electrón libre no puede absorber toda la energía de un cuanto, como se estableció en la sección 6.

4. Demuestre que la producción de pares no se puede efectuar en un espacio libre, como se indicó en la sección 6.

5. Con los datos de la figura 14–20 como base, calcule el espesor de Pb requerido para atenuar un haz de rayos X de 10^4 ev en un factor de 100.

6. Demuestre que la longitud de atenuación Λ es sólo igual a la distancia promedio que un cuanto recorre, antes de ser dispersado o absorbido.

7. Un positrón de movimiento lento se desplaza a través de la materia y puede ser capturado por un electrón libre, formando un sistema semejante al atómico, de existencia transitoria, denominado *positronio*. Evalúe el espectro de la radiación electromagnética que se emite en los procesos de este tipo.

www.FreeLibros.me

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 15

Teoría de las colisiones

1. Introducción

Hemos hecho una exposición bastante completa del átomo en función de la teoría cuántica del movimiento de partículas ligadas en un potencial, ya que la mayor parte de los conocimientos que se tienen respecto a los átomos se han derivado de la interpretación de medidas experimentales de los espectros que emiten, en función de los niveles de energía de sus electrones atómicos ligados. En el caso del núcleo no sucede lo mismo. Desde un principio, la comprensión de sus propiedades se ha derivado mayormente de la interpretación de los resultados de experimentos en los que partículas no ligadas chocan con núcleos. Por ejemplo, el lector recordará que el descubrimiento mismo del núcleo se obtuvo de los experimentos de dispersión de partículas alfa. Como preparación a nuestro estudio del núcleo, es conveniente extender a tres dimensiones la teoría de la mecánica cuántica de la colisión de una partícula no ligada con un potencial.*

En el capítulo anterior describimos los procesos que se registran en el choque de cuantos electromagnéticos con átomos. Es posible que el lector no quedara del todo satisfecho con esta descripción, ya que lo único que hicimos fue, casi siempre, indicar sólo los resultados. No es posible hacer un análisis riguroso de la dispersión y la absorción de los cuantos al nivel de este libro, ya que requieren la introducción de la electrodinámica cuántica y la mecánica cuántica relativista. Sin embargo, en este capítulo, estudiaremos sólo la dispersión y la absorción de *partículas* y haremos caso omiso del spin y otros efectos relativistas, lo cual será adecuado para la mayoría de nuestros análisis del núcleo y nos permitirá resolver el problema rigurosamente mediante la teoría, ya conocida, de Schrödinger. En primer lugar veremos la dispersión. Después de ciertos preliminares haremos un análisis aproximado de este proceso y, luego, expondremos el exacto. Por último, nos ocuparemos de la absorción.

* Las colisiones en una dimensión se trataron en las primeras secciones del capítulo 8.

www.FreeLibros.me

2. Transformaciones de laboratorio y centro de masa

Al trabajar con la ecuación de Schrödinger para un sistema de dos partículas de masas m_1 y m_2, que interactúan entre sí a través de una energía potencial mutua $V(r)$, hemos descubierto que el problema se puede reducir de uno que involucra seis coordenadas espaciales a otro de sólo tres, efectuando una transformación a un marco de referencia en el que el centro de masa del sistema está en reposo. Dentro de este marco del *centro de masa* (CM), el sistema se puede describir en términos del movimiento de una sola partícula ficticia de masa reducida:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{15–1}$$

que interactúa con un centro de fuerza fijo en el origen. La distancia r desde esta partícula al origen es igual a la separación de las dos partículas de masa m_1 y m_2 y la energía potencial $V(r)$ de la partícula ficticia es igual a la energía potencial mutua de las dos partículas. Más aún, la energía total (y la cinética) de la partícula ficticia que se encuentra en el marco del CM es igual a la energía total (y la cinética) en el marco del sistema de dos partículas.* En el marco del CM, el sistema obtenido mediante la substitución de una de las partículas por una de masa μ y reemplazando la otra con una partícula de masa tan grande que debe permanecer fija en el origen, pero que, de otra manera, no efectúa cambios en el sistema o en las ecuaciones que gobiernan su comportamiento, es perfectamente equivalente al sistema original. Es mucho más fácil trabajar con el sistema equivalente, debido a que una de sus partículas permanece fija y, en consecuencia, puede hacerse caso omiso de ella, excepto como fuente del potencial $V(r)$.

Ahora, al evaluar los niveles de energía para un sistema de este tipo, no tendremos que preocuparnos por el hecho de que el marco del CM se mueve por lo general, ya que este movimiento sólo contribuye al sistema con una energía cinética de translación, constante, no cuantizada que no afecta las diferencias de energía observadas en las mediciones de los espectros. No obstante, al resolver problemas de dispersión, no podemos pasar por alto el movimiento del marco del CM, puesto que afecta los ángulos y las secciones transversales de dispersión observados. En casi todos los experimentos estas cantidades se miden en un marco de referencia llamado marco de *laboratorio* (LAB), que se mueve con respecto al marco del CM. La razón es que, en casi todos los experimentos de dispersión, una de las partículas y no el centro de masa, es la que se encuentra inicialmente estacionaria en el laboratorio. Ahora desarrollaremos las relaciones entre la descripción de un proceso de dispersión en estos dos marcos. Al hacer esto, trataremos con vectores de impulso de magnitudes y direcciones precisas; sin embargo, puesto que no es necesario especificar la ubicación de las partículas, esto no violará el principio de incertidumbre.

* Vea la sección 2, capítulo 10, y la sección 4, capítulo 5.

www.FreeLibros.me

Supongamos que la partícula de masa m_2 se encuentra estacionaria originalmente en el marco del LAB y que la velocidad inicial de m_1 con respecto a m_2 es $\mathbf{v}_{1L}$, como se indica en la figura 15–1. Después de producirse el choque, m_1 se desplaza con una velocidad $\mathbf{v}_{1L}$ con ángulo de dispersión θ_L en

Figura 15-1. Colisión entre dos partículas, vista desde el marco LAB.

el marco LAB, medido desde su dirección inicial de movimiento, y m_2 retrocede en alguna dirección, a cierta velocidad. En el marco del CM este proceso tiene el aspecto diferente que se muestra en la figura 15–2, ya que este marco se mueve a la velocidad $\mathbf{V}$ con respecto al marco LAB. Si diferenciamos las ecuaciones (5–16) con respecto al tiempo, y multiplicamos cada una de las velocidades resultantes por la masa de su partícula correspondiente, es fácil ver que en el marco del CM, el momento total debe anularse.*

Figura 15-2. Colisión entre dos partículas, vista desde el marco del CM.

De donde los vectores de impulso de m_1 y m_2 deben ser siempre iguales y opuestos en este marco. Además, las magnitudes de los momentos no pueden cambiar, porque la energía se conserva. En consecuencia, el resultado de una colisión es, sencillamente, efectuar una rotación de la línea a lo largo de la cual se dirigen estos vectores por el ángulo de dispersión del CM θ_C, sin cambiar sus magnitudes. De donde,

$$v'_{1C} = v_{1C}, \qquad v'_{2C} = v_{2C} \tag{15–2}$$

Podemos obtener una descripción equivalente del proceso en el marco del CM, substituyendo m_1 por μ, siendo la velocidad inicial de μ igual a la velocidad relativa de las dos partículas (debido a que la distancia desde μ hasta el origen

* Esto es también cierto relativísticamente. Vea el ejercicio 8, capítulo 1.

www.FreeLibros.me

es siempre igual a la distancia entre m_1 y m_2, y dejando que $m_2 \to \infty$. Esto se indica en la figura 15–3. Tenemos que,

$$v_{\mu C} = v_{1L} \tag{15–3}$$

y es evidente que,

$$v'_{\mu C} = v_{\mu C} \tag{15–4}$$

Figura 15-3. Descripción equivalente de un choque entre dos partículas, vista desde el marco del CM.

Para determinar el valor de V, la velocidad del marco del CM con respecto al del LAB, recurrimos a las ecuaciones clásicas de transformación de velocidad:

$$v_{1C} = v_{1L} - V, \qquad v_{2C} = V \tag{15–5}$$

Su uso, así como el de masas independientes de la velocidad, se justifica porque no se trata de problemas relativistas. Ahora, la condición de que el impulso total desaparezca en el marco del CM, es:

$$m_1 v_{1C} = m_2 v_{2C} \tag{15–6}$$

Esto es,

$$m_1(v_{1L} - V) = m_2 V$$
$$m_1 v_{1L} = (m_1 + m_2)V$$

o bien,

$$V = \frac{m_1}{m_1 + m_2} v_{1L} \tag{15–7}$$

Para encontrar la relación entre θ_C y θ_L, transformemos la velocidad de m_1 después de la colisión, del marco del CM al del LAB. La forma vectorial de la ecuación clásica de transformación de la velocidad que usamos, es:

$$\mathbf{v}'_{1L} = \mathbf{V} + \mathbf{v}'_{1C} \tag{15–8}$$

Esto se ilustra en la figura 15–4. Si tomamos las componentes transversales tenemos que:

$$v'_{1L} \operatorname{sen} \theta_L = v'_{1C} \operatorname{sen} \theta_C \tag{15–9}$$

www.FreeLibros.me

Las componentes longitudinales nos dan:

$$v'_{1L} \cos \theta_L = V + v'_{1C} \cos \theta_C \tag{15–10}$$

Al dividir la ecuación (15–9) entre la (15–10), encontramos que:

$$\tan \theta_L = \frac{v'_{1C} \operatorname{sen} \theta_C}{V + v'_{1C} \cos \theta_C} = \frac{\operatorname{sen} \theta_C}{V/v'_{1C} + \cos \theta_C}$$

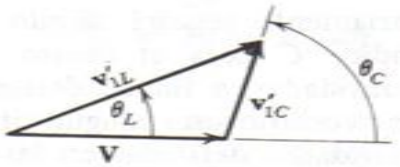

Figura 15-4. Ilustración de la transformación de un vector de velocidad del marco del CM al del LAB.

Sin embargo,

$$V = v_{2C} = \frac{m_1}{m_2} v_{1C} = \frac{m_1}{m_2} v'_{1C}$$

o bien,

$$V/v'_{1C} = m_1/m_2$$

De donde,

$$\tan \theta_L = \frac{\operatorname{sen} \theta_C}{m_1/m_2 + \cos \theta_C} \tag{15–11}$$

Ahora encontraremos las relaciones entre las secciones de dispersión y las secciones diferenciales de dispersión para los dos sistemas de coordenadas de referencia. Las definiciones de las secciones y de los flujos incidente y disperso pueden adaptarse directamente de las ecuaciones (14–40) y (14–41) y de las definiciones que preceden inmediatamente a esas ecuaciones, si volvemos a expresarlas en función de una sola partícula incidente, en lugar de muchos cuantos incidentes. Es decir, definimos el flujo incidente I como la probabilidad por segundo de que la partícula incidente sea portada por el haz a través de un área de 1 cm² que es normal a la dirección del haz y definimos también a los flujos dispersados S y $S(\theta)$ como la probabilidad por segundo de que la partícula incidente sea dispersada en cualquier ángulo, y la probabilidad por segundo de que sea dispersada hacia una unidad de ángulo sólido en un ángulo θ a partir de la dirección del haz incidente, respectivamente. Estas cantidades

www.FreeLibros.me

se relacionan mediante la sección de dispersión σ y la sección diferencial de dispersión $d\sigma/d\Omega$ como sigue:

$$S = \sigma I \tag{15-12}$$

$$S(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} I \tag{15-13}$$

En este contexto, podemos simplificar la notación, discontinuando el uso de la barra que indica un promedio y el subíndice S de la dispersión. Podemos dejar de usar también el subíndice a que indica las secciones transversales por átomo, ya que no necesariamente seguirá siendo apropiado. Sin embargo, debemos agregar el subíndice C para el centro de masa, o bien L para laboratorio, a todas esas cantidades, a fin de designar el marco de referencia en el que se definen. No es necesario usar ningún otro símbolo para establecer una distinción entre las cantidades definidas en las dos descripciones alternativas de marcos del CM del proceso de dispersión, ya que, a partir de ahora, nos ocuparemos sólo de la descripción de una partícula de masa μ, dispersada por el potencial $V(r)$, relacionado con el centro de fuerza que está fijo en el origen. De acuerdo con la teoría de Schrödinger, calcularemos las secciones transversales de dispersión para esta descripción en el marco del CM. Después, podemos transformar estas secciones transversales al marco del LAB, para compararlas con el experimento, señalando que la probabilidad por segundo de que la partícula incidente sea dispersada, debe ser la misma, ya sea que se mida en el marco del CM o en el del LAB. Esto es,

$$S_L = S_C$$

Usando la ecuación (15–12), esto se convierte en

$$\sigma_L I_L = \sigma_C I_C$$

Sin embargo,

$$I_L = I_C \tag{15-14}$$

ya que el movimiento de la partícula μ en relación con el origen, antes de la dispersión (que determina a I_C) es idéntico al movimiento de la partícula m_1 en relación con la m_2, antes de la dispersión (que determina a I_L)

$$\sigma_L = \sigma_C \tag{15-15}$$

De la misma manera, la probabilidad por segundo para que se disperse la partícula incidente en el ángulo sólido $d\Omega_L$, medido en el marco del LAB, debe ser la misma que la probabilidad por segundo de que dicha partícula se disperse en el ángulo sólido $d\Omega_C$, medido en el marco del CM, cuando los dos ángulos sólidos corresponden al mismo intervalo de ángulo sólido. Es decir,

$$S_L(\theta_L)\, d\Omega_L = S_C(\theta_C)\, d\Omega_C$$

esto es

$$\frac{d\sigma_L}{d\Omega_L} I_L\, d\Omega_L = \frac{d\sigma_C}{d\Omega_C} I_C\, d\Omega_C$$

www.FreeLibros.me

y

$$\frac{d\sigma_L}{d\Omega_L} = \frac{d\sigma_C}{d\Omega_C}\frac{d\Omega_C}{d\Omega_L}$$

Esto se puede obtener también, derivando formalmente la ecuación (15–15). Los elementos del ángulo sólido se evaluaron en la ecuación (14–25) y son:

$$d\Omega_C = 2\pi \operatorname{sen}\theta_C\, d\theta_C$$

y

$$d\Omega_L = 2\pi \operatorname{sen}\theta_L\, d\theta_L$$

de manera que

$$\frac{d\Omega_C}{d\Omega_L} = \frac{\operatorname{sen}\theta_C}{\operatorname{sen}\theta_L}\frac{d\theta_C}{d\theta_L} \tag{15–16}$$

Como ejercicio, el lector debe usar la ecuación (15–11) para evaluar la (15–16) y obtener

$$\frac{d\sigma_L}{d\Omega_L} = \frac{d\sigma_C}{d\Omega_C}\frac{[1 + (m_1/m_2)^2 + 2(m_1/m_2)\cos\theta_C]^{3/2}}{1 + (m_1/m_2)\cos\theta_C} \tag{15–17}$$

3. La aproximación de Born

En esta sección desarrollaremos un método, propuesto por Born, para calcular los valores aproximados de $d\sigma/d\Omega$ y σ. (En este caso, se sobreentiende el subíndice C y en lo que resta del capítulo, todas las secciones transversales se definen en el marco del CM.) El primer paso es hacer una descripción cuántica del movimiento de una partícula del haz incidente. La ecuación (8–4) y la explicación que damos a continuación demuestran que, en una dimensión, una función propia que describe una partícula libre de masa μ que se desplaza con la velocidad v en la dirección positiva a lo largo de un eje, que en este caso llamaremos eje z, es

$$\psi(z) = Ae^{iKz} \tag{15–18}$$

en donde

$$K = 2\pi/\lambda = 2\pi p/h = \mu v/\hbar \tag{15–18'}$$

en donde A es una constante. El lector puede demostrar, por medio de substituciones, que la función propia (15–18) es también una solución a la ecuación tridimensional de Schrödinger, independiente del tiempo, para una partícula libre,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right] = E\psi \tag{15–19}$$

www.FreeLibros.me

en donde

$$E = p^2/2\mu = \hbar^2 K^2/2\mu \tag{15–19'}$$

En tres dimensiones, la ecuación (15–18) describe una partícula de la que se sabe con toda certeza que se desplaza paralelamente al eje z a una velocidad v, cuyas coordenadas x y y se desconocen por completo, ya que $\psi^*(z)\psi(z)$ es evidentemente independiente de x y y, y cuya coordenada z se desconoce también del todo, ya que,

$$\psi^*(z)\,\psi(z) = A^* e^{-iKz} A e^{iKz} = A^* A \tag{15–20}$$

Así, la partícula se mueve en algún punto de un haz de dimensiones transversales y longitudinales infinitas, con una dirección paralela al eje z. Por supuesto, esto no es físicamente real, ya que la dimensión transversal de todos los haces está siempre limitada por medio de diafragmas de abertura finita, y en su dimensión longitudinal, mediante la longitud finita del aparato. Por otro lado, las dimensiones del haz real son extremadamente grandes, en comparación con las dimensiones atómicas o nucleares. Por tanto, la ecuación (15–18) proporciona una descripción exacta de la partícula incidente en la región de importancia, en donde el potencial atómico o nuclear que produce la dispersión tiene un valor apreciable.

Sin embargo, los aspectos no realistas de la ecuación (15–18) constituyen el origen de ciertos problemas concernientes a la normalización de la función propia. En la sección 1 del capítulo 8, demostramos que estos problemas se pueden resolver siempre y que, por lo general, se puede hacer caso omiso de ellos. El cálculo de que nos ocupamos ahora proporciona un ejemplo de un caso en el que no pueden ignorarse; debemos usar una extensión tridimensional de una técnica de normalización de caja con condiciones periódicas a la frontera. Sea

$$A = L^{-3/2} \tag{15–21}$$

en donde L es la longitud del lado de una caja cúbica muy grande, que rodea a la región del potencial de dispersión, y restringimos el rango de variación de las variables espaciales de tal forma que queden dentro de la caja. Entonces, la función propia se normaliza, debido a que

$$\psi^*\psi = A^* A = A^2 = L^{-3} \tag{15–22}$$

y

$$\int \psi^*\psi\, d\tau = L^{-3}\int d\tau = L^{-3}L^3 = 1$$

en donde $d\tau$ es el elemento de volumen y la integración se efectúa sólo sobre el volumen de la caja. Además, requerimos que la función propia y su derivada espacial en la dirección normal a la pared tengan los mismos valores en los puntos correspondientes de las paredes opuestas de la caja. La parte real (o imaginaria) de ψ tendría entonces el mismo comportamiento que se describe gráficamente en la figura 15–5 como función de una de las variables espaciales, haciendo que las otras dos sean constantes. Si se utilizan condiciones

www.FreeLibros.me

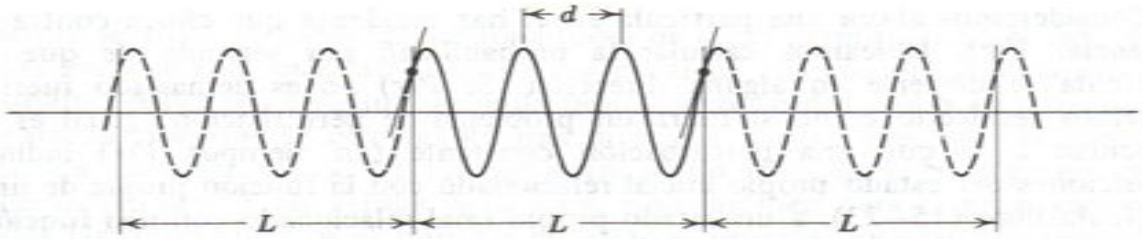

Figura 15-5. La dependencia espacial de la parte real de una función propia normalizada en una caja, con condiciones periódicas a la frontera.

periódicas a la frontera, la función propia será totalmente periódica, con un período L, en las tres direcciones. Su comportamiento se repite en forma indefinida en las cajas adyacentes (tal y como se observaría una escena dentro de un cubo con paredes de espejo que se repitieran también indefinidamente) y estamos en lo correcto al tomar en consideración sólo lo que sucede dentro de una caja, es decir, al restringir los rangos de variación de las variables a la caja misma.*

En la mayoría de los casos de interés físico, el potencial de dispersión es una función esféricamente simétrica, $V(r)$. Suponemos que esto es verdad, a pesar de que no es una restricción necesaria. En consecuencia, es evidente que conviene describir la partícula incidente en función de las coordenadas esféricas r, θ, ϕ en lugar de las coordenadas rectangulares x, y y z. Podemos definir el origen en el centro del potencial y al eje polar, a lo largo del eje z. Esto significa que

$$z = r\cos\theta$$

y ψ de una partícula libre del haz incidente puede expresarse como:

$$\psi = L^{-3/2}e^{iKz} = L^{-3/2}e^{iKr\cos\theta} = L^{-3/2}e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \tag{15–23}$$

en donde $\mathbf{K}$ es un vector de magnitud K dirigida a lo largo de la dirección del haz, que es la dirección del eje z y en donde $\mathbf{r}$ es un vector desde el origen hasta el punto (r, θ, ϕ). De acuerdo con esto, la función propia normalizada de una partícula libre que se desplaza en alguna otra dirección, se puede escribir:

$$\psi = L^{-3/2}e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}} \tag{15–24}$$

en donde $\mathbf{K}'$ es un vector en la dirección de movimiento, cuya magnitud es igual al valor de K' apropiado para la masa y la velocidad reducidas de la partícula. La validez de la ecuación (15–24) se puede verificar utilizando los mismos argumentos que se emplearon para la (15–23).

* Otra consideración, que sirve para justificar la normalización de caja con condiciones periódicas a la frontera, es que el conjunto de funciones propias que satisfacen esas condiciones, forman un conjunto completo de funciones ortogonales en términos de las que casi cualquier función puede desarrollarse. Vea la sección 1, capítulo 8.

www.FreeLibros.me

Consideremos ahora una partícula en el haz incidente que choca contra el potencial $V(r)$. Deseamos calcular la probabilidad por segundo de que la partícula se disperse en alguna dirección. Si $V(r)$ no es demasiado fuerte, podemos resolverlo como si fuera un problema de perturbación: ¿cuál es la velocidad a la que una perturbación constante (en tiempo) $V(r)$ induce transiciones del estado propio inicial relacionado con la función propia de una partícula libre (15–23), a un estado propio final relacionado con una función propia de partícula libre (15–24)? Puesto que el estado propio final se encuentra en un rango básicamente continuo de estados propios finales, debido a que los valores propios posibles $E' = \hbar^2 K'^2/2\mu$ están distribuidos casi continuamente, incluso con una normalización de caja, la respuesta se da, en forma aproximada, mediante la extensión tridimensional de la Regla de Oro N.° 2 (ecuación (9–45). Esto es,

$$R_{\mathbf{K}} \simeq \frac{2\pi}{\hbar} v^*_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} v_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} \rho_{\mathbf{K}'} \tag{15–25}$$

en donde hemos usado los vectores $\mathbf{K}$ y $\mathbf{K}'$, en lugar de los números cuánticos, para indicar el estado inicial y el final, y en donde $v_{\mathbf{K}'\mathbf{K}}$ es el elemento de matriz del potencial tomado entre estos dos estados. Es decir,

$$v_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} \equiv \int (L^{-3/2} e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}})^* V(r) L^{-3/2} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}\, d\tau = L^{-3} \int V(r) e^{i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\cdot\mathbf{r}}\, d\tau = L^{-3} V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} \tag{15–25'}$$

siendo

$$V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} \equiv \int V(r) e^{i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\cdot\mathbf{r}}\, d\tau$$

La cantidad $\rho_{\mathbf{K}'}$ de la ecuación (15–25) es la cantidad de estados propios posibles por unidad de intervalo de energía para la partícula asociada con la función propia final. Puesto que utilizamos la normalización de caja con condiciones periódicas a la frontera (requerida debido a que las funciones propias que aparecen en $v_{\mathbf{K}'\mathbf{K}}$ deben normalizarse), la densidad de los estados finales $\rho_{\mathbf{K}'}$ tendrán un valor finito, ya que las condiciones imponen restricciones en las posibles longitudes de onda de De Broglie. Como ejemplo, veamos $\mathbf{K}'$ que es paralelo a una arista de la caja. Entonces, la parte real (o imaginaria) de ψ tendría típicamente el aspecto que se ilustra en la figura 15–5, siendo la distancia d igual a la longitud de onda de De Broglie $\lambda' = 2\pi/K'$. Las condiciones periódicas a la frontera se pueden satisfacer para una propagación paralela a una de las aristas de la caja, sólo si L contiene exactamente un número entero de longitudes de onda de las ondas en movimiento. Compare este caso con el de las funciones propias de una onda estacionaria de una partícula libre, dentro de una caja con paredes impenetrables, que se analizó en la sección 6 del capítulo 12. En ese caso, las condiciones requieren que ψ tenga nodos en las paredes de la caja. Para la dirección de propagación que es paralela a una arista de la caja, la condición se puede satisfacer si L contiene ya sea un número entero de longitudes de onda o bien un número semientero de longitudes de onda. En consecuencia, en cada longitud de onda o intervalo de

www.FreeLibros.me

energía se tiene el doble de las longitudes de onda permitidas en el caso de la onda estacionaria, que las que se tiene en el de la onda en movimiento. No obstante, para cada longitud de onda posible existen dos ondas en movimiento separadas, una que se propaga en una dirección y otra que sigue la dirección opuesta. Los factores de 2 se anulan entre sí, no sólo para la propagación en dirección paralela a las aristas de la caja, sino también para la propagación en todas las direcciones, y el número de estados propios posibles por unidad de intervalo de energía es, por lo tanto, el mismo en ambos casos. Por esta razón podemos usar la ecuación (12–37) que, en la notación que estamos usando, será:

$$\rho_{K'}\, dE' = \frac{\mu^{3/2} L^3 E'^{1/2}\, dE'}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3} \tag{15–26}$$

en donde

$$L^3 = V, \quad \text{el volumen de la caja}$$

y

$$E' = \hbar^2 K'^2/2\mu$$

De donde,

$$\rho_{K'} = \frac{\mu^{3/2} L^3}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\,\frac{\hbar K'}{2^{1/2}\mu^{1/2}} = \frac{\mu L^3 K'}{2\pi^2\hbar^2} \tag{15–27}$$

Esto no es precisamente lo que deseamos, porque se trata de la densidad de dos estados asociados con $\mathbf{K}'$, mientras que lo que buscamos es $\rho_{\mathbf{K}'}$, la densidad de estados asociados con $\mathbf{K}'$, cuando este vector se localiza dentro de cierto rango de direcciones. Ahora, es evidente que para el potencial esféricamente simétrico $V(r)$, la distribución angular de dispersión no dependerá del ángulo azimutal ϕ. En consecuencia, es correcto considerar juntos los estados finales relacionados con vectores $\mathbf{K}'$, cuya dirección queda en cualquier lugar comprendido dentro del intervalo angular de θ a $\theta + d\theta$. La densidad $\rho_{\mathbf{K}'}$ de estos estados es menor que $\rho_{K'}$ en un factor igual a la relación del ángulo sólido $d\Omega = 2\pi \operatorname{sen}\theta\, d\theta$ contenido dentro del intervalo θ a $\theta + d\theta$, y el ángulo sólido total 4π, contenido dentro del intervalo entero de θ. Es decir,

$$\rho_{\mathbf{K}'} = \frac{d\Omega}{4\pi}\,\rho_{K'}$$

de manera que,

$$\rho_{\mathbf{K}'} = \frac{\mu L^3 K'}{8\pi^3\hbar^2}\, d\Omega \tag{15–28}$$

Si usamos esto en la ecuación (15–25), tenemos que:

$$R_{\mathbf{K}} \simeq \frac{2\pi}{\hbar}\, L^{-6} V^*_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} \frac{\mu L^3 K'\, d\Omega}{8\pi^3\hbar^2} \tag{15–29}$$

www.FreeLibros.me

Ahora, calcularemos la probabilidad por segundo de que la partícula en el estado propio inicial relacionado con el vector **K**, atravesará un área de un centímetro cuadrado, normal a la dirección de **K**. Este es el flujo incidente I y se puede evaluar como se hizo en los pasos que preceden a la ecuación (8–7), usando la extensión tridimensional de la definición (7–31) del flujo de probabilidad. En forma alternativa, podemos usar la ecuación (8–8) e igualar I al producto de la velocidad de la partícula y la densidad de probabilidad. Es decir,

$$I = v\psi^*\psi \tag{15–30}$$

Con las ecuaciones (15-18′) y (15–22), esto se convierte en

$$I = \frac{K\hbar}{\mu} L^{-3} \tag{15–31}$$

A continuación, divida $R_{\mathbf{K}}$ entre el elemento del ángulo sólido $d\Omega$ para obtener la velocidad de las transiciones por unidad de ángulo sólido a los estados finales relacionados con el vector $\mathbf{K}'$. Entonces, tenemos la probabilidad por segundo de que se efectúe una dispersión hacia la unidad de ángulo sólido al ángulo θ, que es $S(\theta)$, el flujo dispersado. De donde,

$$S(\theta) \simeq \frac{\mu L^{-3} K'}{4\pi^2\hbar^3} V^*_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} \tag{15–32}$$

De acuerdo con la ecuación (15–13), la sección transversal de la dispersión diferencial es

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{S(\theta)}{I} \simeq \frac{\mu}{K\hbar L^{-3}} \frac{\mu L^{-3} K'}{4\pi^2\hbar^3} V^*_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}}$$

Sin embargo, $K' = \mu v'/\hbar = \mu v/\hbar = K$, porque la ecuación (15–4) demuestra que $v' = v$. Por lo tanto,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 V^*_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} \tag{15–33}$$

en donde,

$$V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} \equiv \int V(r) e^{i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\cdot\mathbf{r}}\, d\tau \tag{15–33′}$$

con la integración hecha a lo largo de una caja muy grande que rodea al potencial de dispersión. Esta es la *aproximación de Born* para $d\sigma/d\Omega$. Observe que ha dejado de usarse el tamaño de la caja, ya que L no aparece en la ecuación (15–33), puesto que las contribuciones a la integral de la (15–33′) se obtendrán sólo de regiones pequeñas en las que $V(r)$ tiene un valor apreciable y, por lo tanto, el valor de la integral es independiente de sus límites.*

* Utilizamos este hecho en la ecuación (15–35).

www.FreeLibros.me

Se puede efectuar parte de la integración de la ecuación (15–33′) inmediatamente; sea,

$$\boldsymbol{\chi} = \mathbf{K} - \mathbf{K}' \tag{15–34}$$

y defina un grupo de coordenadas esféricas r, Θ, Φ con el origen en el centro del potencial y el eje polar a lo largo de la dirección de $\boldsymbol{\chi}$. (No deben confundirse con las coordenadas esféricas r, θ, ϕ cuyo eje polar sigue la dirección de $\mathbf{K}$.) Por lo tanto,

$$(\mathbf{K} - \mathbf{K}') \cdot \mathbf{r} = \boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{r} = \chi r \cos \Theta$$

y

$$d\tau = r^2 \operatorname{sen} \Theta \, dr \, d\Theta \, d\Phi$$

de modo que

$$V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} V(r) e^{i\chi r \cos \Theta} r^2 \operatorname{sen} \Theta \, dr \, d\Theta \, d\Phi \tag{15–35}$$

$$V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} = \int_0^\infty \int_0^\pi V(r) e^{i\chi r \cos \Theta} 2\pi r^2 \operatorname{sen} \Theta \, dr \, d\Theta$$

La integral Θ se puede evaluar haciendo el cambio de la variable $Z = i\chi r \cos \Theta$. El resultado es

$$V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} = \int_0^\infty V(r) \left[\frac{e^{i\chi r} - e^{-i\chi r}}{i\chi r} \right] 2\pi r^2 \, dr \tag{15–36}$$

que es

$$V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} = \int_0^\infty V(r) \frac{\operatorname{sen} \chi r}{\chi r} 4\pi r^2 \, dr \tag{15–37}$$

Finalmente, expresemos χ en función del ángulo de dispersión θ. Examine el diagrama vectorial de la figura 15–6, que ilustra la relación (15–34). En esta figura podemos ver que,

$$\chi = 2K \operatorname{sen} (\theta/2) \tag{15–38}$$

Compare, ahora, los resultados de nuestros cálculos (15–33), (15–37) y (15–38), con la ecuación (14–35), que corresponde a la sección diferencial de dispersión coherente de rayos X, producida por un átomo. La similitud no

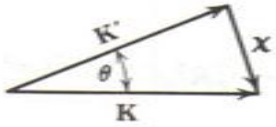

Figura 15-6. Ilustración de la relación entre los vectores que participan en la aproximación de Born.

www.FreeLibros.me

es accidental, ya que existe una derivación alternativa de la aproximación de Born, que lleva a los mismos resultados que hemos obtenido, pero completamente análoga a la derivación de la (14–35). Esta derivación implica el cálculo de la amplitud de la onda dispersada en una dirección dada, por acción de cada elemento de volumen en la región del potencial. Si se toman en cuenta todas las fases relativas, todas estas contribuciones a la amplitud total se suman y el resultado se eleva al cuadrado, para obtener la intensidad total de dispersión.

4. Algunas aplicaciones de la aproximación de Born

Ahora, evaluaremos $d\sigma/d\Omega$ de la aproximación de Born, en dos casos típicos. Sea el potencial gaussiano de atracción

$$V(r) = -V_0 e^{-(r/R)^2} \tag{15–39}$$

que se ilustra en la figura 15–7. Tenemos que,

$$V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} = -V_0 \int_0^\infty e^{-(r/R)^2} \frac{\operatorname{sen} \chi r}{\chi r} 4\pi r^2 \, dr$$

Al integrarla, nos da

$$V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} = -(2\pi)^{3/2} V_0 R^3 e^{-\frac{1}{2}\chi^2 R^2}$$

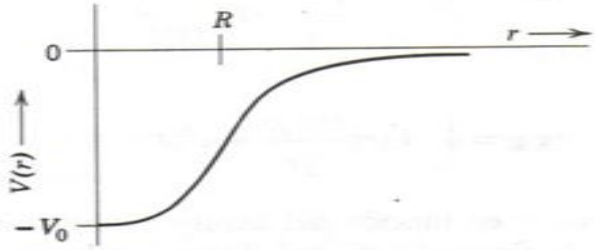

Figura 15-7. Potencial gaussiano de atracción.

Si substituimos esto en la ecuación (15–33), obtenemos:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 (2\pi)^3 V_0^2 R^6 e^{-\chi^2 R^2}$$

o bien,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \frac{2\pi\mu^2}{\hbar^4} V_0^2 R^6 e^{-4K^2 R^2 \operatorname{sen}^2(\theta/2)} \tag{15–40}$$

La sección diferencial de dispersión tiene la forma que se muestra en la figura 15–8, que es una función de tipo gaussiano, con un máximo en $\theta = 0$.

www.FreeLibros.me

Desciende a e^{-1} veces su valor máximo, a un ángulo θ' que satisface la relación,

$$4K^2R^2 \operatorname{sen}^2(\theta'/2) = 1$$

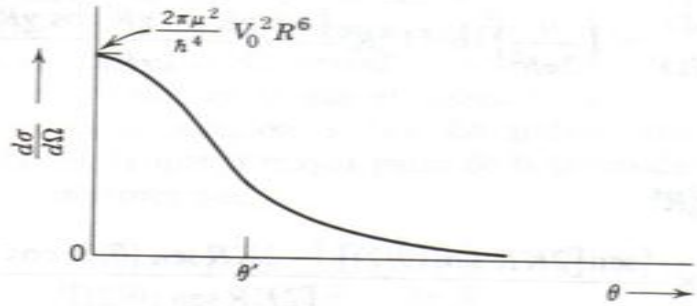

Figura 15-8. Sección diferencial de dispersión para un potencial gaussiano de atracción.

Para energías lo suficientemente altas, de tal manera que $KR = (\sqrt{2\mu E}/\hbar)R \gg 1$, θ' será pequeña y, entonces, tenemos que:

$$4K^2R^2(\theta'/2)^2 \simeq 1$$

o bien,

$$\theta' \simeq \frac{1}{KR} \tag{15-41}$$

Veamos a continuación un potencial de atracción en forma de pozo rectangular,

$$V(r) = \begin{matrix} -V_0, & r < R \\ 0, & r > R \end{matrix} \tag{15-42}$$

que se ilustra en la figura 15–9. En este caso,

$$V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} = -V_0 \int_0^R \frac{\operatorname{sen} \chi r}{\chi r} 4\pi r^2 \, dr$$

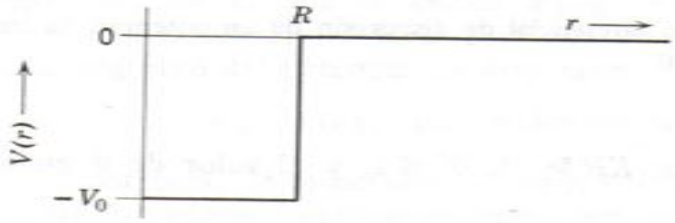

Figura 15-9. Potencial de atracción en forma de pozo rectangular.

www.FreeLibros.me

y, al integrar, obtenemos,

$$V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}} = -4\pi V_0 R^3 \frac{[\operatorname{sen} \chi R - \chi R \cos \chi R]}{(\chi R)^3}$$

De modo que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 16\pi^2 V_0^2 R^6 \frac{[\operatorname{sen} \chi R - \chi R \cos \chi R]^2}{(\chi R)^6}$$

o bien,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \frac{4\mu^2}{\hbar^4} V_0^2 R^6 \times \frac{\{\operatorname{sen}[2KR \operatorname{sen}(\theta/2)] - 2KR \operatorname{sen}(\theta/2) \cos[2KR \operatorname{sen}(\theta/2)]\}^2}{[2KR \operatorname{sen}(\theta/2)]^6} \tag{15–43}$$

La forma de esta sección diferencial de dispersión se indica en la figura 15–10. Para $\theta = 0$, $\chi R = 0$, pero $[\operatorname{sen} \chi R - \chi R \cos \chi R]^2/(\chi R)^6 = 1/9$. En consecuencia, $d\sigma/d\Omega$ tiene un máximo finito en $\theta = 0$ y desciende a medida que crece el ángulo, llegando a su primer cero cuando $\operatorname{sen} \chi R - \chi R \cos \chi R = 0$ tiene su primera raíz con un valor diferente a cero. Es decir,

$$\chi R = 4.49$$

o bien,

$$2KR \operatorname{sen}(\theta'/2) = 4.49$$

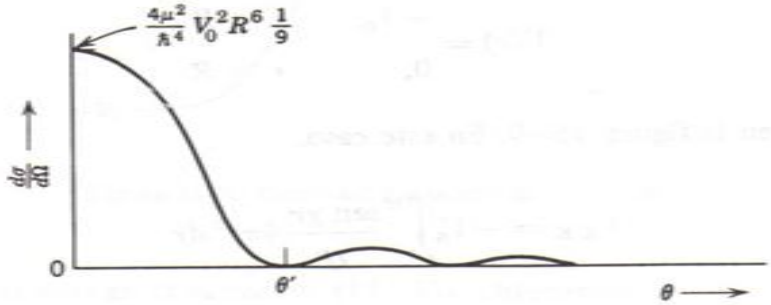

Figura 15-10. Sección diferencial de dispersión de un potencial de atracción de pozo rectangular.

Para energías altas, $KR \gg 1$, $\theta' \ll 1$, y el valor de θ en el primer cero de $d\sigma/d\Omega$ es

$$\theta' \simeq \frac{4.49}{KR} \tag{15–44}$$

www.FreeLibros.me

Para un potencial de contornos bien definidos, por ejemplo el de la expresión (15–42), $d\sigma/d\Omega$ tiene el comportamiento característico de un patrón de difracción óptica. Para un potencial con bordes suaves, como el (15–39), la similitud entre $d\sigma/d\Omega$ y un patrón óptico de difracción no es, quizá, tan evidente, ya que no están presentes los máximos secundarios (o, por lo menos, son débiles). Sin embargo, la dispersión de una función de onda, al pasar por una región pequeña en la que el potencial varía en cualquier forma, es perfectamente análoga a la dispersión de una onda electromagnética que atraviesa una pequeña región en la que el índice de refracción cambia en una forma equivalente (vea la ecuación 8–56). En ambos casos, se obtiene una distribución angular en la que la mayor parte de la intensidad de dispersión se concentra a ángulos menores que

$$\theta' \sim \frac{1}{KR} = \frac{1}{2\pi}\frac{\lambda}{R}$$

Este ángulo disminuye al aumentar K (incrementando la energía de la partícula o la frecuencia de los cuantos electromagnéticos) y la distribución angular tiene picos frontales.

Las secciones de los dos potenciales que hemos visto se pueden evaluar a partir de sus secciones diferenciales de dispersión, calculando

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega}\, d\Omega \qquad (15\text{–}45)$$

en donde la integral se toma sobre todo el ángulo sólido (esta igualdad evidente se deriva de las definiciones de las cantidades que intervienen). No nos ocuparemos realmente de esto, ya que las características importantes de las secciones se pueden comprobar cualitativamente con gran facilidad. Para ambos potenciales, σ disminuye, al aumentar K, porque la región angular en la que $d\sigma/d\Omega$ tiene valor apreciable, se hace más pequeña.

Para concluir, debemos ver el intervalo de aplicabilidad de la aproximación de Born. La condición de validez de la teoría de perturbación, que es la base de esta aproximación, es la ecuación (9–36), que establece que la amplitud de la función de onda para una partícula dispersada es pequeña, en comparación con la amplitud de la función de onda para la partícula incidente. También es necesario que la función de onda de la partícula libre para la expresión (15–23) sea una representación razonable de la función de onda incidente, y que la función de onda de la partícula libre para la (15–24), sea una representación razonable de la función de onda dispersada en la región del potencial de dispersión, en la que se evalúa $V_{\mathbf{K}'\mathbf{K}}$. Estas condiciones se aplicarán *generalmente* si la energía E de la partícula incidente es grande, en comparación con la magnitud del potencial de dispersión, es decir, si

$$E \gg |V(r)|, \quad \text{para todos los valores de } r \qquad (15\text{–}46)$$

porque, entonces, el potencial de dispersión es una perturbación pequeña, que produce, casi siempre, un efecto también pequeño. Sin embargo, la expresión (15–46) no es ni necesaria ni suficiente. Por ejemplo, la aproximación de Born es bastante exacta para la dispersión de electrones de baja energía, por

www.FreeLibros.me

acción de los átomos, por razones que veremos más tarde y esta misma aproximación no es del todo exacta en algunos casos, para dispersiones de partículas de alta energía. Podemos dar un criterio más útil que el de la ecuación (15–46); pero es muy complicado y queda fuera del alcance de nuestro tema.

5. Análisis en ondas parciales

En la sección anterior desarrollamos un método de aproximación, útil sobre todo para dispersiones a altas energías. En esta sección estudiaremos un método que es exacto a cualquier energía, pero es útil, principalmente, para dispersiones a energías bajas. Este método es el *análisis en ondas parciales*, que aplicó Rayleigh originalmente, en el siglo XIX, a la dispersión de ondas sonoras, y que Faxen y Holtsmark adaptaron, en 1927, a la dispersión de ondas de la mecánica cuántica.

Veamos la dispersión por el potencial $V(r)$, de la función de onda relacionada con una partícula en un haz incidente al potencial. La onda incidente pasa por el potencial y de éste se dispersa una onda que se desplaza hacia afuera. En las cercanías inmediatas del potencial, éste hace que, por lo general, las ondas incidentes y las dispersas se distorsionen notablemente. En efecto, las ondas pueden entremezclarse tanto que es difícil distinguir las ondas incidentes de las dispersas. Sin embargo, a grandes distancias de la región en la que el potencial tiene un valor apreciable, estas complicaciones dejan de presentarse y la dispersión tiene el aspecto sencillo que se ilustra en la figura 15–11, de acuerdo con un grupo de superficies nodales. A simple vista, apreciamos una onda plana incidente al potencial y una onda esférica que se dispersa hacia el exterior, a partir de él. Podemos escribir una función propia para esto, que es:

$$\psi = e^{iKz} + f(\theta)\frac{1}{r}e^{iKr}, \qquad r \to \infty \tag{15–47}$$

en donde se han usado las coordenadas esféricas r, θ, ϕ con origen en el centro de $V(r)$, y estando el eje z en la dirección de propagación de la onda incidente. El primer término es la función propia (15–18) de una onda plana que se desplaza en la dirección de z creciente, que representa la partícula

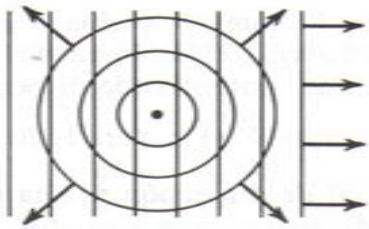

Figura 15-11. Ilustración de las ondas incidentes y dispersadas, vistas a gran escala en comparación con el tamaño del potencial de dispersión.

www.FreeLibros.me

incidente. (En este caso, no será necesario normalizar la función propia.) El segundo término es una función propia para una onda esférica que se mueve en la dirección de r creciente, que representa las formas posibles en que la partícula dispersada puede moverse. La dependencia direccional de su amplitud está dada por $f(\theta)$; no puede haber una dependencia respecto a ϕ, debido a la simetría del potencial de dispersión. El término $1/r$ proporciona la reducción necesaria de la ley del inverso del cuadrado en la intensidad de la onda dispersa. Más tarde verificaremos el hecho de que el segundo término es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, en la región $r \to \infty$, en donde $V(r) = 0$. Por el momento, daremos esto por sentado y evaluaremos el flujo incidente, el flujo disperso y la sección diferencial de dispersión para la función propia (15–47).

Al evaluar los flujos, podemos tratar por separado a los dos términos de la ecuación (15–47), ya que no hay interferencias entre las ondas incidentes y dispersadas en las regiones en que se miden los flujos. Este es un hecho comprobado, puesto que el flujo incidente se mide con grandes valores negativos de z, en donde el segundo término se puede despreciar, debido a su dependencia de $1/r$, y porque el flujo dispersado se mide fuera de los límites transversales del haz incidente (que son siempre finitos en un experimento de dispersión real). Por lo tanto, el flujo incidente I es, de acuerdo con la ecuación (15–30),

$$I = v(e^{iKz})^*(e^{iKz}) = ve^{-iKz}e^{iKz} = v \tag{15–48}$$

en donde $v = \hbar K/\mu$ es la velocidad de la partícula incidente. Esta es la probabilidad por segundo de que la partícula incidente atraviese un área de un centímetro cuadrado, normal a su dirección de movimiento. De igual manera, la probabilidad por segundo de que la partícula dispersada atraviese un área de un centímetro cuadrado, normal a su dirección de movimiento es

$$v\left[f(\theta)\frac{e^{iKr}}{r}\right]^*\left[f(\theta)\frac{e^{iKr}}{r}\right] = vf^*(\theta)f(\theta)\frac{1}{r^2}$$

La probabilidad por segundo de que atraviese dA cm^2 es

$$vf^*(\theta)f(\theta)\frac{dA}{r^2}$$

Sin embargo, dA/r^2 es igual, por definición, al elemento de ángulo sólido $d\Omega$, de manera que la probabilidad por segundo de que se produzca una dispersión en el ángulo sólido $d\Omega$ es

$$vf^*(\theta)f(\theta)\,d\Omega$$

Si dividimos entre $d\Omega$, tendremos la probabilidad por segundo de una dispersión en la unidad de ángulo sólido. Es decir, $S(\theta)$, el flujo dispersado. Por lo tanto,

$$S(\theta) = vf^*(\theta)f(\theta) \tag{15–49}$$

www.FreeLibros.me

El flujo dispersado se puede evaluar también a partir de la extensión tridimensional de la definición (7–31) del flujo de probabilidad; pero el método que usamos es más sencillo. Ahora,

$$d\sigma/d\Omega = S(\theta)/I$$

de donde, tenemos que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{vf^*(\theta)f(\theta)}{v} = f^*(\theta)f(\theta) \tag{15–50}$$

y podemos ver que el cálculo de $d\sigma/d\Omega$ se reduce al cálculo de $f(\theta)$.

Podemos hacer este cálculo, igualando la onda incidente con la dispersada, en tal forma que obtengamos una solución a la ecuación de Schrödinger, con el potencial $V(r)$, que se comporta como la expresión (15–47) cuando $r \to \infty$. Como paso preliminar, debemos encontrar cómo descomponer la onda plana que describe

$$e^{iKz} = e^{iKr\cos\theta} \tag{15–51}$$

y asociada con el impulso lineal $K\hbar$, en una serie de *ondas parciales*, asociadas, cada una de ellas, con el impulso orbital angular $\sqrt{l(l+1)}\hbar$. Debemos hacerlo así porque la ecuación de Schrödinger para un potencial esféricamente simétrico, proporciona con facilidad un conjunto de soluciones del impulso orbital angular definido. Ahora bien, la función propia de la partícula libre (15–51) es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (10–15) para el caso de $V(r) = 0$. Hemos visto que las soluciones a esta ecuación tienen la forma general

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\phi) \tag{15–52}$$

Sin embargo, puesto que la expresión (15–51) no depende de ϕ, es suficiente tomar en consideración las soluciones que sean independientes de ϕ. Por consiguiente, tomamos la solución a la ecuación (10–17) para $m = 0$, que es $\Phi_0(\phi) = 1$. Entonces, $\Theta(\theta)$ es una solución aceptable (nunca divergente) para la ecuación (10–23), con la condición (10–24), para $m = 0$, son las funciones de $\Theta_{l0}(\theta)$, que se denominan *polinomios de Legendre* y se escriben $P_l(\cos\theta)$. Algunos de los primeros son:

$$\begin{aligned}
P_0(\cos\theta) &= 1 \\
P_1(\cos\theta) &= \cos\theta \\
P_2(\cos\theta) &= \frac{3\cos^2\theta - 1}{2} \\
P_3(\cos\theta) &= \frac{5\cos^3\theta - 3\cos\theta}{2}
\end{aligned} \tag{15–53}$$

www.FreeLibros.me

El lector debe comparar estas funciones con la dependencia de θ de la expresión (10–39), para $m = 0$. Los polinomios de Legendre se normalizan a $2/(2l + 1)$. Esto se representa mediante la primera de las ecuaciones,

$$\int_{\cos\theta=-1}^{\cos\theta=1} P_{l'}(\cos\theta)\, P_l(\cos\theta)\, d(\cos\theta) = \begin{cases} \dfrac{2}{2l+1}, & l' = l \\ 0, & l' \neq l \end{cases} \tag{15–54}$$

La segunda ecuación representa la ortogonalidad de esas funciones. La función $R(r)$ es una solución aceptable para la ecuación (10–27), con $V(r) = 0$. Esa ecuación es

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left\{-\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}E\right\}R = 0$$

En este caso, $E > 0$, de modo que E no está cuantizada y el número cuántico n no aparece. Estas soluciones se escriben $j_l(Kr)$ y se denominan *funciones esféricas de Bessel.* A continuación damos algunas de ellas:

$$\begin{aligned}
j_0(Kr) &= \frac{1}{Kr}\operatorname{sen} Kr \\
j_1(Kr) &= \frac{1}{(Kr)^2}\operatorname{sen} Kr - \frac{1}{Kr}\cos Kr \\
j_2(Kr) &= \left[\frac{3}{(Kr)^3} - \frac{1}{Kr}\right]\operatorname{sen} Kr - \frac{3}{(Kr)^2}\cos Kr \\
j_3(Kr) &= \left[\frac{15}{(Kr)^4} - \frac{6}{(Kr)^2}\right]\operatorname{sen} Kr - \left[\frac{15}{(Kr)^3} - \frac{1}{Kr}\right]\cos Kr
\end{aligned} \tag{15–55}$$

El lector puede comprobar que para $r \to 0$ tienen la misma dependencia de r^l que la expresión (10–45), de acuerdo con las observaciones posteriores a la ecuación (13–24). En el párrafo siguiente vamos a verificar su comportamiento para $r \to \infty$. Finalmente, vemos que para una partícula libre, podemos escribir una de las soluciones a la ecuación (15–52) como

$$j_l(Kr)\, P_l(\cos\theta) \tag{15–56}$$

Esta solución está asociada con un impulso orbital angular definido con respecto al origen de coordenadas, de magnitud $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$.* En este caso, una solución general en la forma (15–52) es:

$$\sum_{l=0}^{\infty} a_l j_l(Kr)\, P_l(\cos\theta) \tag{15–57}$$

* La razón es que satisface a la ecuación de valor propio L^2_{op} (10–57).

www.FreeLibros.me

en donde las a_l son constantes arbitrarias. Ahora bien, la partícula descrita por la función propia de partícula libre (15–51), tiene el impulso lineal definido $K\hbar$. No obstante, puede tener cualquier impulso orbital angular con respecto al origen, debido a que se desconoce por completo el parámetro de impacto con respecto al origen. Por lo tanto, no podemos describir de ninguna manera la partícula por medio de una sola de las funciones propias (15–56); sin embargo, podemos describirla por medio de la combinación lineal (15–57), ya que contiene todos los impulsos orbitales angulares posibles y porque es una solución general a la ecuación de Schrödinger para el caso de una partícula libre. Por esto, podemos escribir:

$$e^{iKr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l j_l(Kr)\, P_l(\cos\theta) \tag{15–58}$$

Para determinar a_l, multiplicamos ambos miembros de esta ecuación por $P_{l'}(\cos\theta)d(\cos\theta)$ e integramos sobre todo el intervalo de $\cos\theta$:

$$\int_{-1}^{1} P_{l'}(\cos\theta)e^{iKr\cos\theta}\, d(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l j_l(Kr)\int_{-1}^{1} P_{l'}(\cos\theta)\, P_l(\cos\theta)\, d(\cos\theta)$$

De acuerdo con la ecuación (15–54), esto saca de la suma el término para $l = l'$ que, después de la transposición, da

$$\frac{2}{2l'+1}\, a_{l'} j_{l'}(Kr) = \int_{-1}^{1} \underbrace{P_{l'}(\cos\theta)}_{u}\underbrace{e^{iKr\cos\theta}\, d(\cos\theta)}_{dv}$$

Integrando por partes, tenemos,

$$\frac{2}{2l'+1}\, a_{l'} j_{l'}(Kr) = \left[\underbrace{P_{l'}(\cos\theta)}_{u}\underbrace{\frac{e^{iKr\cos\theta}}{iKr}}_{v}\right]_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} \underbrace{\frac{e^{iKr\cos\theta}}{iKr}}_{v}\underbrace{\frac{dP_{l'}(\cos\theta)}{d(\cos\theta)}\, d(\cos\theta)}_{du}$$

Integrando nuevamente por partes, se obtiene,

$$\frac{2}{2l'+1}\, a_{l'} j_{l'}(Kr) = \left[P_{l'}(\cos\theta)\frac{e^{iKr\cos\theta}}{iKr}\right]_{-1}^{1} - \left[\frac{dP_{l'}(\cos\theta)}{d(\cos\theta)}\frac{e^{iKr\cos\theta}}{(iKr)^2}\right]_{-1}^{1} + \int_{-1}^{1}\frac{e^{iKr\cos\theta}}{(iKr)^2}\frac{d^2P_{l'}(\cos\theta)}{d(\cos\theta)^2}\, d(\cos\theta)$$

En esta forma, puede efectuarse con facilidad la determinación de $a_{l'}$, tomando $r \to \infty$. Puesto que las a_l son constantes independientes de r, los valores obtenidos serán válidos en todos los casos. Para $r \to \infty$, los últimos dos términos de la ecuación anterior serán insignificantemente pequeños en comparación con el primer término, puesto que ambos son proporcionales a r^{-2},

www.FreeLibros.me

mientras que el primer término es proporcional a r^{-1}. Despreciando esos términos tenemos:

$$\frac{2}{2l'+1}\, a_{l'} j_{l'}(Kr) = \frac{1}{iKr}\Big[P_{l'}(\cos\theta) e^{iKr\cos\theta}\Big]_{\cos\theta=-1}^{\cos\theta=1}, \qquad r \to \infty \qquad (15\text{–}59)$$

Para evaluar esta expresión, usamos las relaciones

$$P_{l'}(\cos\theta) = \begin{matrix} 1, & \cos\theta = 1 \\ (-1)^{l'}, & \cos\theta = -1 \end{matrix}$$

que pueden verificarse, mediante una comparación con las ecuaciones (15–35). Puesto que*

$$(-1)^{l'} = e^{il'\pi}$$

la ecuación (15–59) da

$$\frac{2}{2l'+1}\, a_{l'} j_{l'}(Kr) = \frac{1}{iKr}\left[e^{iKr} - e^{il'\pi} e^{-iKr}\right], \qquad r \to \infty$$

$$= \frac{e^{il'\pi/2}}{iKr}\left[e^{i(Kr - l'\pi/2)} - e^{-i(Kr - l'\pi/2)}\right], \qquad r \to \infty$$

No obstante**

$$e^{il'\pi/2} = i^{l'} \qquad (15\text{–}60)$$

y**

$$\frac{e^{i(Kr - l'\pi/2)} - e^{-i(Kr - l'\pi/2)}}{2i} = \operatorname{sen}\left(Kr - \frac{l'\pi}{2}\right) \qquad (15\text{–}61)$$

Por lo tanto, esto puede escribirse como:

$$\frac{2}{2l'+1}\, a_{l'} j_{l'}(Kr) = 2i^{l'}\, \frac{\operatorname{sen}(Kr - l'\pi/2)}{Kr}, \qquad r \to \infty \qquad (15\text{–}62)$$

Observe que la ecuación (15–62) es compatible con el comportamiento para $r \to \infty$ de las $j_{l'}(Kr)$ incluidas en la ecuación (15–55), puesto que, para todas estas funciones,

$$j_{l'}(Kr) = \frac{\operatorname{sen}(Kr - l'\pi/2)}{Kr}, \qquad r \to \infty \qquad (15\text{–}63)$$

como puede comprobarse, despreciando los términos de la ecuación (15–55), que se cancelan con mayor rapidez que r^{-1}, y escribiendo $\operatorname{sen}(Kr - l'\pi/2) = \operatorname{sen}(Kr)\cos(l'\pi/2) - \cos(Kr)\operatorname{sen}(l'\pi/2)$. Finalmente, substituimos la ecuación (15–63) en la (15–62) y resolvemos para $a_{l'}$. El resultado es:

$$a_{l'} = (2l'+1)i^{l'}$$

* Esta relación depende de la igualdad $e^{iz} = \cos z + i \operatorname{sen} z$.

** Estas relaciones dependen de la igualdad $e^{iz} = \cos z + i \operatorname{sen} z$.

www.FreeLibros.me

Esto es cierto para todos los valores de r y los del número cuántico. Por consiguiente, podemos utilizarlo para evaluar las constantes en la ecuación (15–58) y encontramos:

$$e^{iKr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(Kr)\, P_l(\cos\theta) \tag{15–64}$$

Esta es la descomposición deseada de la onda plana asociada al impulso lineal Kr en un conjunto de ondas parciales, asociadas, cada una de ellas, con el impulso orbital angular $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$. Los términos $j_l(Kr)P_l(\cos\theta)$ especifican la dependencia radial y angular de la l-ésima onda parcial. La onda plana $e^{ikr\cos\theta}$ se obtiene mezclando la totalidad de las ondas parciales, dando a cada una de ellas una amplitud $(2l+1)$ y un factor de fase i^l.

A partir del siguiente argumento clásico puede lograrse una interpretación instructiva del término de amplitud $(2l+1)$. Supongamos una superficie imaginaria, perpendicular a la dirección de propagación de la onda plana y que contenga un conjunto de círculos de radio

$$d_l = l/K \tag{15–65}$$

centrados sobre la intercepción del eje z y la superficie. Esto se ilustra en la figura 15–12. Clásicamente, el impulso orbital angular en torno al origen de coordenadas de una partícula que se desplaza paralelamente al eje z es igual a su parámetro de impacto d por su momento lineal $p = K\hbar$. Así, todas las partículas que pasan por un anillo de radio interno d_l y externo d_{l+1} tendrán un impulso angular entre $(l/K)K\hbar = l\hbar$ y $[(l+1)/K]K\hbar = (l+1)\hbar$. En el límite clásico, l es mayor que 1, de tal modo que puede decirse que todas las partículas que pasan por el anillo tienen el impulso angular $l\hbar$. Ahora bien, una partícula miembro de un haz uniforme (que se podría describir por medio de $e^{ikr\cos\theta}$) tiene las mismas probabilidades de poseer cualquier parámetro

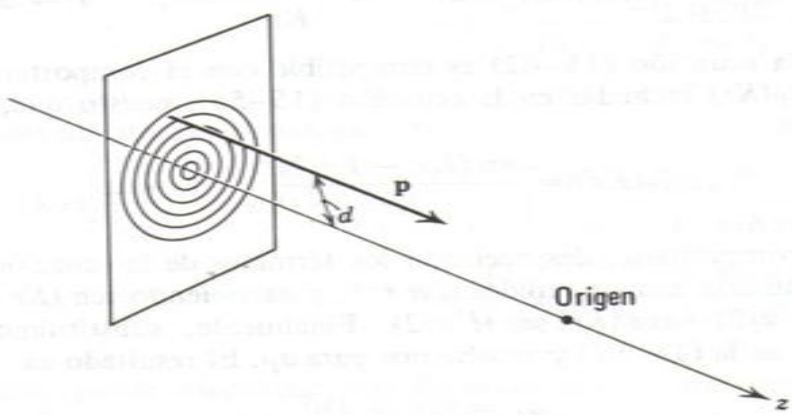

Figura 15-12. Ilustración de la interpretación clásica del término de amplitud que aparece en la descomposición de una onda plana en ondas parciales.

www.FreeLibros.me

de impacto. Por consiguiente, la probabilidad de que pase por el anillo es proporcional a su área A. Esto es,

$$A = \pi[d_{l+1}^2 - d_l^2] = \frac{\pi}{K^2}[(l+1)^2 - l^2]$$

$$A = \frac{\pi}{K^2}[l^2 + 2l + 1 - l^2] = \frac{\pi}{K^2}[2l + 1] \qquad (15\text{–}66)$$

o bien

$$A \propto (2l + 1)$$

Así, $(2l + 1)$ es la probabilidad relativa de que una partícula que se mueva en un haz uniforme tenga, en el límite clásico, un impulso orbital angular en torno al origen, de $l\hbar$, que es el impulso orbital angular asociado a la onda parcial de número cuántico l, en el límite clásico, donde $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar \to l\hbar$.

Volvamos al problema de determinación de la función $f(\theta)$ en la expresión

$$\psi(r, \theta) = e^{iKr\cos\theta} + f(\theta)\frac{1}{r}e^{iKr}, \qquad r \to \infty \qquad (15\text{–}67)$$

que, de acuerdo con la ecuación (15–47), describe la función propia para la dispersión de una partícula por el potencial $V(r)$, en las posiciones alejadas de la región en donde $V(r)$ tiene un valor apreciable. Ahora, en *todas* las posiciones, $\psi(r, \theta)$ es una solución, que no depende de ϕ, de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para el potencial $V(r)$. A partir del análisis anterior, resulta evidente que esta forma es similar a la de la solución (15–57) para $V(r) = 0$. Esto es,

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} b_l R_l(Kr)\, P_l(\cos\theta) \qquad (15\text{–}68)$$

La dependencia angular es exactamente la misma, debido a que la ecuación diferencial (10–23) que la rige nunca contiene el potencial. Sin embargo, el conjunto de constantes es diferente, y la dependencia radial es también distinta, puesto que $R_l(Kr)$ satisface la ecuación (10–27), o sea,

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left\{-\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)]\right\}R = 0 \qquad (15\text{–}69)$$

en lugar de esta ecuación con $V(r) = 0$, que se satisface por medio de $j_l(Kr)$. Sin embargo, los valores de $R_l(Kr)$ son *esencialmente* diferentes de los de $j_l(Kr)$ sólo para valores pequeños de r, en donde $V(r) \neq 0$. Para valores grandes de r, $V(r) = 0$ y tanto $R_l(Kr)$ como $j_l(Kr)$ satisfacen la misma ecuación diferencial. Así, para valores grandes de r, estas funciones son esencialmente las mismas y, en particular, para $r \to \infty$ los $R_l(Kr)$ tienen la forma

$$R_l(Kr) = \frac{\operatorname{sen}(Kr - l\pi/2 + \delta_l)}{Kr}, \qquad r \to \infty \qquad (15\text{–}70)$$

Para $r \to \infty$, cada $R_l(Kr)$ puede diferir cuando mucho del $j_l(Kr)$ correspondiente en la ecuación (15–63) por un *cambio de fase* δ_l, que se produce por

www.FreeLibros.me

la diferente dependencia de r de las dos funciones en la región en la que $V(r) \neq 0$. Esto no es difícil de demostrar, probando que las funciones (15–70) son soluciones a la ecuación (15–69) para $r \to \infty$, tan *sólo a condición de que $V(r)$ tienda a cero, al aumentar r, con mayor rapidez que $1/r$;* pero no lo haremos aquí. En lugar de ello, un poco más adelante estudiaremos algunas gráficas de $j_l(Kr)$ y $R_l(Kr)$, para potenciales típicos $V(r)$, que harán que resulte evidente que la ecuación (15–70) es correcta y, asimismo, mostrarán la importancia de los cambios de fase.

Al igualar los segundos miembros de las ecuaciones (15–67) y (15–68), y escribiendo $e^{ikr\cos\theta}$ en términos de la ecuación (15–64), obtenemos,

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(Kr)\,P_l(\cos\theta) + f(\theta)\frac{e^{iKr}}{r} = \sum_{l=0}^{\infty} b_l R_l(Kr)\,P_l(\cos\theta), \qquad r \to \infty$$

Al evaluar $j_l(Kr)$ para $r \to \infty$ de la expresión (15–63), y $R_l(Kr)$ en el mismo límite de (15–70), se tiene

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l \frac{\operatorname{sen}(Kr - l\pi/2)}{Kr} P_l(\cos\theta) + f(\theta)\frac{Ke^{iKr}}{Kr}$$
$$= \sum_{l=0}^{\infty} b_l \frac{\operatorname{sen}(Kr - l\pi/2 + \delta_l)}{Kr} P_l(\cos\theta), \qquad r \to \infty$$

Esta ecuación determina tanto $f(\theta)$, como el conjunto total de b_l en términos de los cambios de fase. Para ver esto, usamos la ecuación (15–61) y una ecuación similar, para escribir las funciones senoidales como exponenciales complejas. Así, después de multiplicar por Kr, se tiene:

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\left[\frac{e^{i(Kr-l\pi/2)} - e^{-i(Kr-l\pi/2)}}{2i}\right]P_l(\cos\theta) + f(\theta)Ke^{iKr}$$
$$= \sum_{l=0}^{\infty} b_l\left[\frac{e^{i(Kr-l\pi/2+\delta_l)} - e^{-i(Kr-l\pi/2+\delta_l)}}{2i}\right]P_l(\cos\theta), \qquad r \to \infty$$

Si agrupamos los coeficientes de e^{iKr} y e^{-iKr}

$$\left\{\sum_{l=0}^{\infty}\left[\frac{(2l+1)i^l}{2i}e^{-il\pi/2} - \frac{b_l}{2i}e^{-il\pi/2}e^{i\delta_l}\right]P_l(\cos\theta) + f(\theta)K\right\}e^{iKr}$$
$$+ \left\{\sum_{l=0}^{\infty}\left[-\frac{(2l+1)i^l}{2i}e^{il\pi/2} + \frac{b_l}{2i}e^{il\pi/2}e^{-i\delta_l}\right]P_l(\cos\theta)\right\}e^{-iKr} = 0, \qquad r \to \infty$$

Esto se puede satisfacer para r arbitrario sólo si los coeficientes de e^{iKr} y e^{-iKr} se anulan por separado. Esta última condición da:

$$\sum_{l=0}^{\infty}\left[-\frac{(2l+1)}{2i}i^l e^{il\pi/2} + \frac{b_l}{2i}e^{il\pi/2}e^{-i\delta_l}\right]P_l(\cos\theta) = 0$$

www.FreeLibros.me

Como esto debe ser cierto, independientemente del valor de θ, el término multiplicador de cada $P_l(\cos\theta)$ debe ser cero. Para un valor típico de l, se requiere que

$$\frac{(2l+1)}{2i}\, i^l e^{il\pi/2} = \frac{b_l}{2i}\, e^{il\pi/2} e^{-i\delta_l}$$

o bien,

$$b_l = (2l+1) i^l e^{i\delta_l} \tag{15–71}$$

Al substituir esto en el coeficiente de e^{iKr}, y requiriendo que el coeficiente se anule, obtenemos

$$\sum_{l=0}^{\infty}\left[\frac{(2l+1)i^l}{2i}\, e^{-il\pi/2} - \frac{(2l+1)i^l}{2i}\, e^{i\delta_l} e^{-il\pi/2} e^{i\delta_l}\right] P_l(\cos\theta) = -f(\theta)K$$

o bien,

$$f(\theta) = \frac{1}{2iK}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos\theta) \tag{15–72}$$

que es:

$$f(\theta) = \frac{1}{K}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\operatorname{sen}\delta_l P_l(\cos\theta) \tag{15–72'}$$

en donde hemos usado la expresión (15–60) y una ecuación similar a la (15–61). Puesto que las b_l son constantes, tienen los valores especificados por la expresión (15–71) en todos los casos, aun cuando la ecuación se obtuvo para $r \to \infty$. No es necesaria una expresión similar para (15–72′), puesto que la función $f(\theta)$ se define sólo para $r \to \infty$.

Si tenemos la expresión (15–72′), para $f(\theta)$, podemos obtener inmediatamente las secciones transversales de dispersión. De acuerdo con la ecuación (15–50), $d\sigma/d\Omega$ es

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= f^*(\theta)\, f(\theta)\\ &= \frac{1}{K^2}\left\{\sum_{l'=0}^{\infty}(2l'+1)e^{-i\delta_{l'}}\operatorname{sen}\delta_{l'}\, P_{l'}(\cos\theta)\right\}\left\{\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\operatorname{sen}\delta_l\, P_l(\cos\theta)\right\}\end{aligned} \tag{15–73}$$

en donde hemos usado l' y l para indicar específicamente que las dos series deben sumarse independientemente. De acuerdo con la ecuación (15–45), σ es:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega}\, d\Omega = \int \frac{d\sigma}{d\Omega}\, 2\pi \operatorname{sen}\theta\, d\theta = 2\pi\int_{-1}^{1}\frac{d\sigma}{d\Omega}\, d(\cos\theta)$$

www.FreeLibros.me

Esto se evalúa, multiplicando las dos series de (15–73) e integrando cada uno de los términos resultantes respecto a $\cos\theta$. Al aplicar la expresión (15–54), el lector puede comprobar que desaparecen todos los términos para $l' \neq l$ y que el resultado es:

$$\sigma = \frac{2\pi}{K^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)^2 \operatorname{sen}^2\delta_l \frac{2}{2l+1} = \frac{4\pi}{K^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\operatorname{sen}^2\delta_l \quad (15\text{–}74)$$

Podemos ver que *las secciones transversales de dispersión* $d\sigma/d\Omega$ *y* σ *están determinadas completamente por el valor de* K *y los valores de los corrimientos de fase* δ_l.

Los corrimientos de fase se evalúan resolviendo la ecuación (15–69) para cada l y comparando la fase de $R_l(Kr)$, para algún valor grande de r, con la fase de $j_l(Kr)$, al mismo valor de r. Esto se ilustra en la figura 15–13 para un valor típico de l y tres formas distintas del potencial de dispersión $V(r)$. En estas curvas, la función

$$u_l(Kr) = rR_l(Kr) \quad (15\text{–}75)$$

se traza en función de r. Esto es conveniente, debido a que la amplitud de $u_l(Kr)$ se comporta como $rr^l = r^{l+1}$, cuando $r \to 0$, de tal modo que llega a cero en $r = 0$, para todos los valores de l, incluyendo $l = 0$. La razón es que $R_l(Kr) \propto r^l$, cuando $r \to 0$ propiedad común a la dependencia radial de las funciones propias para cualquier potencial esféricamente simétrico [vea la expresión (10–45) y las observaciones que siguen a la ecuación (13–24)]. Además, la función $u_l(Kr)$ satisface una ecuación diferencial

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left\{-\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)]\right\}u = 0 \quad (15\text{–}76)$$

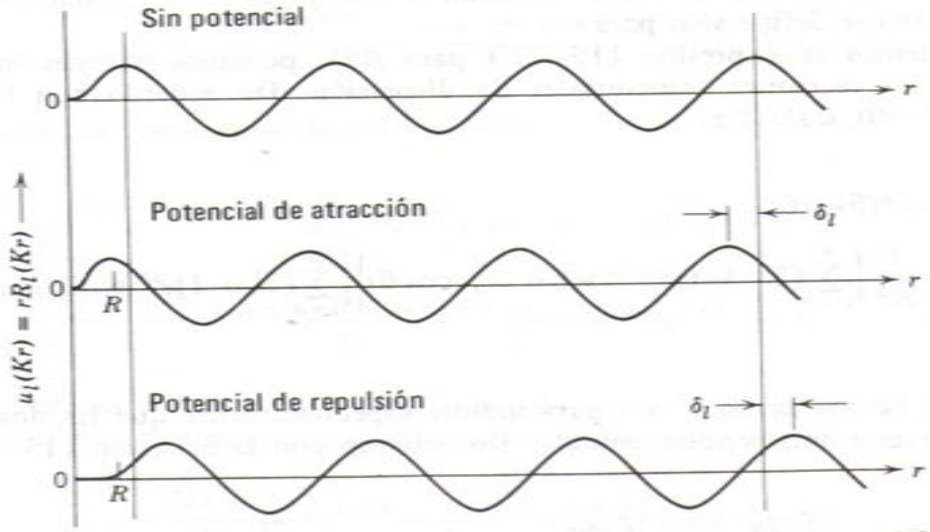

Figura 15-13. Dependencia radial de una función propia para tres formas diferentes de potencial de dispersión.

www.FreeLibros.me

que tiene una forma más simple que la ecuación (15–69) para $R_l(Kr)$. (La equivalencia de (15–69) y (15–76) puede verificarse, substituyendo la (15–75) en la última.) En la figura 15–13, la curva superior muestra $u_l(Kr)$ cuando $V(r) = 0$ para todos los valores de r. En este caso, $R_l(Kr) = j_l(Kr)$, no hay corrimiento de fase para ningún valor de l y la fase de $u_l(Kr)$ para un valor grande de r proporciona el cero de fase con respecto al que pueden medirse los corrimientos de fase que se producen cuando $V(r) \neq 0$. La curva media muestra $u_l(Kr)$ para el caso de un potencial: $V(r) < 0$, $r < R$ y $V(r) = 0$, $r > R$. Con tal potencial atractivo $[E - V(r)] > E$ en la región del potencial y, de acuerdo con la ecuación (15–76), la magnitud de $d^2u_l(Kr)/dr^2$ será mayor en esta región que en el caso de potencial cero. Por consiguiente, $u_l(Kr)$ oscila más rápidamente para $r < R$. Para $r > R$, su comportamiento no cambia, salvo que cambia su fase. Gracias a la curva, podemos ver que: *con un potencial de atracción $u_l(Kr)$ es "atraído hacia el interior"* por su comportamiento para $r < R$, *su fase avanza y el cambio de fase es positivo.** La curva inferior muestra $u_l(Kr)$ para el caso de un potencial de repulsión: $V(r) > 0$, $r < R$ y $V(r) = 0$, $r > R$. En este caso, $[E - V(r)] < E$ en la región del potencial y la magnitud de $d^2u_l(Kr)/dr^2$ se reduce en esta región. El resultado es que: con un *potencial de repulsión, $u_l(Kr)$ se "impulsa hacia afuera", su fase se retrasa, y el corrimiento de fase es negativo.**

6. Algunas aplicaciones del análisis de ondas parciales

En esta sección vamos a calcular las secciones de dispersión para dos potenciales absolutamente distintos, con el fin de poder presentar varios ejemplos del análisis de ondas parciales y para ilustrar un poco más el significado de los corrimientos de fase. Tomemos primeramente en consideración la dispersión, en los límites clásicos, de una pequeña esfera dura por una gran esfera dura (la dispersión de una canica de acero por una bola de billar). El potencial $V(r)$ se puede representar como una repulsión infinita que comienza en $r = R$, en donde el radio de interacción R es la suma de los radios de las dos esferas. La condición a la frontera para $u_l(Kr)$ en $r = R$ es igual que en la arista de un pozo rectangular infinito de potencial (vea la sección 5, capítulo 8) y exige que cada $u_l(Kr)$ se anule en $r = R$. En la figura 15–14 se presenta un diagrama del potencial $V(r)$ y un $u_l(Kr)$, típico. En el límite clásico, el radio de interacción es extremadamente grande en comparación con la longitud de onda de De Broglie $\lambda = 2\pi/K$, de modo que,

$$R \gg 2\pi/K$$

o bien,

$$KR \gg 1 \tag{15–77}$$

* El cambio de fase es positivo para un potencial de atracción, y negativo para un potencial de repulsión, sólo si el potencial no es tan fuerte que haga que la magnitud del cambio de fase sea mayor que 180°. Vea la sección 6.

www.FreeLibros.me

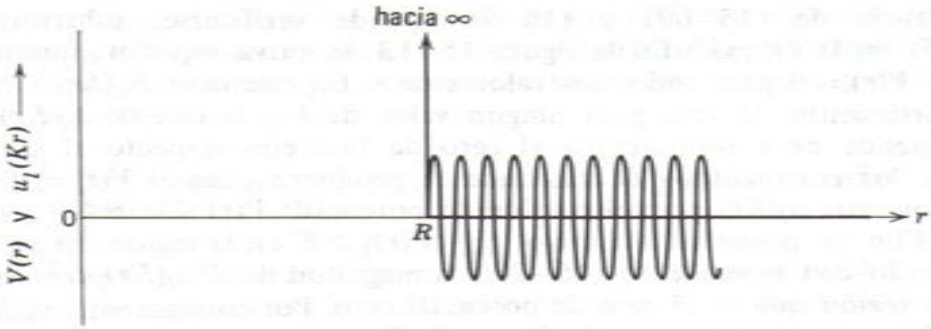

Figura 15-14. Una función propia y el potencial de dispersión para la dispersión de esferas duras.

y $u_l(Kr)$ ha sido desplazada hacia afuera un gran número de longitudes de onda. Así, resulta evidente que el corrimiento resultante de fase δ_l de $u_l(Kr)$ pueda tener cualquier valor en su intervalo de definición de $-180°$ a $+180°$, y que para $u_l(Kr)$ similares, los valores de δ_l se distribuirán al azar a lo largo de ese intervalo. Sin embargo, el postulado no es válido para todas las funciones $u_l(Kr)$. Para valores de l mayores que cierto $l_{\text{máx}}$, $u_l(Kr)$ no cambia de manera apreciable para ningún valor de r, por la presencia del potencial $V(r)$, y el cambio de fase δ_l es esencialmente cero. La razón es que $u_l(Kr) = rj_l(Kr)$ en ausencia de potencial, y es una propiedad de las funciones esféricas de Bessel $j_l(Kr)$ que sus valores sean muy pequeños para valores de r menores que $r_{\text{máx}} \simeq l/k$, la posición de su primer punto máximo. (Esta propiedad puede verificarse para las $j_l(Kr)$ de la ecuación (15–55).) Para valores suficientemente grandes de l, $r_{\text{máx}} > R$, de modo que $u_l(Kr) = rj_l(Kr)$ es despreciable en la región del potencial y su presencia no puede producir ningún cambio significativo. Podemos obtener una buena estimación de $l_{\text{máx}}$, haciendo que

$$l_{\text{máx}}/K \simeq r_{\text{máx}} \simeq R$$

o bien,

$$l_{\text{máx}} \simeq KR \tag{15–78}$$

Podemos obtener la misma estimación a partir del argumento clásico relativo a la ecuación (15–65), diciendo que una partícula de impulso angular mayor que $l_{\text{máx}}\hbar$ tendrá un parámetro de impacto mayor que $l_{\text{máx}}/K$ y, así, si $l_{\text{máx}}/K = R$, su parámetro de impacto será mayor que el radio del potencial. Clásicamente, esa partícula no golpeará al potencial y su movimiento no podrá verse afectado por su presencia. De acuerdo con la mecánica cuántica, el potencial no tendrá tampoco un efecto apreciable y el corrimiento de fase será despreciable para la función $u_l(Kr)$ de impulso angular correspondiente.

Para el problema que nos ocupa, resulta particularmente fácil el cálculo de una aproximación bastante precisa de la sección

$$\sigma = \frac{4\pi}{K^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \operatorname{sen}^2 \delta_l$$

www.FreeLibros.me

Hacemos que $\delta_l = 0$ para $l > l_{\text{máx}}$, *y que* δ_l sea un valor al azar para $l < l_{\text{máx}}$. Entonces, la suma se reduce a $l = l_{\text{máx}}$, y podemos reemplazar $\text{sen}^2\,\delta_l$ por su valor promedio $\frac{1}{2}$. Esto da:

$$\sigma \simeq \frac{4\pi}{K^2}\frac{1}{2}\sum_{l=0}^{l_{\text{máx}}}(2l+1)$$

Además, puesto que $l_{\text{máx}}$ es grande, muchos términos contribuyen a la suma y podemos aproximarnos a ese valor por medio de una integral sobre dl. En esa forma,

$$\sigma \simeq \frac{2\pi}{K^2}\int_0^{l_{\text{máx}}}(2l+1)\,dl \simeq \frac{2\pi}{K^2}\int_0^{l_{\text{máx}}}2l\,dl = \frac{2\pi(l_{\text{máx}})^2}{K^2}$$

Si usamos la ecuación (15–78), se obtiene:

$$\sigma \simeq 2\pi K^2R^2/K^2$$

o bien,

$$\sigma \simeq 2\pi R^2 \tag{15–79}$$

Sin embargo, no es fácil calcular, la sección diferencial puesto que es necesario determinar el comportamiento exacto de δ_l para valores de l cercanos a $l_{\text{máx}}$. Esto se debe a que $d\sigma/d\Omega$ involucra interferencias entre términos de diferentes valores de l (vea la ecuación 15–73) y es muy sensible a los valores de δ_l. Por consiguiente, presentamos sólo los resultados del cálculo en la figura 15–15. La sección diferencial de dispersión contiene un pico a ángulos muy pequeños con una anchura $\theta' \sim 1/KR$. A ángulos mayores, $d\sigma/d\Omega$ es isotrópico. La integral $\int(d\sigma/d\Omega)\,d\Omega$ sobre la región del pico tiene el valor πR^2, y la integral sobre la región isotrópica tiene el mismo valor. El pico representa un efecto de difracción que la teoría predice, incluso en el límite clásico. No se puede observar experimentalmente en este límite, debido a que θ' es sumamente pequeño; una medida clásica de la sección da la sección geométrica proyectada de área πR^2, y no $2\pi R^2$, debido a que falta la dispersión de difracción. Sin embargo, puede observarse la dispersión de difracción en experimentos de dispersión de partículas nucleares por núcleos, para los que θ' no es pequeño. Otro ejemplo es la dispersión de la radiación electromagnética por una esfera reflectora de radio R grande, en comparación con la longitud de onda, pero no tan grande como para que $\theta' \sim \lambda/R$ sea pequeño. Se encuentra que la sección diferencial tiene la forma que se muestra en la figura 15–15 y que su valor es $\sigma = 2\pi R^2$. La mitad de esto se debe a la reflexión de la radiación que choca con la esfera y la otra mitad se debe a la difracción de radiación, que pasa cerca de la esfera, a la sombra de su lado obscuro.

El análisis en ondas parciales proporciona un procedimiento exacto para resolver problemas de dispersión para todas las energías; sin embargo, por lo común, su aplicación a altas energías resulta una tarea formidable, debido a que K es grande, de modo que $KR \gg 1$, en donde R es el valor de r más allá

www.FreeLibros.me

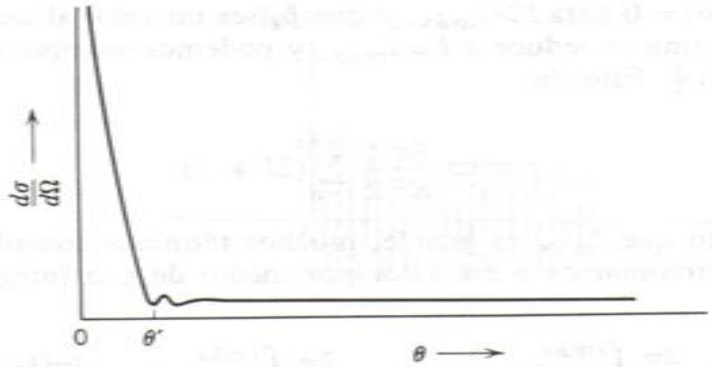

Figura 15-15. Sección diferencial para la dispersión de esferas duras.

del que el potencial de dispersión $V(r)$ es despreciable. Esto significa que la expresión (15–73) para $d\sigma/d\Omega$ contendrá contribuciones de muchos términos, puesto que para todos los valores de l hasta $l_{\text{máx}} \simeq KR$ habrá un cambio de fase apreciable. Para energías altas, generalmente es mucho más fácil utilizar la aproximación de Born que, con frecuencia, tiene una exactitud suficiente. La verdadera utilidad del análisis de ondas parciales es cuando se consideran energías bajas, en donde KR no es grande. En esta región normalmente no puede aplicarse la aproximación de Born, debido a que es muy inexacta; pero el análisis de ondas parciales es, a la vez, exacto y fácil de aplicar. Vamos a ilustrar lo expuesto, calculando las secciones de dispersión para un partícula de baja energía, incidente sobre un potencial simple, en el límite $KR \ll 1$.

La ecuación (15–78) nos indica que sólo el cambio de fase para $l = 0$ será apreciable en el límite $KR \ll 1$. En la terminología adoptada de la espectroscopia atómica, a esto se le llama *dispersión de onda S*. Para este caso, las expresiones (15–73) y (15–74) toman las formas simples:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{K^2}\{e^{-i\delta_0} \operatorname{sen} \delta_0 \, P_0(\cos\theta)\}\{e^{i\delta_0} \operatorname{sen} \delta_0 \, P_0(\cos\theta)\}$$

o bien,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\operatorname{sen}^2 \delta_0}{K^2}, \qquad KR \ll 1 \tag{15–80}$$

y

$$\sigma = \frac{4\pi \operatorname{sen}^2 \delta_0}{K^2}, \qquad KR \ll 1 \tag{15–81}$$

puesto que $\operatorname{sen} \delta_l$ es esencialmente cero para $l = 1, 2, 3, \ldots$ y que $P_0(\cos\theta) = 1$. Vemos que $d\sigma/d\Omega$ es isotrópico y σ es el ángulo sólido total 4π veces $d\sigma/d\Omega$, en el límite $KR \ll 1$.

www.FreeLibros.me

En este límite, calculemos σ para el potencial de atracción de pozo cuadrado,

$$V(r) = \begin{matrix} -V_0, & r < R \\ 0, & r > R \end{matrix} \tag{15–82}$$

que se ilustra en la figura 15–16. El cambio de fase δ_0 que produce ese potencial se evalúa hallando una solución para la ecuación (15–76) para $l = 0$, que se hace cero en $r = 0$.* La ecuación es:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)]u = 0 \tag{15–83}$$

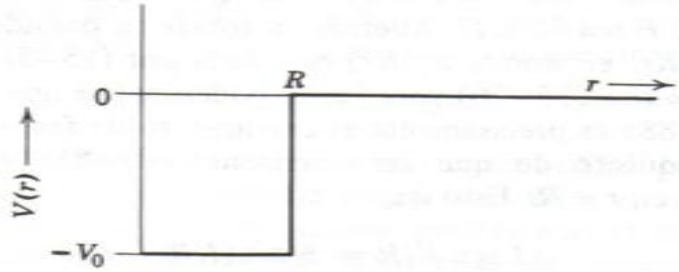

Figura 15-16. Potencial de atracción de pozo cuadrado.

En la región $r < R$, se puede escribir

$$\frac{d^2u}{dr^2} + K_0u = 0 \tag{15–84}$$

en donde,

$$K_0 = \sqrt{2\mu(E + V_0)}/\hbar \tag{15–84'}$$

La solución general a esta ecuación conocida es:

$$u = A \operatorname{sen} K_0r + B \cos K_0r, \qquad r < R$$

Para obtener el comportamiento requerido en $r = 0$, hacemos $B = 0$ y tomamos

$$u = A \operatorname{sen} K_0r, \qquad r < R \tag{15–85}$$

En la región $r > R$, la ecuación (15–83) puede escribirse:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + K^2u = 0 \tag{15–86}$$

* Vea la ecuación (15–75).

www.FreeLibros.me

en donde,

$$K = \sqrt{2\mu E}/\hbar \tag{15-86'}$$

La solución general para esto es

$$u = C \operatorname{sen} Kr + D \cos Kr, \qquad r > R \tag{15-87}$$

Se necesitan ambos términos para satisfacer el requisito de que u y du/dr sean continuos a $r = R$. Antes de aplicar estos requisitos, es conveniente volver a escribir la ecuación (15–87) como

$$u = F \operatorname{sen}(Kr + \delta_0), \qquad r > R \tag{15-88}$$

Puede verse la equivalencia de las ecuaciones (15–87) y (15–88), desarrollando la última para obtener $u = F \operatorname{sen} Kr \cos \delta_0 + F \cos Kr \operatorname{sen} \delta_0$, y haciendo que $F \cos \delta_0 = C$, $F \operatorname{sen} \delta_0 = D$. Además, al tomar en consideración la función $R_0(Kr) = u_0(Kr)/Kr$, en donde $u_0(Kr)$ está dada por (15–88) y comparándola en el límite $r \to \infty$ con (15–70) para $l = 0$, podemos ver que la cantidad δ_0 de la ecuación (15–88) es precisamente el corrimiento de fase de onda S. Ahora, apliquemos el requisito de que las ecuaciones (15–85) y (15–88) den el mismo valor de u en $r = R$. Esto da,

$$A \operatorname{sen} K_0 R = F \operatorname{sen}(KR + \delta_0) \tag{15-89}$$

Del requisito de que las ecuaciones (15–85) y (15–88) den el mismo valor de du/dr a $r = R$, se obtiene

$$AK_0 \cos K_0 R = FK \cos(KR + \delta_0) \tag{15-90}$$

Si dividimos la ecuación (15–89) por la (15–90), obtenemos:

$$\frac{K}{K_0} \tan K_0 R = \tan(KR + \delta_0)$$

o bien,

$$\tan^{-1}\left[\frac{K}{K_0} \tan K_0 R\right] = KR + \delta_0$$

de modo que

$$\delta_0 = \tan^{-1}\left[\frac{K}{K_0} \tan K_0 R\right] - KR \tag{15-91}$$

Si conocemos el corrimiento de fase, podemos calcular la sección de dispersión a partir de la ecuación (15–81). El cálculo es simple si utilizamos las condiciones $KR \ll 1$ y $K/K_0 \ll 1$, en el límite de E muy pequeña, y suponemos que $K_0 R$ no tiene un valor tal que $\tan K_0 R \gg 1$. Entonces, la ecuación (15–91) se convierte en:

$$\delta_0 \simeq \frac{K}{K_0} \tan K_0 R - KR \simeq \operatorname{sen} \delta_0$$

www.FreeLibros.me

o bien,

$$\operatorname{sen} \delta_0 \simeq KR\left(\frac{\tan K_0R}{K_0R} - 1\right)$$

y la (15–81) da:

$$\sigma \simeq 4\pi R^2\left(\frac{\tan K_0R}{K_0R} - 1\right)^2 \tag{15–92}$$

Esta ecuación aproximada predice $\sigma \to \infty$ para $K_0R = \pi/2,\ 3\pi/2, \ldots$ en donde $\tan K_0R$. Por supuesto, no se puede confiar en la ecuación para esos valores de K_0R, puesto que violan la suposición de la que se partió. La ecuación (15–91) exacta muestra que para esos K_0R, los corrimientos de fase $\delta_0 = K_0R$ y, a partir de la ecuación (15–81), vemos que para esos valores de δ_0 las secciones tienen los valores muy grandes, aunque finitos, de

$$\sigma = 4\pi/K^2. \tag{15–93}$$

Observe que esto puede escribirse como $\sigma = [4/(KR)^2]\pi R^2$ de tal modo que, puesto que $KR \ll 1$, σ es mucho mayor que πR^2, el área geométrica del potencial. Cuando σ toma su valor máximo posible para la dispersión de ondas S (15–93), se dice que la sección transversal de dispersión está en una *resonancia de onda S*. Se producen resonancias para otras ondas parciales, si E es suficientemente alta, de modo que haya grandes cambios de fase para $l > 0$. Por ejemplo, cuando $\delta_1 = \pi/2,\ 3\pi/2, \ldots$, la sección toma un valor particularmente grande, y se dice que está en una *resonancia de onda P*.

La ecuación aproximada (15–92) predice correctamente que $\sigma \to 0$ para K_0R que son soluciones de la ecuación $\tan K_0R = K_0R$. Para estos valores de K_0R, el corrimiento de fase de la onda S es $\delta_0 = \pi,\ 2\pi, \ldots$,* y descubrimos directamente, a partir de la ecuación (15–81), que $\sigma = 0$. Este comportamiento de la sección de dispersión puede verse en el *efecto de Ramsauer*, que es el término utilizado para describir el valor extremadamente pequeño de σ, medido en la dispersión de electrones de átomos de un gas noble, para una energía E de aproximadamente 1 ev. A energías bajas, sólo se ve afectada la onda S por el potencial de atracción muy definido, que ejerce el átomo de gas noble sobre un electrón que pasa aproximadamente a 1 ev, la onda S se ve atraída por la cantidad $\delta_0 \simeq \pi$ y $\sigma \simeq 0$.

En la figura 15–17 se muestran diagramas de la función $u_0(Kr)$ para un potencial de atracción de pozo cuadrado de radio R, que produce un cambio de fase $\delta_0 = \pi/2$, y para un potencial más profundo de pozo cuadrado del mismo radio, que produce un cambio de fase $\delta_0 = \pi$. Observe que esta figura y la 15–13, muestran que la amplitud de $u_l(Kr)$ es generalmente menor en la región $r < R$ que en la $r > R$, pero que la amplitud es igual en las dos regiones, cuando la onda parcial está en resonancia. Es conveniente para el

* $\delta_0 = 0$ no tiene interés físico, debido a que no corresponde a ningún potencial de dispersión.

www.FreeLibros.me

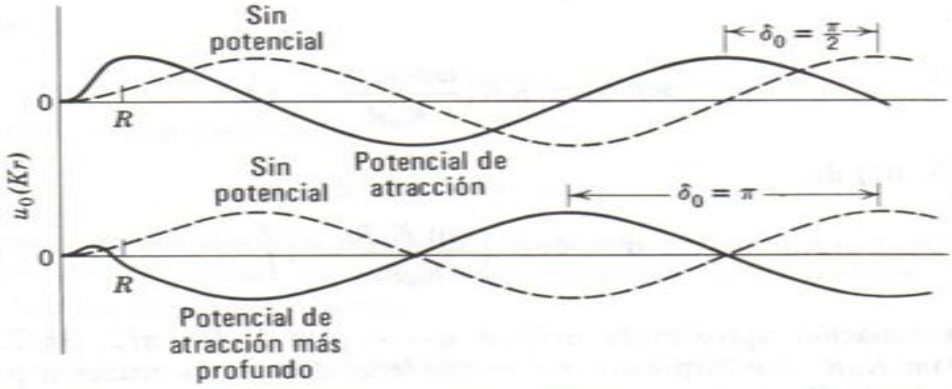

Figura 15-17. Dependencia radial de una función propia para dos potenciales de atracción de pozo cuadrado.

lector comparar esto, y las demás propiedades de los potenciales tridimensionales de dispersión, con las propiedades de un potencial unidimensional de dispersión, que se analizaron en las secciones 3 y 4 del capítulo 8. También sería instructivo comparar la condición $K_0R = \pi/2$, para la resonancia de onda S de energía más baja en el potencial (15–82), con la condición para que aparezca un nuevo estado ligado con $l = 0$ para ese potencial. Esto puede hacerse utilizando la solución a la ecuación de Schrödinger para el potencial (8–61), puesto que tiene exactamente la misma forma que la ecuación de Schrödinger (15–83) para un estado ligado con $l = 0$, en el potencial (15–82). Los resultados de esta comparación demostrarán que cuando el potencial liga un estado con $l = 0$, cerca de una energía total cero, tiene también una resonancia de onda S cerca de esa energía. Esto es también válido para valores más elevados de l y potenciales de cualquier forma. La razón para esta relación es fácil de comprender. Para una resonancia de energía baja, la función propia tiene un valor particularmente grande en la región del potencial, y ésta es exactamente la condición que caracteriza a un estado ligado. Además, puesto que para cualquier resonancia de energía alta, la función propia tiene también un valor particularmente grande en la región de potencial, la función propia para ese caso tiene cierta analogía con la función propia de un estado ligado. Por esta razón, se dice con frecuencia que un potencial tiene *estados o niveles virtuales* a todas las energías, para las que exhibe resonancias, incluso cuando esas energías sean todas positivas y correspondan a situaciones en las que la partícula, en realidad, *no esté ligada.*

Para $KR \ll 1$, sólo la onda S se ve afectada por el potencial de dispersión y $d\sigma/d\Omega$ es isotrópica. Al incrementarse KR, se ven afectadas ondas parciales de impulso angular más alto; para $KR = 1$, la onda P se verá afectada de manera considerable y la D en forma ligera. Cuando estas ondas parciales comienzan a contribuir a la dispersión, la ecuación (15–73) demuestra que $d\sigma/d\Omega$ no será ya isotrópica. Cuando una cantidad cada vez mayor de ondas parciales contribuyen a $d\sigma/d\Omega$, su estructura se hace cada vez más complicada. Esto puede verse, comparando $d\sigma/d\Omega$, isotrópica, que acabamos de obtener para un pozo cuadrado de atracción en el límite $KR \ll 1$, con el $d\sigma/d\Omega$ altamente no

www.FreeLibros.me

isotrópico para ese potencial en el límite de energía alta $KR \gg 1$, que obtuvimos con la aproximación de Born, en la sección 4. La sección diferencial de dispersión $d\sigma/d\Omega$ no sólo muestra más estructura al aumentar KR, sino que, asimismo, se hace más sensible a la forma exacta del potencial de dispersión $V(r)$. Como ejemplo, compare la independencia completa de la estructura de la $d\sigma/d\Omega$ isotrópica de la forma de $V(r)$ en el límite $KR \ll 1$ con la fuerte dependencia demostrada en el límite $KR \gg 1$ para los potenciales estudiados en la sección 4.

Esta situación refleja simplemente el hecho de que los detalles de la forma del potencial sólo pueden ser importantes si la longitud de onda de De Broglie para la partícula dispersada, $\lambda = 2\pi/K$, es suficientemente pequeña en comparación con el tamaño del potencial R, para permitir que la partícula resuelva esos detalles. Estas conclusiones tienen una gran importancia práctica en la física nuclear, en donde no se conoce *a priori* la forma de $V(r)$, sino que debe inferirse por medio de medidas analíticas de $d\sigma/d\Omega$. Para estudiar los detalles de $V(r)$, es necesario medir $d\sigma/d\Omega$ para partículas de alta energía. Por lo común, el análisis de las medidas es muy difícil (a menos que la energía sea tan elevada que la aproximación de Born resulte suficientemente exacta), debido a que en la ecuación (15–73) entran muchas ondas parciales; sin embargo, no es imposible, gracias a máquinas computadoras electrónicas de alta velocidad.

Vamos a concluir esta exposición, mencionando un potencial muy importante, que no puede estudiarse directamente mediante el método que hemos desarrollado. Se trata del potencial de Coulomb $V(r) \propto 1/r$. Puesto que este potencial no tiende a cero al aumentar r con mayor rapidez que $1/r$, la expresión (15–70) no es válida. Es posible modificar el método de tal forma que pueda estudiarse el potencial, pero debido a que esto es muy complicado, sólo presentaremos los resultados. Se ha descubierto que para una partícula de masa reducida μ y velocidad inicial v, dispersada por un potencial de Coulomb $V(r) = zZe^2/r$, la sección diferencial es:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{zZe^2}{2\mu v^2}\right)^2 \frac{1}{\operatorname{sen}^4(\theta/2)} \tag{15–94}$$

La comparación con la ecuación (4–18) y un momento de reflexión, demostrarán que estos resultados de la teoría de la mecánica cuántica son idénticos a los de la teoría clásica de Rutherford de la dispersión por un potencial de Coulomb. Esta situación notable sólo es cierta para un potencial correspondiente a una ley de fuerza del inverso del cuadrado y se presenta de la manera siguiente. A partir de un análisis dimensional puede demostrarse que si la fuerza ejercida en una partícula varía de acuerdo con r^n, entonces, la sección debe variar de acuerdo a h^{4+2n}. Para la ley del inverso del cuadrado, $n = -2$, la sección es independiente del valor de la constante de Planck h y esto requiere una correspondencia entre los resultados de los cálculos de la sección por la mecánica cuántica y la clásica. De hecho, para el potencial de Coulomb, incluso la aproximación de Born da una $d\sigma/d\Omega$ idéntica a la (15–94), como puede comprobar el lector con muy poca dificultad. Es por esto que la aproximación de Born es bastante exacta para la dispersión de electrones

www.FreeLibros.me

desde átomos, a energías tan bajas como ~100 ev. La aproximación es buena en las capas externas del átomo, debido a que, ahí, la energía de dispersión del electrón es grande en comparación al potencial no coulombiano. Es también buena en las capas internas, aunque la energía no es grande en comparación con el potencial, debido a que este último es esencialmente de Coulomb.

7. Absorción

La teoría que hemos desarrollado hasta ahora se ocupa sólo de la dispersión producida por el potencial $V(r)$ que representa la interacción entre la partícula incidente y el blanco. Pero hay también procesos en los que la partícula blanco absorbe a la incidente. Un ejemplo, en física atómica, sería la captura de un electrón incidente por un átomo que conduce a la formación de un ion negativo estable y la reemisión de un electrón de poca energía. En física nuclear hay muchos ejemplos de la captura de una partícula nuclear incidente por un núcleo blanco, lo cual conduce a cierta reacción nuclear. En esta sección nos ocuparemos de los procedimientos utilizados para tratar los procesos de absorción en la teoría de Schrödinger. Debe entenderse que utilizamos la palabra "absorción" para incluir a todos los procesos, excepto la dispersión sin pérdida de energía en el marco del CM (dispersión elástica); en particular, la absorción incluye la dispersión con pérdida de energía en el marco del CM (dispersión no elástica). La palabra "dispersión" se utiliza en este punto, lo mismo que en el resto de este capítulo y el libro, tan sólo con el significado de dispersión sin pérdida de energía en el marco del CM.*

En la ecuación (15–47) vimos que la amplitud de las ondas que se desplazan radialmente hacia afuera, dispersadas por un ángulo θ, es proporcional a la cantidad $f(\theta)$. De acuerdo con la expresión (15–72), esto es

$$f(\theta) = \frac{1}{2iK}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(\eta_l - 1)P_l(\cos\theta) \tag{15–95}$$

en donde escribimos

$$\eta_l = e^{2i\delta_l} \tag{15–96}$$

Las ecuaciones (15–68) y (15–70) muestran que la función propia total que describe a las ondas planas incidentes más las ondas dispersas, pueden escribirse como ondas estacionarias radiales. Estas ondas estacionarias radiales se pueden descomponer en ondas que se desplazan radialmente hacia adentro y hacia afuera. Al hacer esto, se descubre que η_l de la relación (15–96) especifica las amplitudes y las fases de las ondas que se desplazan radialmente hacia afuera, en relación a las que lo hacen hacia adentro. Por ejemplo, cuando $\eta_l = 1$ o $\delta_l = 0$ para todos los valores de l, las ondas que se desplazan hacia adentro y hacia afuera tienen las mismas amplitudes y fases, que se

* Observe que en el marco del LAB hay siempre, por lo menos, una pequeña pérdida de energía en "dispersión", debido al retroceso de la partícula golpeada.

www.FreeLibros.me

combinan para dar una función propia total que describe a las ondas planas incidentes; pero *no* a las dispersadas. Si $\eta_l = e^{2i\delta_l} \neq 1$ para algún valor de l, debido a que $\delta_l \neq 0$, las ondas que se desplazan hacia adentro y hacia afuera tienen las mismas amplitudes, pero fases diferentes, y se combinan para dar una función propia total que describe a las ondas planas incidentes y *algunas* ondas dispersas.

Para incluir tanto la absorción como la dispersión ampliamos la relación (15–96).

$$\eta_l = A_l e^{2i\delta_l}, \qquad A_l \leqslant 1 \tag{15–97}$$

en donde las A_l son reales. Si $A_l < 1$ para algún valor de l, la amplitud de la onda saliente que es proporcional a A_l será menor que la amplitud de la onda asociada entrante, que es proporcional a 1. Así, hay un flujo neto de probabilidad hacia el interior, proporcional a la diferencia entre la intensidad hacia adentro y hacia afuera, o sea, proporcional a $1 - A_l^2 = 1 - \eta_l^* \eta_l$. Esto implica absorción. La *sección de absorción* σ_A puede evaluarse en términos de η_l, utilizando la extensión tridimensional de la definición del flujo de probabilidad (7–31), para calcular el flujo neto hacia adentro, integrado sobre todos los ángulos. La *sección de dispersión* σ_S puede evaluarse como lo hicimos antes. Los resultados son:

$$\sigma_A = \frac{\pi}{K^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)(1 - \eta_l^* \eta_l) \tag{15–98}$$

$$\sigma_S = \frac{\pi}{K^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)(1 - \eta_l^*)(1 - \eta_l) \tag{15–99}$$

Es fácil verificar que la expresión (15–99) se reduce a la (15–74), si $A_l = 1$ para todos los valores de l. La *sección total*, σ_T, se define como

$$\sigma_T = \sigma_S + \sigma_A \tag{15–100}$$

Si utilizamos las ecuaciones (15–98) y (15–99), además de un poco de álgebra, descubrimos que:

$$\sigma_T = \frac{2\pi}{K^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)\left(1 - \frac{\eta_l^* + \eta_l}{2}\right) \tag{15–101}$$

La *sección diferencial*, $d\sigma_S/d\Omega$ se obtiene inmediatamente, a partir de las ecuaciones (15–50) y (15–95). El resultado es:

$$\frac{d\sigma_S}{d\Omega} = f^*(\theta)\, f(\theta) = \frac{1}{4K^2} \left\{ \sum_{l'=0}^{\infty} (2l' + 1)(\eta_{l'}^* - 1) P_{l'}(\cos\theta) \right\} \times \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)(\eta_l - 1) P_l(\cos\theta) \right\} \tag{15–102}$$

No se definen las secciones total y de absorción diferencial.

Estas ecuaciones muestran que las secciones de absorción y dispersión no son independientes. Si hay absorción, debe haber dispersión, puesto que, para

www.FreeLibros.me

que no la haya, es necesario que $\eta_l^* = \eta_l = 1$ para los valores de l, y si es así, no puede haber absorción. Sin embargo, la inversa no es cierta. Si hay dispersión, no habrá necesariamente absorción, puesto que es posible que $\eta_l^* \eta_l = 1$, y tener todavía $\eta_l^* \neq 1$, $\eta_l \neq 1$.

Como ejemplo muy sencillo veamos la interacción en el límite clásico de una esfera pequeña que incide sobre una esfera grande y supongamos que la esfera incidente se absorbe siempre que $r \leqslant R$, donde el radio de interacción R es la suma de los radios de las dos esferas. Este problema de la esfera perfectamente absorbente puede estudiarse similarmente al problema de la esfera perfectamente reflejante, que vimos en la sección anterior. En este caso, la función propia total puede contener sólo ondas entrantes para $l \leqslant l_{\text{máx}} = KR$, y contendrá la combinación normal de ondas entrantes y salientes, para $l > l_{\text{máx}}$. Así,

$$\eta_l = 0, \qquad l \leqslant l_{\text{máx}}$$
$$\eta_l = 1, \qquad l > l_{\text{máx}}$$
$$l_{\text{máx}} = KR$$

En las dos ecuaciones (15–98) y (15–99), las sumas tienen sólo contribuciones para $l \leqslant l_{\text{máx}}$, y

$$\sigma_A = \sigma_S = \frac{\pi}{K^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{máx}}} (2l + 1)$$

Del mismo modo que en el trabajo que precedió a la ecuación (15–79), podemos usar una integral para aproximarnos a la suma. El resultado es:

$$\sigma_A = \sigma_S = \frac{\pi (l_{\text{máx}})^2}{K^2} = \frac{\pi K^2 R^2}{K^2} = \pi R^2 \tag{15–103}$$

y tenemos, también,

$$\sigma_T = \sigma_A + \sigma_S = 2\pi R^2 \tag{15–104}$$

La sección de absorción es el área geométrica, πR^2, como era de esperarse. Sin embargo, hay también una sección de dispersión de magnitud igual. Esta es la difracción de partículas incidentes que pasan cerca de la esfera absorbente a la sombra de su lado posterior y es, exactamente, el mismo fenómeno que puede descubrirse en el caso de la esfera de reflexión. Como lo dijimos anteriormente, la dispersión de difracción no puede observarse en el campo clásico, debido a que el ángulo $\theta' \sim 1/KR$, dentro del que se produce, es demasiado pequeño. No obstante, la dispersión de difracción puede observarse con claridad y es muy importante en el caso nuclear.

En ejemplos más típicos de problemas que implican absorción, no es posible evaluar η_l por medio de argumentos cualitativos, y estas cantidades deben determinarse a partir de la solución de una ecuación apropiada de Schrödinger. En realidad, es posible escribir una ecuación de Schrödinger para una situación en la que se absorbe la probabilidad de la mecánica cuántica,

www.FreeLibros.me

aun cuando hasta ahora siempre hayamos visto que se conserva. Esto puede hacerse, utilizando como potencial de interacción, la *función compleja*

$$V(r) + iW(r) \tag{15–105}$$

en donde $V(r)$ y $W(r)$ son ambas reales, y para la absorción, $W(r) \leqslant 0$ en toda r (para la emisión, $W(r) > 0$). Hay varias maneras de demostrar que la presencia de un término imaginario en el potencial de interacción conduce a la absorción (o la emisión). Por ejemplo, partiendo de la ecuación (7–26) y efectuando los cálculos subsiguientes con un potencial complejo $V(x) + iW(x)$ y una región pequeña de x_1 a x_2, el lector puede demostrar que la probabilidad de mecánica cuántica absorbida por unidad de tiempo en esta región es $-(2W/\hbar)\Psi^*\Psi(x_2 - x_1)$, en donde W y $\Psi^*\Psi$ se evalúan en algún punto típico de la región. La rapidez de absorción de probabilidad por unidad de longitud es,

$$R = -\frac{2W}{\hbar}\Psi^*\Psi \tag{15–106}$$

En tres dimensiones, el mismo término de la rapidez de absorción de probabilidad por unidad de volumen. En los últimos años, se han utilizado mucho los potenciales complejos para describir las interacciones entre partículas nucleares y núcleos.

BIBLIOGRAFIA

Bohm, D., *Quantum Theory*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1951.
Schiff, L. I., *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

EJERCICIOS

1. Efectúe los cálculos que conducen a la ecuación (15–17).

2. Verifique que la ecuación (15–18) es una solución para la (15–19).

3. Utilice la aproximación de Born para calcular $d\sigma/d\Omega$ para el *potencial de Coulomb apantallado* $V(r) = (zZe^2/r)e^{-r/d}$, que proporciona una aproximación útil al potencial entre una partícula cargada y un átomo neutro, si d se hace igual al radio del átomo. Entonces deje que $d \to \infty$, y demuestre que $d\sigma/d\Omega$ se aproxima a la sección transversal de dispersión diferencial de Coulomb normal (15–94), cuando $V(r)$ se acerca al potencial de Coulomb normal.

4. Para las funciones de Bessel, incluidas en la expresión (15–56), verifique que, como se indicó en las secciones 5 y 6: *a*), $j_l(Kr) \propto r^l$, $r \to 0$; *b*), $j_l(Kr) = \text{sen}\,(Kr - l\pi/2)/Kr$, $r \to \infty$; *c*) el primer punto máximo de $j_l(Kr)$ se localiza en $r_{\text{máx}} \simeq l/K$.

5. Verifique la ecuación (15–74).

6. Utilizando el procedimiento indicado en la sección 6, demuestre que la condición para la resonancia de onda S de energía más baja es la misma que la condición para que el potencial ligue un estado con $l = 0$, cerca de la energía total 0.

7. Utilice el análisis de ondas parciales para calcular $d\sigma/d\Omega$ y σ para la dispersión por esferas duras con $KR = 0.1$, tomando sólo en consideración ondas S y, así mismo, con

www.FreeLibros.me

$KR = 0.5$, tomando sólo en consideración ondas S y P. Trace un diagrama de los valores $d\sigma/d\Omega$ obtenidos en ambos cálculos. *Sugerencia:* para $r > R$ es necesario utilizar la solución general para la ecuación diferencial en r. Esto es $A_l j_l(Kr) + B_l n_l(Kr)$, en donde cada $n_l(Kr)$ puede generarse a partir del $j_l(Kr)$ correspondiente, reemplazando en todas partes cos por sen y sen por $-$cos.

8. Derive la ecuación (15–106).

www.FreeLibros.me

CAPÍTULO 16

Los núcleos

1. Introducción

Puede decirse que las propiedades del átomo se conocen perfectamente. Se conoce la naturaleza de las fuerzas que actúan entre sus partes, y la mecánica cuántica proporciona una técnica completa para evaluar los efectos de dichas fuerzas. Sin embargo, no puede decirse lo mismo respecto al núcleo. A pesar del gran progreso logrado en años recientes, todavía se desconoce la naturaleza de las fuerzas que actúan entre sus partes; es más, ni siquiera tenemos la certeza de que la mecánica cuántica proporcione una técnica perfectamente adecuada para evaluar los efectos de estas fuerzas cuando se llegue a conocerlas. No existe todavía una *teoría* bien establecida del núcleo, que permita entender todas las propiedades del mismo. No obstante, existen varios *modelos* rudimentarios de validez restringida, cada uno de los cuales puede explicar una parte limitada de sus propiedades. En la etapa actual, el estudio del núcleo se reduce, en su mayor parte, al análisis de estos modelos. Una consecuencia inevitable de esta situación es que cualquier estudio del núcleo carece, por fuerza, de la coherencia que caracteriza al que se puede hacer del átomo. Por otro lado, el mismo hecho de que no todo lo referente al núcleo sea conocido hace que el tema sea especialmente interesante.

Iniciaremos nuestro estudio del núcleo, recapitulando los datos pertinentes que hemos reunido al analizar el átomo y agregando otras informaciones.

1. Describimos brevemente (capítulo 4) el descubrimiento de Becquerel de la radioactividad de los átomos pesados y la identificación de las partículas alfa como átomos de He doblemente ionizados. Las partículas beta se identificaron como electrones veloces, midiendo la relación entre su carga y su masa. Se supuso que los rayos gamma eran radiación electromagnética y esto quedó confirmado, demostrando que se pueden difractar por un cristal como otras formas de radiación. Después de que Rutherford descubrió el núcleo, a partir de un análisis de la dispersión de partículas alfa (capítulo 4), pareció establecerse que la radioactividad implica la participación de núcleos inestables de átomos pesados. Más tarde estudiaremos en este capítulo las emisiones alfa, beta y gamma, producidas por este tipo de núcleos; pero primeramente nos concentraremos en las propiedades de los núcleos estables en sus estados base.

www.FreeLibros.me

2. Vimos también (capítulo 4), que la masa de un núcleo es ligeramente menor que la del átomo correspondiente. En consecuencia, la masa nuclear es casi igual al entero A veces la masa de un átomo de H o aproximadamente igual a A por la masa de un *protón*, que es el núcleo de un átomo de H. El entero A es el más cercano al peso atómico del átomo.* También vimos que la carga de un núcleo es exactamente igual al número atómico Z veces la carga de un electrón con signo negativo, o bien, exactamente, Z veces la carga de un protón. La tabla periódica de los elementos indica que A es, aproximadamente, $2Z$, excepto para el protón para el cual $A = Z = 1$.

3. El análisis de la dispersión de partículas alfa por núcleos de A baja (capítulo 4), demostró que los radios de estos núcleos son del orden de 10^{-12} cm, en donde el radio se define como la distancia desde el centro del núcleo, en el que el potencial que actúa sobre la partícula alfa tiene su primera desviación de un potencial de Coulomb. El análisis de la rapidez de la emisión alfa desde núcleos radioactivos de A alta (capítulo 8), indicó que los radios de estos núcleos, definidos en la misma forma, eran $\simeq 9 \times 10^{-13}$ cm. Observe que la relación de la densidad de un núcleo a la densidad de la materia en el estado sólido es:

$$\frac{\text{densidad del núcleo}}{\text{densidad de la materia sólida}} \sim \frac{[\text{volumen del núcleo}]^{-1}}{[\text{volumen del átomo}]^{-1}} \sim \frac{[(10^{-12})^3]^{-1}}{[(10^{-8})^3]^{-1}} = 10^{12}$$

Así que, la densidad de un núcleo es $\sim 10^{12}$ gm-cm^{-3}.

4. La palabra "radio" implica que el núcleo tiene una forma esférica. Hemos visto que el estudio de la estructura atómica hiperfina (capítulo 13) ha demostrado que la distribución de carga de los núcleos no es del todo esférica, sino que forma un elipsoide de revolución, con un eje de simetría a lo largo de la dirección en torno a la cual se efectúa la precesión vectorial del impulso angular del spin nuclear. Como consecuencia, los núcleos tienen un momento cuadripolar eléctrico Q. Hemos aprendido que para núcleos de número cuántico de impulso angular de spin $i \geqslant 1$, hay casos en los que $Q > 0$ (elipsoide alargado en la dirección del eje de simetría), así como también casos de $Q < 0$ (elipsoide aplastado en la dirección del eje de simetría); pero para $i = 0$ o $\frac{1}{2}$, $Q = 0$. Sin embargo, las desviaciones de la esfericidad nunca son muy grandes; en casos extremos, la relación del eje semimayor al semimenor es de $\simeq 1.2$. Por esto, con frecuencia es posible pasar por alto esas desviaciones y dar por sentada la forma esférica. Los núcleos no tienen momentos dipolares eléctricos, ya que correspondería a un desplazamiento constante del centro de distribución de la carga a partir del centro de distribución de masa; lo que no es posible.

5. Los núcleos tienen momentos dipolares magnéticos como se muestra también en el estudio de la estructura atómica hiperfina (capítulo 13). Vimos que las magnitudes de esos momentos dipolares magnéticos son $\sim \mu_N = e\hbar/2Mc \sim 10^{-3}\mu_B$, en donde μ_N es el magnetón nuclear, M es la masa del protón y μ_B es el magnetón de Bohr. La estructura hiperfina muestra también

* Para cualquier isótopo de un átomo, el peso atómico es siempre muy cercano a un entero. El término "isótopo" se explicará en la sección 4.

www.FreeLibros.me

que los signos de los momentos dipolares magnéticos (la orientación relativa del vector de momento dipolar magnético y el vector de impulso angular de spin nuclear) son positivos, en algunos casos, y negativos, en otros.

6. El número cuántico de momento angular de spin i puede medirse directamente de la estructura atómica hiperfina. Como lo vimos ya (capítulo 13), i es entero cuando A es par, con $i = 0$ cuando Z es también par, e i es semientero cuando A es non. La magnitud I del impulso angular de spin nuclear se da en términos de i, mediante la relación $I = \sqrt{i(i+1)}\,\hbar$.

7. El carácter simétrico de la función propia para un sistema que contenga dos o más núcleos de la misma especie se encuentra estrechamente relacionado con el spin nuclear (capítulo 12). Esto se estudia analizando los espectros de moléculas diatómicas que contengan dos núcleos idénticos y, como hemos indicado, se encuentra que los núcleos de número cuántico entero de spin (A par) son del tipo simétrico, mientras que los núcleos de número cuántico semientero de spin (A impar) son asimétricos.

2. Composición de los núcleos

Con una excepción, $A \sim 2Z$ para todos los núcleos (la excepción es el protón para el que $A = Z = 1$). A partir de esto, resulta evidente que un núcleo con un valor dado de A no puede componerse tan sólo de A protones, ya que su Z sería $Z = A$, en lugar de $Z \sim A/2$. Antes de 1932, se aceptaba generalmente que un núcleo se compone de A protones y $(A - Z)$ electrones. Esto da la carga correcta y, además, permite que la masa esté correcta; sin embargo, se descubrió que la suposición de que los núcleos contienen a los electrones presenta graves dificultades.

Aunque esa teoría hacía que resultara fácil comprender el modo en que los electrones podían ser emitidos por los núcleos en el proceso de emisión beta, se presentaron problemas relativos a la magnitud de la energía de punto cero necesaria para confinar una partícula de masa tan pequeña como un electrón en una región espacial tan diminuta como es el núcleo. Al aplicar directamente el principio de incertidumbre y evaluar el impulso a partir de la ecuación $E = cp$ que se obtiene para partículas muy relativistas, el lector puede demostrar que la energía cinética de un electrón confinado en una región de dimensiones de 10^{-12} cm debe ser $\gtrsim 100$ Mev. Esto era difícil de reconciliar con el hecho de que la energía cinética típica de un electrón emitido en el proceso de emisión beta es ~ 1 Mev.

También era difícil reconciliar la observación de que todos los momentos dipolares magnéticos nucleares son tres órdenes de magnitud menores que el momento dipolar magnético de un electrón, de acuerdo con la suposición de que los núcleos contienen a los electrones.

La dificultad insuperable para esa suposición partió de una consideración de los núcleos en donde A es par y Z impar; v.g.: el núcleo del átomo N, con $A = 14$, $Z = 7$. De acuerdo con las reglas conocidas, se observa que el número cuántico de impulso angular de spin para este núcleo es un entero (específicamente, $i = 1$) y que el carácter de simetría es simétrico; sin embargo, si contiene 14 protones y 7 electrones, su número cuántico de spin debería ser

www.FreeLibros.me

necesariamente semientero y su carácter de simetría obligatoriamente asimétrico, puesto que tanto el protón como el electrón tienen un número cuántico de spin $i = \frac{1}{2}$ y tienen un carácter de simetría asimétrico, y porque $14 + 7 = 21$, o sea, un número impar. A partir de las reglas para la suma del impulso angular de spin y el orbital, que presentamos en el capítulo 13, puede verse con facilidad que un sistema que contenga un número impar de partículas con número cuántico semientero de spin, sólo puede tener un impulso angular total (el impulso angular de spin nuclear) correspondiente a un número cuántico semientero. Asimismo, por la exposición del capítulo 12, podemos llegar a la conclusión de que el carácter de simetría de un sistema que contenga un número impar de partículas de carácter antisimétrico, debe ser asimétrico.

Varios años antes de su descubrimiento, en 1932, Rutherford postuló la existencia de una partícula que tuviera la misma masa e igual carácter de simetría y número cuántico de spin que el protón, pero con carga cero. Se trata de la partícula que conocemos actualmente como *neutrón*. Una de las razones de ese postulado fue que los problemas señalados anteriormente no se originarían si se suponía que los núcleos se componían de protones y neutrones. En particular, el spin y el carácter de simetría del núcleo de N estaría de acuerdo con las observaciones, si contuviera 7 protones y 7 neutrones. Por supuesto, eso iría también de acuerdo con la masa y la carga requeridas para $A = 14$ y $Z = 7$. Fueron muchos los que idearon experimentos para detectar al neutrón; pero era algo muy difícil, toda vez que, puesto que carece de carga, el neutrón no puede producir ionización en forma directa y la mayoría de los dispositivos para detectar partículas dependen de la ionización.

Vamos a describir la secuencia de experimentos e interpretaciones conducentes al descubrimiento del neutrón, por su gran importancia histórica y, asimismo, porque proporciona buenos ejemplos de algunas de las primeras técnicas de investigación nuclear. En 1919, Rutherford bombardeó un blanco de núcleos de N con partículas alfa de 7.7 Mev, producidas por una fuente radioactiva y descubrió que el blanco emitía partículas cargadas de largo alcance. El aparato experimental, que utiliza una pantalla de centelleo de ZnS (vea la sección 3, capítulo 4), como detector de partículas cargadas, se indica esquemáticamente en la figura 16–1. El *alcance* de una partícula cargada es el espesor de algún material absorbente estándar que puede atravesar, antes de perder toda su energía cinética por la ionización de los átomos de la materia absorbente, y detenerse. Esa cantidad aumenta monótonamente con la velocidad de la partícula y disminuye monótonamente con su carga. El alcance de las partículas emitidas por los núcleos de N del blanco era tan largo que, inequívocamente, podía identificarse como protones, ya que el alcance de estas partículas es mucho más grande que el de las partículas alfa de energías

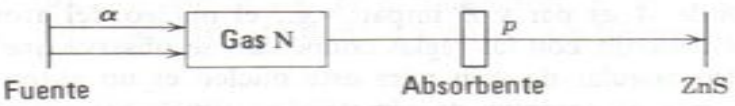

Figura 16-1. Aparato utilizado en la primera reacción nuclear producida artificialmente.

www.FreeLibros.me

comparables, debido a que poseen velocidades más altas y cargas menores. El experimento de Rutherford constituyó la primera reacción nuclear producida artificialmente

$$^{2}He^{4} + {}^{7}N^{14} \rightarrow {}^{8}O^{17} + {}^{1}H^{1} \qquad (16\text{–}1)$$

La ecuación representa la reacción e introduce una notación muy útil: $^{2}He^{4}$ es la *partícula proyectil*, una partícula alfa que es el núcleo de He, con $Z = 2$, $A = 4$; $^{7}N^{14}$ es el *núcleo blanco*, un núcleo de N con $Z = 7$, $A = 14$; $^{8}O^{17}$ es el *núcleo residual*, un núcleo de O con $Z = 8$, $A = 17$; y $^{1}H^{1}$ es la *partícula producida*, un protón que es el núcleo de H con $Z = 1$, $A = 1$.

Durante los años siguientes se estudiaron varias otras reacciones que, esencialmente, eran del mismo tipo; no obstante, en 1930, Bothe y Becker descubrieron una reacción de un tipo diferente. Utilizaron un arreglo similar al que se muestra en la figura 16–1, con la excepción de que reemplazaron la pantalla de centelleo de ZnS con un contador Geiger. Este es una cámara llena de gas y que contiene un alambre fino que se mantiene a un voltaje positivo con respecto a las paredes. Cualquier proceso de ionización que tiene lugar en el interior de la cámara libera uno o más electrones, que reciben una aceleración tan fuerte hacia el alambre que producen una ionización adicional, mediante colisiones con los átomos del gas. Este proceso se repite y se forma rápidamente una avalancha de electrones. El alambre reúne suficiente carga, como resultado de una *sola* ionización inicial, para producir un pulso eléctrico fácilmente detectable. Utilizando partículas alfa de energía cinética de 5.3 Mev, Bothe y Becker descubrieron que al bombardear núcleos de Be o de B, se emitían partículas no cargadas, capaces de atravesar materias absorbentes muy gruesas, con poca atenuación. Supusieron, erróneamente, que eran cuantos de energía muy alta (rayos gamma). Un contador Geiger puede detectar cuantos, ya que éstos pueden producir electrones en el gas por medio del efecto fotoeléctrico, el efecto de Compton o la producción de pares.

En 1932, I. Curie y Joliot realizaron trabajos más profundos sobre esa reacción y descubrieron, de manera absolutamente accidental, que al colocar una capa de material hidrogenado frente al contador Geiger, la rapidez del conteo aumentaba. Pronto comprendieron que ese efecto se debía a la emisión de protones de la capa hidrogenada, como resultado de su bombardeo por las partículas no cargadas. Los contadores Geiger registran mucho más fácilmente los protones, que están cargados, que los cuantos u otras partículas no cargadas. En la figura 16–2 se ilustra el aparato utilizado por Curie y Joliot. Al medir el alcance en el absorbente de los protones emitidos por la capa hidrogenada, se pudieron determinar las velocidades o las energías de esos

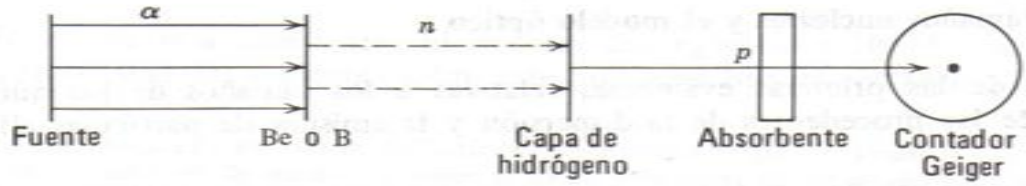

Figura 16-2. Aparato utilizado en el descubrimiento del neutrón.

www.FreeLibros.me

protones, a partir de la relación conocida entre el alcance y la velocidad. Curie y Joliot descubrieron que la energía del protón del núcleo blanco de Be era de $E_p \simeq 4.5$ Mev. De acuerdo con Bothe y Becker, supusieron que los cuantos incidentes sobre la capa hidrogenada emitían protones por un proceso análogo al de dispersión de Compton. Asimismo, evaluaron E_γ, la energía mínima necesaria para emitir un protón de 4.5 Mev. Esto dio como resultado $E_\gamma \simeq 50$ Mev, como puede verificar el lector, utilizando las ecuaciones de la sección 8, capítulo 3 (reemplazando la masa del electrón por la del protón).

Poco después de este desarrollo experimental, Chadwick demostró que su interpretación era insostenible y que las partículas no cargadas emitidas desde núcleos de Be o de B, bajo el bombardeo de partículas alfa, no eran cuantos, sino los tan buscados neutrones. Primeramente, demostró que el número de protones emitidos de la capa hidrogenada era varios órdenes de magnitud menor que lo predicho por la ecuación (14–36) de Klein-Nishina (reemplazando la masa del electrón por la del protón), si las partículas incidentes no cargadas fueran cuantos de 50 Mev. A continuación, demostró que no es energéticamente posible que se libere un cuanto de 50 Mev en una reacción en la que un núcleo de Be captura una partícula alfa de 5.3 Mev, para formar un núcleo de C. Este cálculo se basa en el conocimiento de la masa de la partícula alfa, la del núcleo de Be, la del núcleo de C y la relación de Einstein (1–23) entre la masa y la energía. En la sección 4 efectuaremos varios de esos cálculos. Por el momento, basta decir que un cálculo similar demostró que todos los resultados experimentales concordaban, al suponer que la reacción involucrada en el caso del núcleo de blanco de Be es

$$^{2}He^{4} + {}^{4}Be^{9} \rightarrow {}^{6}C^{12} + {}^{0}n^{1} \qquad (16\text{–}2)$$

en donde $^{0}n^{1}$ es el neutrón, con $Z = 0$, $A = 1$. Una reacción similar puede explicar los experimentos realizados con un núcleo blanco de B. Mediante esta suposición, la emisión de protones de la capa hidrogenada se podría interpretar como una colisión simple entre una partícula incidente, el neutrón, y una partícula estacionaria libre de igual masa, el protón.* Así, la energía mínima del neutrón que se requiere para emitir un protón de 4.5 Mev es $E_n = 4.5$ Mev, y esto va de acuerdo con las restricciones impuestas por las masas de las entidades que aparecen en la expresión (16–2) más la relación entre la masa y la energía.

Desde el descubrimiento del neutrón, no ha habido nunca la menor duda de que un núcleo se compone de Z protones y $(A - Z)$ neutrones. Así, un núcleo contiene $Z + (A - Z) = A$ *nucleones*, un término que aplica tanto a los protones como a los neutrones.

3. Los tamaños nucleares y el modelo óptico

Parte de las primeras evidencias relativas a los tamaños de los núcleos, aparte de las procedentes de la dispersión y la emisión de partículas alfa, se

* Las energías cinética y de amarre de un protón en un compuesto hidrogenado son completamente despreciables, en comparación con 4.5 Mev.

www.FreeLibros.me

obtuvieron gracias a las diferencias en las energías totales de amarre de los *núcleos espejo.* Se dice que dos núcleos forman un conjunto de núcleos espejo, si tienen valores comunes de A y si $Z = (A - Z) + 1$ para uno de ellos y $(A - Z) = Z + 1$ para el otro. He aquí varios ejemplos:

$$^{1}H^{3} \text{ y } ^{2}He^{3}, \quad ^{3}Li^{7} \text{ y } ^{4}Be^{7}, \quad ^{5}B^{11} \text{ y } ^{6}C^{11},$$
$$^{7}N^{15} \text{ y } ^{8}O^{15}, \quad ^{11}Na^{23} \text{ y } ^{12}Mg^{23}, \quad ^{17}Cl^{35} \text{ y } ^{18}A^{35}$$

En cada uno de estos conjuntos, uno de los núcleos es inestable y, eventualmente, decae mediante la emisión de un electrón o un positrón, formando el miembro estable del conjunto. Las diferencias en las energías totales de amarre de los dos núcleos de cada conjunto pueden obtenerse directamente, por medio de medidas de las energías de los electrones o los positrones que se emiten en el decaimiento y, asimismo, indirectamente, en algunos casos, a partir de medidas de las masas de los núcleos y la relación entre la masa y la energía. Ahora, resulta evidente que, además de las fuerzas de Coulomb de repulsión que actúan entre cada par de protones en un núcleo, debe haber fuerzas de atracción de algún otro tipo, que actúan entre todos los nucleones. A no ser por esas llamadas *fuerzas nucleares,* los neutrones no estarían ligados en los núcleos y, además, todos los núcleos para $Z \geqslant 2$ se romperían, debido a la repulsión de Coulomb.* Se supuso primeramente y se ha verificado, de manera subsiguiente, por medio de varios tipos de evidencias, que presentaremos más adelante, que las fuerzas nucleares que actúan entre pares de nucleones son independientes de si son protones o neutrones. Con esta suposición, las energías totales de amarre de dos núcleos espejo sólo serán diferentes por la energía adicional de repulsión de Coulomb ΔE_C del núcleo, con el protón extra. Si se supone también que toda la carga debida a los protones, incluyendo la del protón extra, se encuentra distribuida uniformemente sobre una esfera de radio R, la energía adicional de repulsión de Coulomb puede evaluarse a partir de la electrostática clásica. El resultado es

$$\Delta E_C = \frac{6}{5}\frac{Ze^2}{R} \tag{16–3}$$

en donde Z es el número atómico del núcleo sin el protón extra. Al utilizar esta ecuación para analizar las diferencias observadas en las energías totales de amarre de numerosos conjuntos de núcleos espejo, con A de 3 a 38, se descubrió que los valores de R determinados en esta forma podían representarse mediante la ecuación:

$$R = r_0 A^{1/3} \tag{16–4}$$

en donde r_0 es una constante. El análisis dio $r_0 \simeq 1.4 \times 10^{-13}$ cm. Sin embargo, otros trabajos recientes sobre este problema han demostrado que las

* Las fuerzas nucleares no tienen definitivamente naturaleza gravitacional. A partir de los datos presentados en la sección 1 sobre la carga y la masa de los núcleos, el lector puede demostrar con facilidad que las fuerzas gravitacionales son demasiado débiles para vencer a las fuerzas de Coulomb, en cerca de 35 órdenes de magnitud.

www.FreeLibros.me

correcciones de cuánticas a este cálculo clásico simple, reducen un poco a r_0. El valor aceptado en la actualidad es

$$r_0 \simeq 1.2 \times 10^{-13}\,\text{cm} \tag{16-4}$$

El cálculo cuántico utiliza una distribución más realista de la carga para el protón extra, y toma en consideración la integral de intercambio (vea 12–30). Ambos factores tienden a un valor ΔE_C, más bajo, requiriendo en esa forma una disminución de compensación en r_0.

Hay varios otros métodos para medir el tamaño de la distribución nuclear de carga y vamos a analizar el que resulta más directo y exacto. Se trata de la dispersión de electrones por núcleos a energías de varios cientos de Mev. Puesto que no actúan fuerzas nucleares entre nucleones y electrones, la dispersión de un electrón por un núcleo se debe a la interacción de Coulomb entre el electrón y la distribución de carga nuclear. Por consiguiente, las medidas de la dispersión de electrones pueden proporcionar informes relativos a la distribución de la carga nuclear. Podemos considerar que el método consiste en utilizar un "microscopio electrónico" de resolución extremadamente elevada, para "observar" la distribución de la carga. La resolución es extremadamente alta, debido a que la longitud de onda de De Broglie λ, de los electrones, es extremadamente corta. Si usamos la expresión $p = E/c$ para evaluar el impulso de los electrones, que son muy relativistas, debido a que su energía es muy grande en comparación a la energía de la masa en reposo $m_0c^2 = 0.51$ Mev, descubrimos que para electrones de 500 Mev, $\lambda = 2.4 \times 10^{-13}$ cm. Si tomamos $R \sim 10^{-12}$ cm como una estimación del tamaño de la distribución de carga, vemos que para esos electrones, $\lambda \sim R/4$ y $KR = (2\pi/\lambda)R \sim 20$. De acuerdo con las conclusiones obtenidas en el capítulo anterior, la sección diferencial para la dispersión de esos electrones por la distribución de carga nuclear, debe ser muy sensible a su tamaño e, incluso, a los detalles de su forma.

No vamos a tratar de describir las máquinas que se utilizan para acelerar electrones (u otras partículas) a las altas energías requeridas en estos experimentos, puesto que, en el espacio disponible no podemos ocuparnos como es debido de ese tema.* Sin embargo, resulta útil describir los demás aspectos de los experimentos de dispersión de electrones. Los aparatos utilizados en trabajos recientes por Hofstadter y sus colegas, se indican en la figura 16–5. El haz colimado de electrones pasa por una hoja metálica delgada, los átomos de la cual contienen los núcleos que se deben investigar,** y se detienen en una copa metálica aislada. La carga total recogida por la copa es una medida del flujo incidente. Los electrones dispersados en cierto intervalo angular θ entran en un imán y los desvía en un semicírculo en el plano perpendicular al papel. Al salir del imán entran a un detector de centelleo similar al antiguo detector de ZnS + ojo humano; pero se emplea un cristal más eficiente y una celda fotoeléctrica. El radio de curvatura de la trayectoria electrónica en el

* Pueden encontrarse descripciones en numerosos libros de texto elementales.

** Un electrón de varios centenares de Mev tiene una masa relativista tan alta que la dispersión producida por los electrones atómicos es completamente despreciable.

www.FreeLibros.me

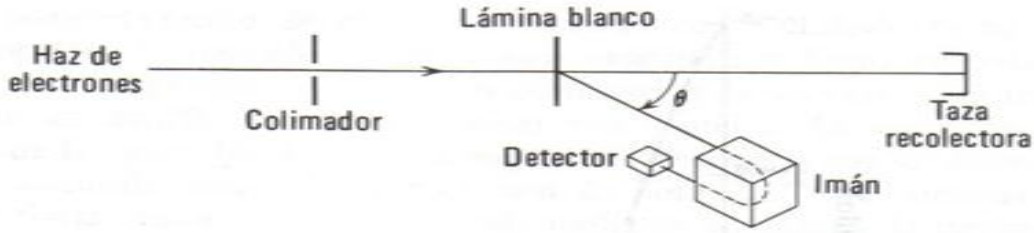

Figura 16-3. Aparato usado para medir la dispersión de electrones de alta energía por los núcleos.

campo magnético conocido es una medida del impulso o la energía de los electrones dispersados.

Se ha descubierto que el proceso más probable es la dispersión sin pérdida de energía en el marco del CM. La sección diferencial, medida para electrones de 420 Mev, incidentes sobre el núcleo típico de A pequeña, $^{6}C^{12}$, se muestra en la figura 16–4.* Los puntos con estimaciones de exactitud son las medidas experimentales de $d\sigma/d\Omega$. Se evalúan a partir del flujo incidente medido, el número medido de electrones dispersados por unidad de ángulo sólido para cada valor del ángulo, y el número de núcleos por cm² en la hoja metálica que sirve como blanco.

El hecho de que se haya observado que los procesos de absorción son improbables, verifica nuestra idea de que la dispersión debe ser explicable sobre la base de un potencial real de dispersión que representa la interacción de Coulomb entre los electrones y la distribución de carga nuclear. El hecho de que las energías electrónicas son elevadas sugiere la idea adicional de que la aproximación de Born debería ser útil en el análisis de estos experimentos. En realidad, se ha descubierto que para núcleos de A pequeña (y, por consiguiente, carga nuclear y potencial de dispersión pequeños), la aproximación de Born puede justificar razonablemente bien el valor $d\sigma/d\Omega$ medido, si se toma en consideración el hecho de que los electrones son muy relativistas. Esto se puede hacer utilizando funciones propias de partículas libres obtenidas de la ecuación de Dirac, en lugar de la de Schrödinger, para evaluar los elementos matrices que entran en la aproximación de Born. El resultado de esta aproximación relativista de Born es:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{2E}\right)^2 \frac{\cos^2(\theta/2)}{\operatorname{sen}^4(\theta/2)} \frac{|F(\chi)|^2}{Z^2} \tag{16–5}$$

en donde E es la energía electrónica. El factor de forma $F(\chi)$ es:

$$F(\chi) = \int_0^\infty \rho(r) \frac{\operatorname{sen} \chi r}{\chi r} 4\pi r^2 \, dr \tag{16–5'}$$

*Esto es en realidad $d\sigma/d\Omega$ en el marco LAB; pero para la dispersión de electrones, la diferencia entre el marco del LAB y el del CM es del todo despreciable.

www.FreeLibros.me

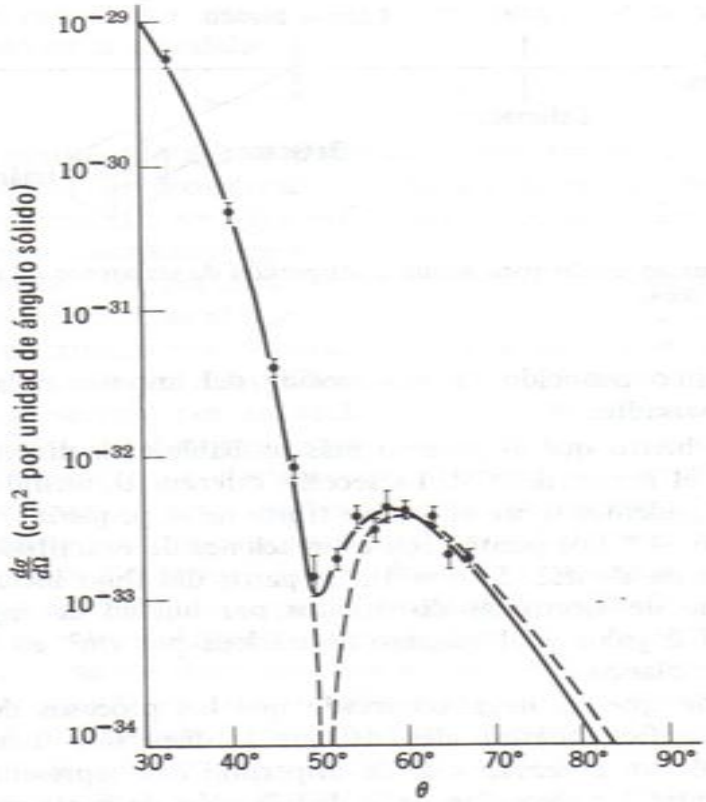

Figura 16-4. Sección diferencial para electrones de 420 Mev, incidente sobre carbono. De R. Hofstadter, *Annual Review of Nuclear Science*, Vol. 7, Annual Review, Stanford, 1957.

con

$$\chi = 2K \operatorname{sen}(\theta/2), \qquad K = \frac{p}{\hbar} \simeq \frac{E}{c\hbar}$$

en donde $\rho(r)$ es la densidad de carga nuclear en unidades de cargas de protones. Lo mismo que en el caso del factor de forma que se planteó en la exposición de la dispersión de rayos X (vea la ecuación 14–35), para ángulos pequeños $F(\chi) \simeq Z$. Asimismo, $\cos^2(\theta/2)$ es esencialmente la unidad para ángulos de dispersión pequeños. Tomando en consideración estos puntos y escribiendo $2E \simeq 2mc^2$ para los electrones muy relativistas, y comparar, a continuación, la ecuación (16–5) con la (15–94), vemos que para ángulos de dispersión pequeños, $d\sigma/d\Omega$ de la primera ecuación es igual a la sección diferencial de Coulomb para un núcleo puntual cargado. Para ángulos de dispersión grandes, $d\sigma/d\Omega$ se reduce por debajo de este valor, debido a que $|F(\chi)|^2 < Z^2$, y porque $\cos^2(\theta/2) < 1$. El primer término describe el efecto de la extensión finita de la carga nuclear; el segundo describe un efecto relativista que puede atribuirse al spin electrónico.

www.FreeLibros.me

El comportamiento de $d\sigma/d\Omega$, de acuerdo con el cálculo hecho en la ecuación (16–5), depende en forma muy sensible de la forma supuesta de la densidad de carga nuclear $\rho(r)$. Así, la comparación de los valores calculados y medidos de $d\sigma/d\Omega$, permite determinar esta cantidad. La curva de trazos cortos de la figura 16–4, ilustra la mejor correspondencia que se obtiene para $d\sigma/d\Omega$ calculada usando la aproximación de Born. La curva continua de la misma figura indica la $d\sigma/d\Omega$ calculada mediante un análisis de corrimientos de fase, utilizando el mismo valor de $\rho(r)$ que se usó en el cálculo de la aproximación de Born. Por supuesto, el análisis de corrimientos de fase se basa en la ecuación de Dirac y no en la de Schrödinger.
En la figura 16–5 se da la representación gráfica de $\rho(r)$ que se usó en estos cálculos. Puesto que se ha encontrado prácticamente el mismo $\rho(r)$ en el análisis de la $d\sigma/d\Omega$ medida en la dispersión de electrones de varias energías distintas, por el núcleo de C, y puesto que los análisis son lo suficientemente sensibles para distinguir variaciones en $\rho(0)$ de, tal vez, el 10 por ciento, se tiene la suficiente confianza de que $\rho(r)$ debe ser muy semejante a la densidad real de la carga del núcleo.

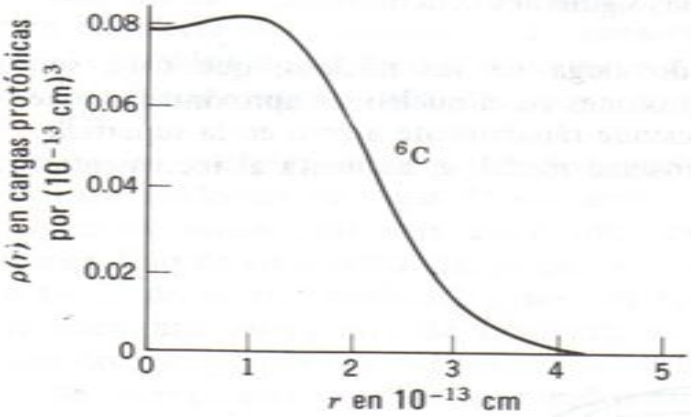

Figura 16-5. Densidad de carga nuclear del carbono. Tomado de R. Hofstadter, *Annual Review of Nuclear Science*, Vol. 7, Annual Reviews, Stanford, 1957.

Para una energía electrónica dada, se ha encontrado que las secciones diferenciales medidas para núcleos de A mayor, son similares a las medidas para el C, salvo que al aumentar A, disminuye el ángulo en el que se encuentra el primer mínimo y una aparición de máximos secundarios a ángulos mayores. La experiencia obtenida en el capítulo anterior nos indica que esto significa que el tamaño de la distribución de carga aumenta al incrementarse A. Esto se puede ver en la figura 16–6, en donde se muestra la gráfica de las densidades de carga obtenidas en un análisis de ondas parciales de la sección diferencial medida para electrones de varias energías y para diversos núcleos diferentes. Las formas de $\rho(r)$ dadas en la figura no son únicas. Por ejemplo, se sabe que la densidad de carga en la región central para el Ca y núcleos más pesados, tiene una variación de entre el 10 y el 20 por

www.FreeLibros.me

ciento de una constante. Sin embargo, se ha supuesto que la densidad central es constante y que la forma de $\rho(r)$ se puede describir mediante la ecuación empírica

$$\rho(r) = \frac{\rho(0)}{1 + e^{(r-a)/b}} \tag{16-6}$$

De acuerdo con esa suposición, el análisis de las medidas de dispersión revelan que los parámetros a y b se determinan precisamente:

$$a = 1.07A^{1/3} \times 10^{-13}\ \text{cm}$$
$$b = 0.55 \times 10^{-13}\ \text{cm} \tag{16-7}$$

Este análisis no permite determinar con mucha exactitud el parámetro $\rho(0)$; pero puede hacerse en forma aproximada, requiriendo que la integral de la densidad de carga sobre el volumen nuclear sea igual a Z. La figura 16–6 se compone de las representaciones gráficas de la ecuación (16–6), empleando los valores de los parámetros así determinados.

Podemos llegar a las siguientes conclusiones:

1. La densidad de carga de los núcleos, que debe ser básicamente la distribución de los protones en el núcleo, es aproximadamente constante en la región interior y desciende rápidamente a cero en la superficie.
2. El radio de densidad media, a, aumenta al incrementarse A, de acuerdo con una ley $A^{1/3}$.

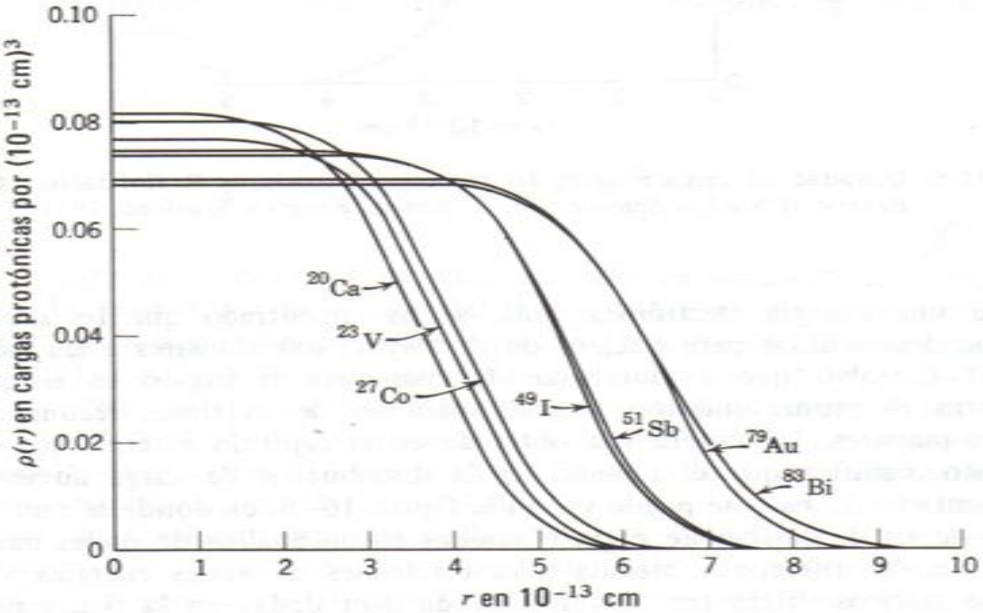

Figura 16-6. Densidad de carga nuclear de varios núcleos. Tomado de R. Hofstadter, *Annual Review of Nuclear Science*, Vol. 7, Annual Reviews, Stanford, 1957.

www.FreeLibros.me

3. La distancia de caída, b, es aproximadamente la misma para todos los núcleos.

4. La densidad de carga interior $\rho(0)$ disminuye lentamente, al aumentar A.

5. Si suponemos que la distribución de protones en el núcleo es, aproximadamente, la misma que la distribución de neutrones (y existen bastantes pruebas para comprobar esta suposición), la densidad de carga $\rho(r)$ de un núcleo se relaciona con su densidad de masa $p_M(r)$ mediante la ecuación:

$$\rho(r) \propto \frac{Z}{A}\, \rho_M(r) \tag{16–8}$$

Si es así, la reducción lenta de $\rho(0)$ al aumentar A, coincide perfectamente con la reducción que se tiene en Z/A al aumentar $A(Z/A \simeq 1/2$ para $A \simeq 40$; $Z/A \simeq 1/2.5$ para $A \simeq 240)$, y con la suposición de que la densidad interna de masa $\rho_M(0)$ es más o menos la misma para todos los núcleos.

6. Aunque el coeficiente de $A^{1/3}$ en la expresión para a es 1.07 y no 1.2, las ecuaciones (16–2) y (16–7) concuerdan, en realidad, con las (16–4) y (16–4′), ya que dentro de la precisión de los análisis, ambas llevan al mismo valor cuadrático medio del radio, que ya se ha demostrado que es el criterio más apropiado para establecer una comparación. En consecuencia, esto refuerza la suposición de la igualdad de las fuerzas entre varios nucleones, que es la base del análisis de núcleos espejos que da como resultado las ecuaciones (16–4) y (16–4′).

Volvamos ahora a las medidas de los tamaños nucleares, logradas en experimentos que usan nucleones en lugar de electrones, como proyectiles. Inmediatamente aparecen varios contrastes entre estos experimentos y los hechos con electrones. Uno de estos contrastes es que un nucleón interacciona con un núcleo a través de fuerzas nucleares y no con fuerzas de Coulomb (aunque existe también una interacción de Coulomb, si el nucleón es un protón). Puesto que las interacciones de nucleones con núcleos representan un conjunto diferente de fuerzas, estas interacciones miden un grupo distinto de atributos de los núcleos y no debe sorprendernos si las medidas dan tamaños nucleares diferentes a los determinados en los experimentos con electrones. Otro punto de contraste es que la interacción entre un nucleón y un núcleo debe describirse mediante un potencial *complejo* de interacción. Un potencial real no es adecuado, porque existe una absorción apreciable (vea la sección 7 del capítulo 15), ya que los experimentos demuestran que, cuando un nucleón incide sobre un núcleo, la probabilidad de absorción, incluyendo la dispersión con pérdida de energía, es casi siempre comparable a la probabilidad de dispersión, sin ninguna pérdida de energía.

En efecto, la interpretación de los primeros experimentos de este tipo, se basó en la suposición de que, en su interacción con un nucleón, un núcleo se comporta como una esfera de radio R que es completamente absorbente. Los experimentos eran medidas de las secciones totales, σ_T de núcleos para neutrones de energías cercanas a 20 Mev. Para un neutrón de esta energía, la longitud de onda de De Broglie es $\lambda \simeq 6 \times 10^{-13}$ cm. Usando $R \simeq 5 \times 10^{-13}$ cm como cálculo razonable del radio de un núcleo de A intermedia, encontramos que $KR = (2\pi/\lambda)R \simeq 5$. Entonces, tenemos el caso de

www.FreeLibros.me

una esfera que se supone completamente absorbente, con KR grande. En consecuencia, debe ser posible la aplicación de la ecuación (15–104), que es:

$$\sigma_T = 2\pi R^2 \tag{16–9}$$

La sección total σ_T se mide prácticamente con la misma técnica de atenuación que se usó para los rayos X (vea la sección 5 del capítulo 14), con un detector de neutrones que consiste en una mezcla de algún compuesto hidrogenado y otro que produzca centelleos. Cuando los neutrones entran en el detector, chocan con protones del compuesto hidrogenado, transfieren energía a estos últimos y estas partículas cargadas producen posteriormente un centelleo. Se han hecho varias medidas distintas; en la figura 16–7 se indican algunos datos correspondientes a neutrones de 26 Mev. La curva continua es la ecuación (16–9), usando $R = 1.55A^{1/3} \times 10^{-13}$ cm. Sin embargo, en la actualidad ya no se acepta este dato como una estimación segura del tamaño nuclear. Se han hecho medidas más precisas de las interacciones entre nucleones y núcleos, que han indicado que el análisis basado en una esfera de contornos bien definidos, totalmente absorbente con $KR \to \infty$ es demasiado vago para que dé resultados precisos.

Estas medidas más sensibles se relacionan con las secciones diferenciales para nucleones. En los años más recientes, se han efectuado medidas mucho más exactas, tanto de neutrones como de protones y para una gran variedad de energías y núcleos. Las disposiciones experimentales empleadas son, básicamente, las mismas que se usan en los experimentos de dispersión con electrones. En el caso de los protones, el detector sensible a la energía puede ser un imán en combinación con un contador de centelleo, o bien, sólo un contador de centelleo que use un cristal como el de NaI, cuya respuesta es una función lineal de la energía del protón. En la figura 16–8 se muestran algunos datos de protones de 17 Mev, con los puntos marcados. De acuerdo con las normas establecidas, esta figura representa la razón, en el marco CM, de la sección diferencial observada (dispersión sin pérdida de energía en el marco CM) a la sección diferencial de Coulomb para un núcleo de carga puntual (ecua-

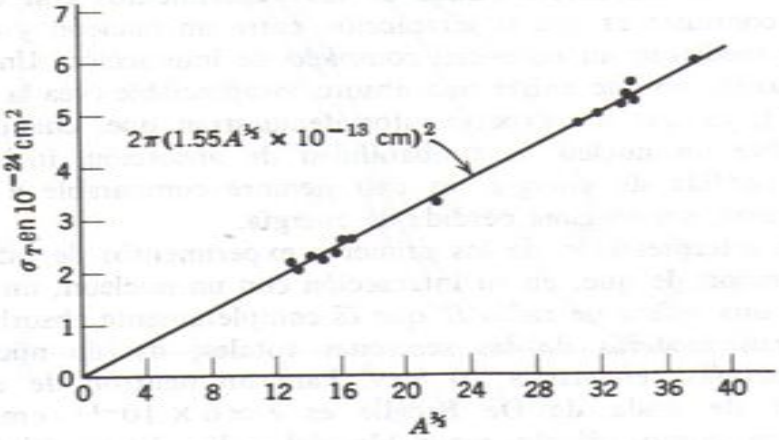

Figura 16-7. Secciones totales de varios núcleos para neutrones de 26 Mev.

www.FreeLibros.me

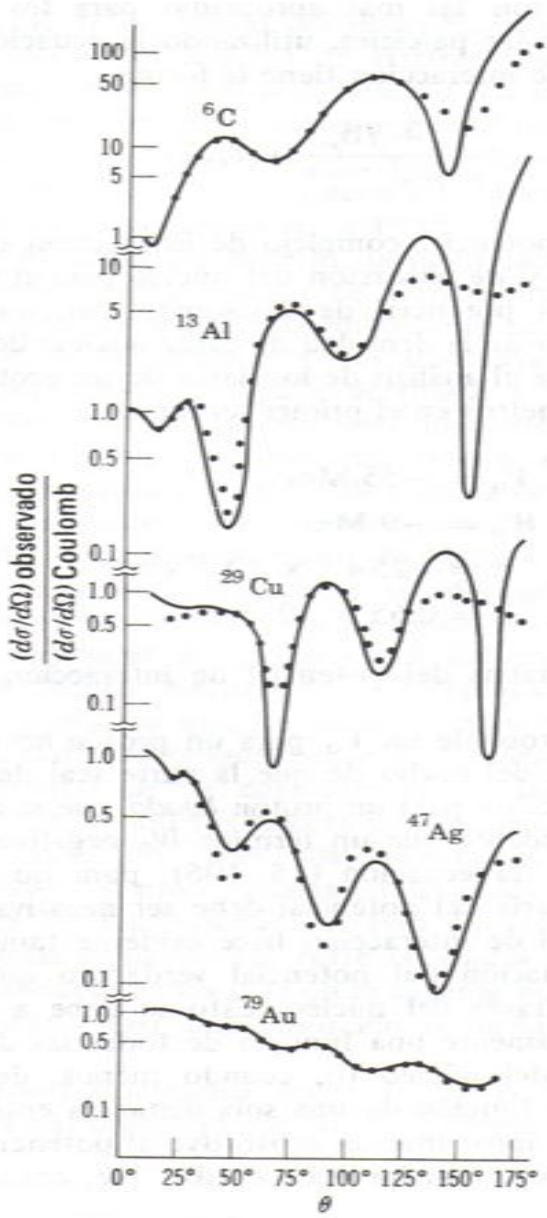

Figura 16-8. Secciones diferencial para protones de 17 Mev. Los puntos son experimentales y las curvas son ajustes teóricos. Tomado de A. E. Glassgold, *Revs. Mod. Phys.*, 30, 419 (1958).

ción 15–94). Debe hacerse notar, entonces que la $d\sigma/d\Omega$ observada disminuye rápidamente al aumentar θ, debido a la dependencia de $\text{sen}^{-4}\ \theta/2$ de la $d\sigma/d\Omega$ de Coulomb.

www.FreeLibros.me

Las curvas continuas son las más apropiadas para los datos obtenidos mediante un análisis de ondas parciales, utilizando la ecuación (15–102). En este análisis, el potencial de interacción tiene la forma

$$\frac{V_0 + iW_0}{1 + e^{(r-a)/b}} + V_C(r) \tag{16–10}$$

El primer término es un potencial complejo de interacción que representa las propiedades de refracción y de absorción del núcleo para el protón incidente. El segundo término es el potencial de Coulomb, real, que actúa sobre el protón y se evalúa a partir de la densidad de carga nuclear determinada por la dispersión electrónica. Para el análisis de los datos de un protón de 17 Mev, se usaron los siguientes parámetros en el primer término:

$$\begin{aligned} V_0 &= -55 \text{ Mev} \\ W_0 &= -9 \text{ Mev} \\ a &= 1.25A^{1/3} \times 10^{-13} \text{ cm} \\ b &= 0.65 \times 10^{-13} \text{ cm} \end{aligned} \tag{16–10'}$$

Las partes reales e imaginarias del potencial de interacción se indican en la figura 16–9.

Podemos ver que es razonable un V_0 para un protón *no ligado* que pasa a través del núcleo, en vista del hecho de que la parte real del potencial debe, por definición, ser de atracción para un protón *ligado* que se mueva dentro del núcleo. Es incluso más evidente que un término W_0 negativo es razonable, ya que, como se indicó en la ecuación (15–106), para que se produzca la absorción, la parte imaginaria del potencial debe ser negativa. No obstante, la misma forma del potencial de interacción hace evidente también el hecho de que es sólo una aproximación del potencial verdadero que actúa sobre el protón que se mueve a través del núcleo. Esto se debe a que el potencial verdadero debe ser forzosamente una función de todas las distancias entre el protón y los nucleones del núcleo (o, cuando menos, de varias de estas distancias), y no sólo una función de una sola distancia entre el protón y el centro del núcleo. Así, la aproximación substituye al potencial verdadero, que es muy complicado, con uno mucho más sencillo que, como podemos supo-

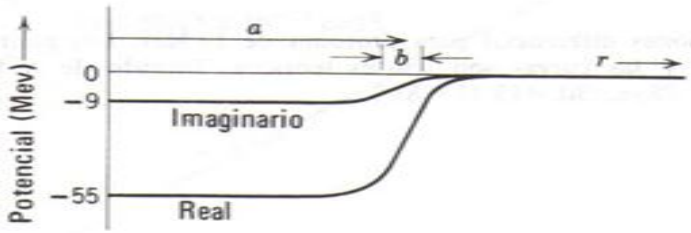

Figura 16-9. Partes reales e imaginarias del potencial del modelo óptico para la dispersión de protones de 17 Mev.

www.FreeLibros.me

ner, representa el efecto *promedio* del potencial real, un procedimiento muy similar al que se usó en el proceso de Hartree para el átomo. Esta aproximación se denomina *modelo óptico del núcleo.* La primera vez que se usó fue alrededor de 1930, con un potencial puramente real; pero esto no fue muy adecuado y el modelo óptico cayó en el olvido. No obstante, con un potencial complejo se logró un éxito notable, gracias a los trabajos de Feshbach, Porter, Weisskopf y Saxon, en años posteriores a 1952.

Como sucede con cualquier modelo, la justificación del modelo óptico es que proporciona una imagen sencilla de ciertos procesos y permite que un gran número de experimentos que los involucran se expliquen en términos de una pequeña cantidad de parámetros ajustables. Por ejemplo, el conjunto de parámetros que proporciona un ajuste aceptable a las secciones diferenciales del protón de 17 Mev, también proporciona un ajuste aceptable a las secciones de neutrones de una energía similar. En efecto, se ha encontrado que el conjunto de los parámetros a y b citados en la ecuación (16–10′), dan un ajuste aceptable a las secciones de dispersión y totales tanto para protones como para neutrones, para un gran rango de núcleos y energías. A una energía dada, el grupo de parámetros V_0 y W_0 es adecuado para explicar tanto las secciones de ambas partículas como las de todos los núcleos. Sin embargo, V_0 y W_0 demuestran depender de la energía E del protón o neutrón, como se indica en la figura 16–10. Existen todavía algunas ambigüedades respecto a los valores de V_0 y W_0 ya que, en algunos casos, valores distintos de estos parámetros pueden dar ajustes igualmente aceptables a los datos. Con todo, el comportamiento general de la dependencia de sus energías ha sido bien establecido, como lo han sido sus valores para valores bajos de E. Por ejemplo, se sabe que cuando E es 2 ó 3 Mev, $-W_0$ sólo puede ser 1 ó 2 Mev, porque se observan resonancias muy pronunciadas en las secciones de dispersión y total, a estos valores de E. Las resonancias (vea la sección 6 del capítulo 15) implican interferencias constructivas entre las ondas entrantes y salientes. Por lo tanto, pueden producirse sólo si la onda saliente no es absorbida y, como lo indica la ecuación (15–106), una absorción pequeña significa un valor pequeño de $-W_0$.

Existe una relación interesante entre W_0 y la rapidez de absorción de partículas del potencial complejo óptico, cuya forma es diferente a la indicada

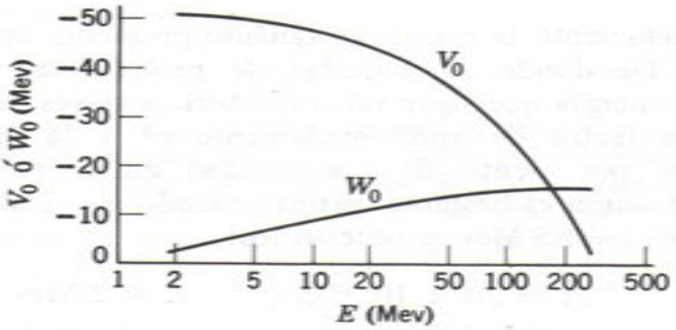

Figura 16-10. Dependencias aproximadas de las profundidades de las partes reales e imaginarias del potencial del modelo óptico.

www.FreeLibros.me

por la expresión (15–106). Considere partícula de masa M, que se desplaza con una energía total E a lo largo del eje x, a través de un medio de potencial óptico constante $-(V_0 + iW_0)$. El lector puede verificar por medio de substituciones, que una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para esta situación es:

$$\psi(x) = e^{iKx}e^{-x/2\Lambda} \tag{16–11}$$

en donde

$$\left(\frac{1}{\Lambda}\right)^2 = \frac{4M}{\hbar^2}(E + |V_0|)\left[\sqrt{\left(\frac{|W_0|}{E + |V_0|}\right)^2 + 1} - 1\right] \tag{16–11''}$$

y

$$K^2 = \frac{M}{\hbar^2}(E + |V_0|)\left[\sqrt{\left(\frac{|W_0|}{E + |V_0|}\right)^2 + 1} + 1\right] \tag{16–11'''}$$

Observe que en el límite en que $|W_0|/(E + |V_0|)$ es despreciable en comparación con 1, la ecuación (16–11″) se reduce a la expresión usual para K. Cuando esta cantidad es sólo pequeña en comparación a 1, la ecuación (16–11′) se reduce a

$$\Lambda \simeq \frac{\hbar}{2|W_0|}\left[\frac{2(E + |V_0|)}{M}\right]^{1/2} \tag{16–12}$$

Para identificar Λ, calcule la densidad de probabilidad:

$$\psi^*(x)\,\psi(x) = e^{-iKx}e^{-x/2\Lambda}e^{iKx}e^{-x/2\Lambda} = e^{-x/\Lambda}$$

Podemos ver que la densidad de probabilidad decrece exponencialmente con una longitud de atenuación igual a Λ. Ahora, evaluaremos Λ para $E = 20$ Mev, usando los valores de V_0 y W_0 de la figura 16–10. Tenemos que: $E = 20$ Mev, $|V_0| = 45$ Mev, $|W_0| = 10$ Mev, $M =$ la masa de un protón. Para estos valores, la ecuación (16–12) da

$$\Lambda = 3.3 \times 10^{-13}\ \text{cm}, \qquad E = 20\ \text{Mev} \tag{16–13}$$

Esto es aproximadamente la mitad del tamaño promedio de un núcleo con un radio promedio. De donde, la densidad de probabilidad asociada con una partícula de esta energía que sigue tal trayectoria a través de un núcleo, queda atenuada con un factor de aproximadamente e^2 y la partícula tiene sólo alrededor del 10 por ciento de oportunidad en el rango de 20 Mev (y mayores).* La situación es bastante distinta cuando $E = 2$ Mev. A esta energía, $|V_0| = 50$ Mev, $|W_0| = 1.5$ Mev, y obtenemos:

$$\Lambda = 20 \times 10^{-13}\ \text{cm}, \qquad E = 2\ \text{Mev} \tag{16–14}$$

* Esto es parte de la explicación para los grandes valores de R encontrados al analizar las secciones totales del neutrón de 20 Mev con la ecuación (16–9); la opacidad es sufi-

www.FreeLibros.me

Esto es, aproximadamente, tres veces el tamaño promedio de un núcleo de radio promedio. La densidad de probabilidad para una partícula de esta energía, que sigue tal trayectoria, queda atenuada sólo en un factor de, aproximadamente, $e^{1/3}$ y la partícula tiene cerca de un 75 por ciento de posibilidades de no ser absorbida. Los núcleos son relativamente transparentes para nucleones cuyas energías son del orden de 2 Mev (y menores).

Comparemos los resultados de los experimentos que miden la distribución de carga o masa, con los resultados de los experimentos que determinan la distribución de los potenciales de interacción reales o imaginarios. Esto se hace en la figura 16–11 en el caso de un núcleo típico. En la figura se muestran la distribución de masa y el valor absoluto del potencial real de interacción. Es de gran interés observar que la distribución espacial del potencial de interacción nuclear ejercido por un núcleo sobre un nucleón que pasa cerca de él, se extiende más allá de la distribución espacial de los nucleones en el núcleo, por una distancia δ que, para un núcleo típico es sólo, aproximadamente, 1×10^{-13} cm.* Eso significa que *las fuerzas nucleares deben tener un alcance extremadamente corto.* Así, las fuerzas nucleares son, ciertamente, muy distintas de las fuerzas gravitacionales y eléctricas de largo alcance que se presentan en los experimentos más comunes. Un electrón que pasa a 2 ó 3×10^{-8} cm de la superficie de núcleo, siente una fuerza de Coulomb apre-

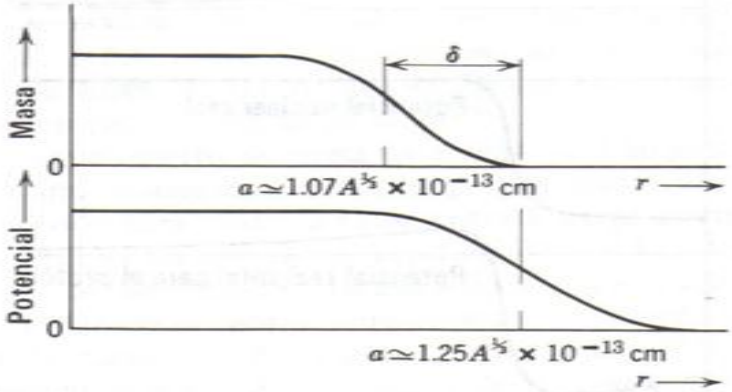

Figura 16-11. Comparación entre la distribución de masa nuclear y el potencial de interacción nuclear.

---

cientemente alta para que haya una alta probabilidad de absorción, incluso cuando el neutrón pasa por la superficie nuclear externa. El resto de la explicación es que la expresión (16–9) presupone que la longitud de onda de De Broglie es despreciablemente pequeña. En realidad, no lo es y, puesto que el neutrón puede verse absorbido si pasa dentro de una longitud de onda de De Broglie del núcleo, esto también hace aumentar la probabilidad de absorción y, por lo tanto, el valor de R calculado a partir de la ecuación (16–9).

* La cifra implica $\delta \propto A^{1/3}$, pero, más probablemente $\delta \simeq 1 \times 10^{-13}$ cm $\propto A^0$. Esto no es inconsistente, puesto que no se conocen con seguridad los valores de a para la masa y (particularmente) para las distribuciones de potencial, de modo que δ es la diferencia relativamente pequeña entre dos grandes valores inciertos.

www.FreeLibros.me

ciable; un neutrón que pasa a 2 ó 3×10^{-12} cm de la superficie del mismo núcleo, no siente prácticamente ningún efecto.

Por supuesto, un protón que pase a 2 ó 3×10^{-12} cm de la superficie del núcleo, siente una fuerza de Coulomb, que es potente; pero no tanto como la fuerza nuclear que sentiría el protón si pasara un poco más cerca. Podría hacerse una comparación instructiva de las intensidades relativas de las fuerzas nucleares y las de Coulomb, mediante un diagrama del potencial nuclear real y el potencial de Coulomb que actúa sobre el protón, para la energía de un núcleo típico y un protón típico. Esto se hace en la figura 16–12. Debido a la extensión finita de la distribución de carga nuclear, el potencial de Coulomb no continúa su comportamiento de Ze^2/r para r menor que el radio nuclear. Para protones de 20 Mev, incidentes sobre núcleos ^{92}U, el valor positivo máximo del potencial total es de, aproximadamente 15 Mev, y el valor negativo mínimo es de cerca de −45 Mev. Incluso para este ejemplo extremo de un núcleo de Z grande, vemos que cuando r es menor que el radio nuclear, *la magnitud del potencial nuclear real es algo mayor que la del potencial de Coulomb.*

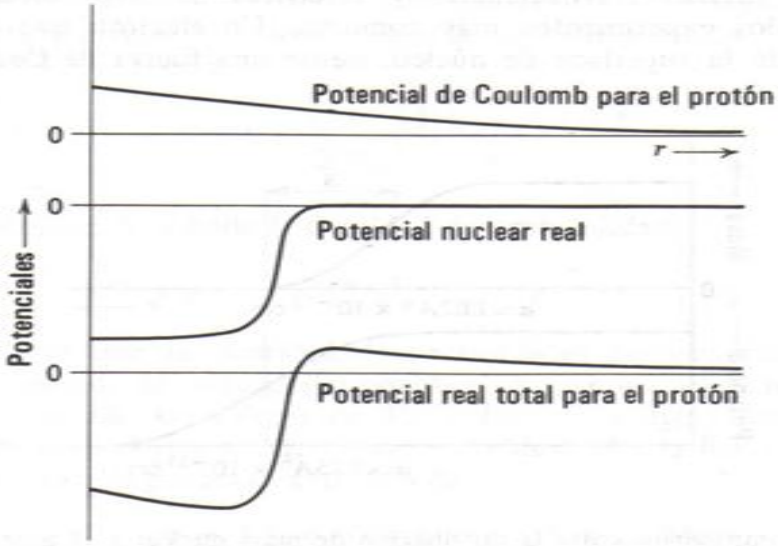

Figura 16-12. Ilustración de la composición del potencial real total que actúa entre un núcleo típico y un protón.

4. Masas nucleares y abundancias

Las determinaciones detalladas de las distribuciones de densidad nuclear, obtenidas a partir de experimentos recientes de dispersión electrónica, muestran que la densidad en el interior de un núcleo es aproximadamente la misma para todos los núcleos. Sin embargo, esto se sabe desde hace mucho tiempo, puesto que todos los análisis de tamaños nucleares, basados en la suposición

www.FreeLibros.me

de que el núcleo es una esfera bien definida de radio R y densidad uniforme, condujo al resultado $R \propto A^{1/3}$ para el cual la densidad $\rho =$ masa/volumen $\propto A/(A^{1/3})^3$ es independiente de A. En esta sección estudiaremos, primeramente, las medidas de las masas nucleares. Entre otras cosas, estas medidas demuestran que en un rango muy amplio, la energía de amarre por nucleón es aproximadamente la misma para todos los núcleos. Esto se sabía también hace ya mucho tiempo y, junto con la igualdad aproximada de la densidad nuclear, llevó a la suposición de que todos los núcleos contienen esencialmente el mismo material en el mismo estado y difieren unos de otros en la cantidad, de dicho material que contienen. Esta suposición constituye la base del modelo de gota de líquido del núcleo de caída, que es muy eficiente y que veremos en la siguiente sección.

Sabemos que la masa de un núcleo es casi igual a la del átomo correspondiente. Las masas de átomos de un valor Z particular, pero posiblemente una mezcla de valores de A, pueden obtenerse con una exactitud de varias cifras significativas, por medio de técnicas químicas y el conocimiento del número de Avogadro. No obstante, para lograr determinaciones más exactas, que se necesitan para el estudio de los núcleos, es necesario utilizar las técnicas físicas de *espectrometría de masas o balance de energía en las reacciones nucleares.* Ambas técnicas proporcionan informes sobre las masas de los átomos de valores particulares de Z y A. A partir de estas masas, pueden evaluarse las de los núcleos correspondientes, restando Z veces la masa de los electrones. Al hacer esto, el equivalente de masa de las energías de amarre de los electrones se pasa por alto. Sin embargo, incluso en casos extremos, el error que se introduce en esa forma es menor que el 20 por ciento de las incertidumbres experimentales en las medidas de las masas.*

El primer espectrómetro de masa lo construyó Thomson en 1911, y en él se utiliza la misma configuración de campos eléctricos y magnéticos cruzados como en el método para medir la razón entre la carga electrónica a la masa de los electrones (vea la sección 2 del capítulo 3). Un haz de átomos, ionizados por medio de un bombardeo electrónico, se hace pasar a través de esos campos que lo analizan por componentes de acuerdo con las diferentes razones entre la carga y la masa presentes en el haz. Por lo común, ha sido posible determinar el grado de ionización de un componente y, en esa forma, determinar su masa dentro de la exactitud, bastante baja, del aparato. Con este aparato, Thomson descubrió la existencia de isótopos. Utilizando una fuente que contenía una mezcla de gases nobles, descubrió un componente con una masa correspondiente a $A = 20$ y otro componente asociado, más débil, con $A = 22$. Numerosas pruebas demuestran que ambos se deben a un gas noble, que sólo podía ser Ne, que tiene un peso atómico químico de 20.18. Thomson interpretó sus resultados en el sentido de que hay dos especies químicamente indistinguibles de átomos de Ne, llamados *isótopos*, uno con $A = 20$ y una abundancia relativa de cerca del 91 por ciento, y otro con $A = 22$ y abundancia relativa de, aproximadamente, 9 por ciento. No pueden distinguirse químicamente, debido a que tienen la misma estructura de

* Para $^{92}U^{238}$ la energía total de amarre del electrón es 2×10^5 ev $\simeq 0.0002$ unidades de masa. La masa del átomo se dice que es de 238.1234 ± 0.0010 unidades de masa.

www.FreeLibros.me

electrones atómicos, puesto que sus núcleos tienen los mismos valores de Z; pero son distinguibles físicamente, debido a que tienen diferentes masas, puesto que sus núcleos tienen valores diferentes de A. Los núcleos de los isótopos del Ne son: $^{10}Ne^{20}$, $^{10}Ne^{21}$, $^{10}Ne^{22}$; el segundo se presenta con una abundancia relativa de, aproximadamente, 0.3 por ciento y no pudo ser detectado con el aparato de Thomson.

Un ejemplo típico de un espectrómetro de masa más reciente es el del tipo diseñado por Bainbridge (1933) y que se ilustra en la figura 16–13. La fuente produce átomos ionizados con una carga $+Ze$, una masa M y un espectro de velocidades. Estos átomos pasan por una región de campos eléctricos y magnéticos cruzados, que actúan como filtro de velocidades, por el que pasan sólo los que tienen la velocidad v para la que

$$ZeE = HZev/c$$

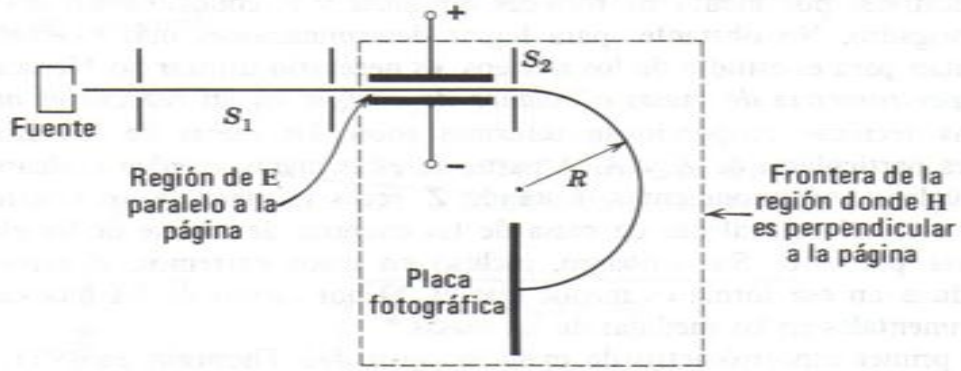

Figura 16-13. Aparato utilizado para medir masas atómicas.

Los términos a la izquierda y a la derecha son las fuerzas eléctricas y magnéticas, respectivamente. A continuación, los átomos de velocidad $v = Ec/H$ entran en una región de campo magnético uniforme, siguen una trayectoria en semicírculo de radio R e inciden sobre una placa fotográfica en la que producen una imagen. La distancia de S_2 a la imagen es $2R$, en donde R satisface la ecuación

$$HZev/c = Mv^2/R$$

El término a la derecha es la masa veces la aceleración centrífuga. Despejando M, tenemos

$$M = R\frac{Ze}{c}\frac{H}{v} = \frac{RZeH^2}{Ec^2}$$

La masa puede determinarse a partir de medidas absolutas de las cantidades del segundo miembro de la última ecuación. Además, se utilizan mucho moléculas de hidrocarburos para calibrar el aparato sobre una amplia distri-

www.FreeLibros.me

bución de masas, en términos de masas cuidadosamente normalizadas de $^{1}H^{1}$ y de $^{6}C^{12}$. Con estas técnicas pueden llevarse a cabo medidas extremadamente exactas. Como ejemplo, para la masa de $^{18}A^{40}$ se obtiene

$$M_{^{18}A^{40}} = 39.975022 \pm 0.000029 \text{ uam}$$

Un uam es una *unidad atómica de masa*, que se define de tal modo que:

$$M_{^{8}O^{16}} \equiv 16.000000 \text{ uam} \tag{16–15}$$

(Observe que esto difiere ligeramente de la escala de masa química que utiliza la mezcla que se produce normalmente de isótopos del ^{8}O como estándar.)

Los espectrómetros de masa que utilizan detectores que son más lineales que las placas fotográficas, pueden proporcionar determinaciones exactas de las abundancias relativas de diversos isótopos. Como ejemplo, se sabe que las abundancias de la mezcla normal de isótopos del ^{8}O es:

$$^{8}O^{16} = 99.759\,\%$$
$$^{8}O^{17} = 0.037\,\%$$
$$^{8}O^{18} = 0.204\,\%$$

Otra técnica de determinación de masas que provee una ayuda exacta y verifica la técnica de la espectrometría de masas, es estudiar el balance de energías en las reacciones nucleares. Consideremos una reacción nuclear tal como (16–1),

$$^{2}He^{4} + {}^{7}N^{14} \rightarrow {}^{8}O^{17} + {}^{1}H^{1}$$

que fue la primera observada por Rutherford. El caso general puede escribirse como

$$a + A \rightarrow B + b \tag{16–16}$$

en donde a es la partícula proyectil, A es el núcleo blanco, B es el núcleo residual y b es la partícula producto. Como mencionamos en la sección 9, capítulo 1, se ha descubierto que en estas reacciones, la masa y la energía cinética no se conservan por separado, sino que, en lugar de ello, en cualquier marco de referencia, existe conservación de la energía relativista total, $E = T + mc^2$, en donde T es la energía cinética y m es la masa en reposo. Para la reacción (16–16), la conservación de la energía relativista total en el marco LAB de referencia es:

$$(T_a + m_a c^2) + m_A c^2 = (T_B + m_B c^2) + (T_b + m_b c^2) \tag{16–17}$$

en donde T_a y m_a son la energía cinética y la masa en reposo de a, etc., y donde $T_A = 0$, puesto que A está estacionario en el marco del LAB. Puesto que puede haber un intercambio de energía entre la energía cinética y la de la masa en reposo, en esas reacciones, es posible que la energía cinética final $T_B + T_b$ sea mayor o menor que la energía cinética inicial T_a. La diferencia $T_B + T_b - T_a$ se llama la *Q de la reacción*. Esto es,

$$Q = T_B + T_b - T_a \tag{16–18}$$

www.FreeLibros.me

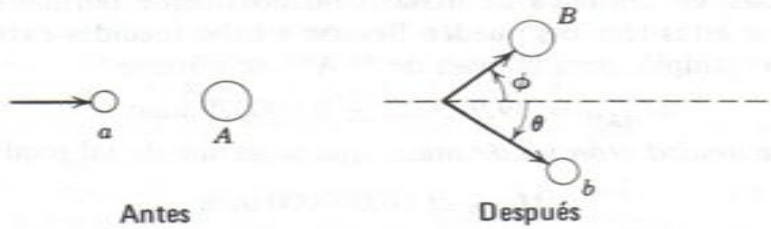

Figura 16-14. Ilustración de la cinemática de una reacción nuclear.

A partir de la expresión (16–17), esto puede escribirse también como:

$$Q = (m_a + m_A - m_B - m_b)c^2 \qquad (16\text{–}19)$$

Podemos ver que una medida del valor Q de una reacción proporciona informes respecto a las masas en reposo de las entidades involucradas en esa reacción. La Q puede medirse, determinando T_a, T_b y T_B. Sin embargo, para T_B esto resulta con frecuencia difícil y, afortunadamente es posible evitarlo, utilizando una relación procedente de la conservación del impulso. Consideremos la figura 16–14, que representa la cinemática de la reacción, tal y como puede verse en el marco LAB. Aplicando la conservación del impulso lineal, se obtiene una ecuación que hace posible eliminar T_B de la expresión (16–17). Esto resulta muy sencillo en el límite

$$T_a/m_ac^2 \ll 1, \qquad T_b/m_bc^2 \ll 1, \qquad T_B/m_Bc^2 \ll 1$$

en donde las expresiones clásicas tales como $T_a = \frac{1}{2}m_av_a^2$ y $p_a = m_av_a$ pueden utilizarse. Por consiguiente, vamos a dejar esto como ejercicio para el lector, para demostrar que en este límite clásico

$$Q = T_b\left(1 + \frac{m_b}{m_B}\right) - T_a\left(1 - \frac{m_a}{m_B}\right) - \frac{2}{m_B}(T_aT_bm_am_b)^{1/2}\cos\theta \qquad (16\text{–}20)$$

Esto tiene una exactitud suficiente para el análisis de reacciones nucleares para las energías que se han utilizado en la mayoría de los experimentos. La ecuación (16–20) muestra que la Q se puede determinar mediante una medida de T_a y T_b. (Incluso si la reacción se estudia con el fin de obtener m_B en términos de las otras masas, en la práctica, esta cantidad ya se conocería con exactitud suficiente para utilizarla en la expresión (16–20), sobre todo, puesto que $m_b/m_B \ll 1$ y $m_a/m_B \ll 1$ en casos típicos.) Para medir T_a y T_b se utilizan las técnicas empleadas en los experimentos de dispersión.

En la ecuación (16–19), las masas se refieren a las masas en reposo de los núcleos A y B y a las de las partículas nucleares completamente ionizadas, a y b. Sin embargo, con la exactitud de la aproximación en la que el equivalente de masa de la energía de amarre de electrones se pasa por alto, esta ecuación se puede escribir también como:

$$Q = (M_a + M_A - M_B - M_b)c^2 \qquad (16\text{–}21)$$

www.FreeLibros.me

en donde la M mayúscula se refiere a las masas de los átomos neutros. Esto se obtiene a partir de la ecuación (16–19), sumando $(Z_a + Z_A)mc^2$ a los primeros dos términos y restando $(Z_B + Z_b)mc^2$ de los dos últimos, en donde mc^2 es la energía de masa en reposo de un electrón. Este procedimiento es válido, puesto que la relación

$$Z_a + Z_A = Z_B + Z_b \tag{16–22}$$

debe ser válida en cualquier reacción nuclear, con el fin de conservar la carga. La reacción de Rutherford (16–1) proporciona un buen ejemplo del uso de las expresiones (16–20) y (16–21), para proporcionar una conexión entre las masas atómicas incluidas en una reacción. Las medidas muestran que para esta reacción, $Q = -1.18$ Mev. Esta energía se puede transformar en su equivalente de masa en reposo, -0.00126 uam, dividiendo por c^2 y convirtiendo a las unidades apropiadas, o bien, utilizando la relación:

$$1 \text{ uam} \leftrightarrow 931.14 \text{ Mev} \tag{16–23}$$

que procede de la evaluación de la energía de masa en reposo de una partícula cuya masa en reposo, es 1 uam. Así, tenemos:

$$-0.00126 \text{ uam} = M_{_2He^4} + M_{_7N^{14}} - M_{_8O^{17}} - M_{_1H^1}$$

Esto permite que se determine una de las masas atómicas, por ejemplo, la $M_{_8O^{17}}$, en términos de las otras tres. El análisis del balance de energías en un gran número de reacciones ha proporcionado medidas de masas que coinciden de manera exacta con las medidas realizadas por la espectrometría de masas. Además, la concordancia entre estos dos métodos proporciona una confirmación excelente de la teoría relativista de masa y energía, en la que se basa el análisis de balance de energías.

En la tabla (16–1) se incluyen unas cuantas de las muchas masas atómicas que se han medido y, asimismo, la masa del neutrón. Observe que $M_{Z,A}$, la masa de un átomo de valores Z y A dados, se acerca siempre mucho al valor de A uam. Esta es una consecuencia de la definición de la uam de tal modo que $M_{8,17} = 16.00000$. Si se definiera la uam de tal modo que $M_{1,1} = 1.00000$, lo que, a primera vista, parecería más natural, la $M_{Z,A}$ no se acercaría al valor de A uam para átomos de A grande. El lector puede demostrar esto mediante unas cuantas operaciones aritméticas.

El mismo procedimiento demostraría también el punto mucho más fundamental de que la masa de un átomo es menor que la de sus partes constituyentes. Por ejemplo, $M_{2,4} = 4.003860$ uam, mientras que la masa de sus partes constitutivas es la de dos átomos $^1H^1$ más la masa de dos neutrones, o sea, $2M_{1,1} + 2M_{0,1} = 4.034248$ uam. Esta deficiencia de masa del átomo se debe a un *defecto de masa* de su núcleo*, resultante directamente de la equivalencia entre la energía y la masa. Podemos ver esto, tomando en consideración cualquiera de cuatro nucleones en el núcleo $^2He^4$. Puesto que el

* En la comparación que acabamos de hacer, se incluyen dos masas en reposo de electrones en $M_{2,4}$ y $2M_{1,1} + 2M_{0,1}$, y el equivalente de masa de la energía de amarre del electrón es despreciable. Así, la deficiencia de masa sólo puede deberse al núcleo.

www.FreeLibros.me

TABLA 16–1
Masas atómicas y energías de enlace

	Z	A	Masa (uam)	Energía de enlace (Mev) Total (ΔE)	Por Nucleón ($\Delta E/A$)
$_0n^1$	0	1	1.008982 (±3)	—	—
$_1H^1$	1	1	1.008142 (±3)	—	—
$_1H^2$	1	2	2.014732 (±4)	2.22	1.11
$_2He^3$	2	3	3.016977 (±11)	7.72	2.57
$_2He^4$	2	4	4.003860 (±12)	28.3	7.07
$_4Be^9$	4	9	9.01494 (±16)	58.0	6.45
$_8O^{16}$	8	16	16.00000 (±0)	127.5	7.97
$_{29}Cu^{63}$	29	63	62.94826 (±20)	552.1	8.75
$_{50}Sn^{120}$	50	120	119.94012 (±72)	1020	8.50
$_{74}W^{184}$	74	184	184.0052 (±11)	1476	8.02
$_{92}U^{238}$	92	238	238.1234 (±10)	1803	7.58

nucleón está ligado de manera estable al núcleo, debe moverse en cierto tipo de potencial real de atracción, que representa la atracción neta de los otros tres nucleones. Además, para estar ligado, debe tener una energía negativa $E < 0$. Esta situación se ilustra en la figura 16–15. La energía mínima requerida para retirar al nucleón del núcleo, dejando un nucleón libre en $r \to \infty$, es $|E|$. A la inversa, si se presenta un nucleón libre a partir de $r \to \infty$ y se combina con los otros nucleones para formar el núcleo, su energía debe disminuir en la cantidad $|E|$. (La energía en exceso deberá ser transportada

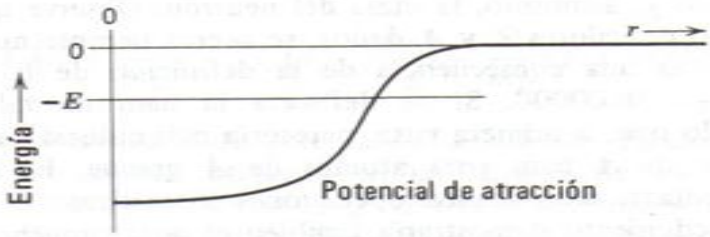

Figura 16-15. Representación esquemática del potencial y las energías totales de un nucleón en un núcleo de helio.

hacia afuera por un rayo gamma o por medio de algún otro mecanismo.) Puesto que se obtiene la misma situación para los otros nucleones del núcleo, vemos que cuando un sistema disperso de nucleones libres se combina para formar un núcleo, la energía total del sistema debe disminuir en una cantidad ΔE, *la energía de amarre del núcleo.* De acuerdo con la ecuación (1–24), la disminución ΔE en la energía total del sistema debe ir acompañada por una disminución ΔM de su masa, en donde,

$$\Delta M = \Delta E/c^2 \tag{16–24}$$

www.FreeLibros.me

Para $^2He^4$, el defecto de masa ΔM es $4.034248 - 4.003860 = 0.030388$ uam. Por consiguiente, la energía de amarre es $\Delta E = \Delta Mc^2 = 28.3$ Mev, en donde hemos utilizado la expresión (16–23). Esta cifra se incluye en la penúltima columna de la tabla (16–1). La última columna incluye los valores de $\Delta E/A$, la energía de amarre del núcleo, dividida por el número de nucleones que contiene. Para $^2He^4$, esta *energía promedio de amarre por nucleón* es $28.3/4 = 7.07$ Mev.

Una de las características más importantes de un núcleo es su energía promedio de amarre por nucleón. Esta cantidad se presenta como función de A en la figura 16–16. Los puntos son los datos obtenidos a partir de las masas medidas, de la manera que acabamos de describir. La curva continua se obtiene a partir de una ecuación que describiremos más adelante. Observe que, al principio, $\Delta E/A$, se eleva rápidamente al aumentar A y, a continuación, se hace razonablemente constante, a un valor de

$$\Delta E/A \sim 8 \text{ Mev} \tag{16–25}$$

Sin embargo, no es completamente constante; obtiene su máximo en, aproximadamente, 8.7 Mev para $A \simeq 60$ y, luego, disminuye lentamente a aproximadamente 7.5 Mev, para $A \simeq 240$. Una consecuencia de esta disminución lenta en $\Delta E/A$ es el famoso fenómeno de la *fisión nuclear*, en la que un núcleo de A grande, tal y como el $^{92}U^{238}$, se divide en dos núcleos de A intermedia. Esto sucede debido a que el estado final es más estable que el inicial, puesto que la energía promedio de amarre por nucleón aumenta del valor $\simeq 7.5$ Mev,

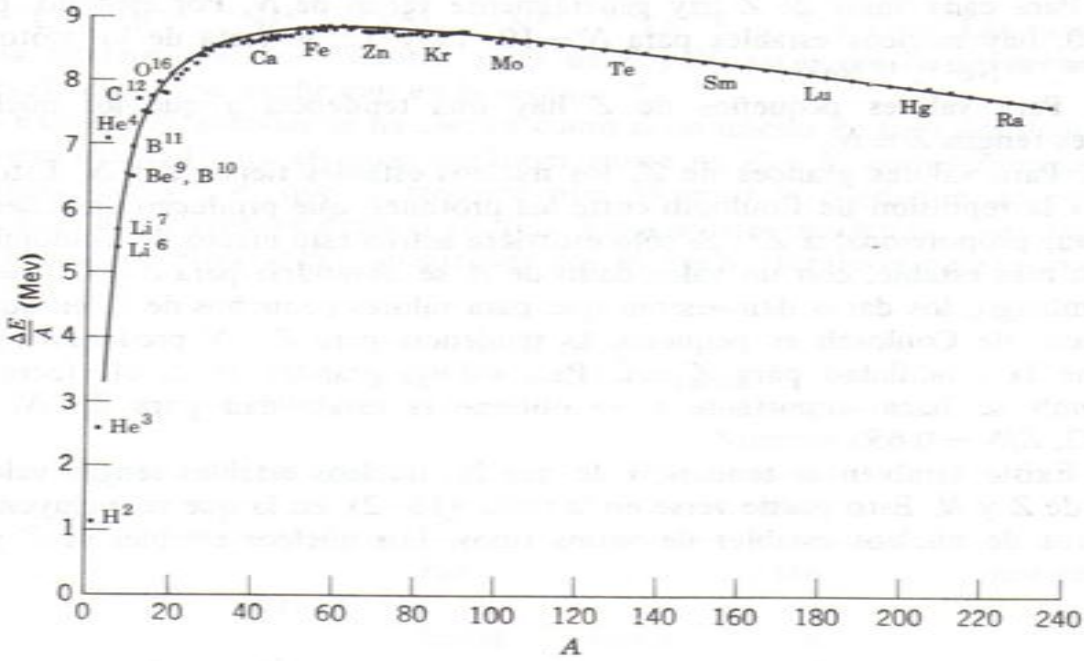

Figura 16-16. La energía promedio de amarre por nucleón para varios núcleos. La curva suave procede de la fórmula semiempírica de masa. Tomado de R. B. Leighton, *Principles of Modern Physics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1959.

www.FreeLibros.me

característico del núcleo de A grande al de $\simeq 8.5$ Mev característico de los dos núcleos de A intermedia. La energía liberada es de aproximadamente 1 Mev por nucleón, o sea, cerca de 1 Mev por nucleón × 200 nucleones = 200 Mev en total.* La emisión de partículas alfa es un caso especial de fisión, en el que uno de los núcleos finales es $^2He^4$ y tiene lugar por la misma razón. El fenómeno de *fusión nuclear* consiste en la combinación de dos o más núcleos de valores muy pequeños de A, para formar un núcleo mayor, que tiene una energía promedio de amarre más elevada por nucleón y, por esto, es más estable, debido a que su valor de A se acerca más al de $A = 60$, para el que $\Delta E/A$ obtiene su punto máximo. Parecería, por esta exposición, que sólo unos cuantos núcleos de valores cercanos a $A = 60$ serán estables. Esto no es cierto, debido a que hay otros factores que tienden a inhibir la fisión y la fusión. Excepto para $A = 5$ y $A = 8$, hay núcleos para todos los valores de A, de 1 a más allá de 200, que son estables o tienen vidas tan inconmensurablemente largas que pueden considerarse estables.

Es interesante tomar en consideración la distribución de los valores de Z y $(A - Z)$ de esos núcleos estables. Hemos visto que esta información puede obtenerse de las medidas del espectrómetro de masas. Por ejemplo, estas medidas muestran que para $Z = 8$, hay núcleos estables para $A = 16, 17, 18$ (los isótopos de ^8O). Los datos se presentan gráficamente en la figura 16–17. Cada núcleo estable está indicado por un cuadrado cuya abscisa es $(A - Z) = N$, el número de neutrones en el núcleo, cuya ordenada es Z, el número de protones en el núcleo. Observe que:

1. Para cada valor de Z hay generalmente varios de N. Por ejemplo, para $Z = 10$, hay núcleos estables para $N = 10$, 11 y 12; se trata de los isótopos $^{10}Ne^{20}$, $^{10}Ne^{21}$, $^{10}Ne^{22}$.

2*a*. Para valores pequeños de Z hay una tendencia a que los núcleos estables tengan $Z = N$.

2*b*. Para valores grandes de Z, los núcleos estables tienen $Z < N$. Esto se debe a la repulsión de Coulomb entre los protones, que producen una energía positiva, proporcional a Z^2. Si sólo estuviera activo este efecto de Coulomb el núcleo más estable, con un valor dado de A se obtendría para $Z = 0$, $N = A$. Sin embargo, los datos demuestran que para valores pequeños de Z, en donde el efecto de Coulomb es pequeño, la tendencia para $Z = N$ predomina y se obtiene la estabilidad para $Z \simeq N$. Para valores grandes de Z, el efecto de Coulomb se hace importante y se obtiene la estabilidad para $Z < N$. En $Z = 82$, $Z/N = 0.65$.

3. Existe también la tendencia de que los núcleos estables tengan valores pares de Z y N. Esto puede verse en la tabla (16–2), en la que se incluyen los números de núcleos estables de varios tipos. Los núcleos estables de Z y N impares son

* 200 Mev = 3×10^{-14} Btu, que no parece ser mucha energía, en términos de esta unidad macroscópica. Sin embargo, la masa, $200M_{1,1} = 200 \times 1.7 \times 10^{-24}$ gm $= 7 \times 10^{-25}$ lb del sistema que emite esta energía no es tampoco muy grande. La energía emitida por libra, $3 \times 10^{-14}/7 \times 10^{-25} = 4 \times 10^{10}$ Btu/lb, es muy grande; es aproximadamente 10^6 veces mayor que la energía emitida por libra de carbón en combustión.

www.FreeLibros.me

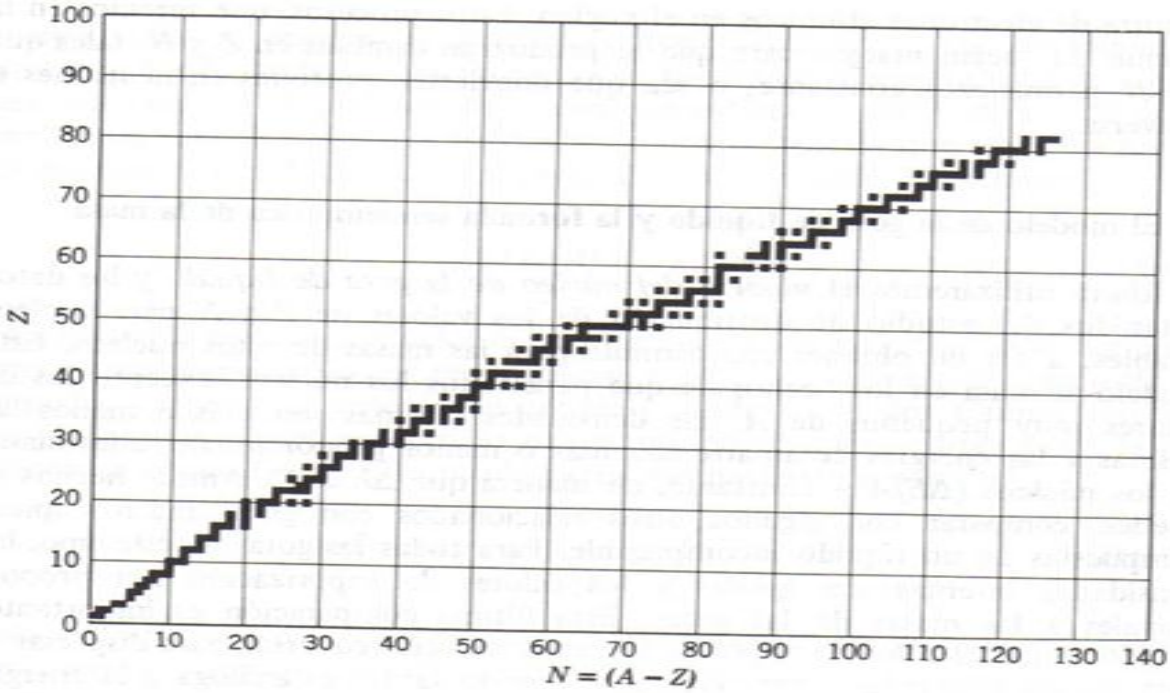

Figura 16-17. Distribución de núcleos estables.

$^{1}H^{2}$, $^{3}Li^{6}$, $^{5}B^{10}$, $^{7}N^{14}$, $^{19}K^{40}$, $^{23}V^{50}$, $^{57}La^{138}$ y $^{71}Lu^{176}$. Las razones para la tendencia a tener valores pares de Z y N, así como la que tiende a valores de $Z = N$, se explicarán en la sección 7.

La exposición anterior se ha escrito como si un núcleo de un valor dado de A tuviera libertad para efectuar cualquier ajuste en Z y N, consistente con la condición $Z + N = A$, que se requiere para alcanzar la condición de estabilidad. Esto no constituye licencia poética. Estos ajustes pueden ocurrir, debido a la emisión de electrones o positrones por el núcleo (emisión beta) o por la

TABLA 16–2
Distribución de núcleos estables

A	N	Z	Número de núcleos estables
Par	Par	Par	166
	Impar	Impar	8
Impar	Par	Impar	57
	Impar	Par	53

www.FreeLibros.me

captura de electrones atómicos en el núcleo. Estos procesos, que veremos en la sección 11, dejan margen para que se produzcan cambios en Z y N, tales que $Z+N$ permanezca constante; o sea que convierten protones en neutrones o viceversa.

5. El modelo de la gota de líquido y la fórmula semiempírica de la masa

Ahora utilizaremos el *modelo del núcleo de la gota de líquido* y los datos obtenidos del estudio de distribución de los valores de Z y N para núcleos estables, a fin de obtener una fórmula para las masas de estos núcleos. Este modelo se basa en los hechos de que para todos los núcleos, excepto los de valores muy pequeños de A, las densidades internas son más o menos las mismas y las energías de amarre son más o menos proporcionales a las masas de los núcleos ($\Delta E/A \sim$ constante, de manera que $\Delta E \propto A$). Ambos hechos se pueden comparar con algunos otros relacionados con gotas macroscópicas compuestas de un líquido incompresible. Para todas las gotas de este tipo, las densidades internas son iguales y los calores de vaporización son proporcionales a las masas de las gotas. Esta última comparación es importante, debido a que el calor de vaporización es la energía requerida para dispersar la gota en sus moléculas constituyentes y, por lo tanto, es análoga a la energía de amarre del núcleo. Para desarrollar la fórmula de la masa, emplearemos el modelo para sugerir otras analogías entre un núcleo y una gota de líquido.

La fórmula contiene la suma de seis términos,

$$M_{Z,A} = \sum_{i=0}^{5} f_i(Z, A) \tag{16–26}$$

El primer término es la masa de las partes constituyentes del átomo,

$$f_0(Z, A) = 1.008142\,Z + 1.008982\,(A - Z) \tag{16–27}$$

en donde el coeficiente de Z es la masa del átomo de $^1H^1$ en uam y el coeficiente de $(A - Z)$, que es la masa del neutrón $^0N^1$ en uam. Los términos restantes corrigen los equivalentes de masa de varios efectos que contribuyen a la energía nuclear total, de amarre. El más importante es

$$f_1(Z, A) = -a_1 A \tag{16–28}$$

que representa una energía de amarre esencialmente proporcional a la masa o el volumen del núcleo. En el caso de una gota de líquido se tendría presente un término similar. El que sigue es

$$f_2(Z, A) = +a_2 A^{2/3} \tag{16–29}$$

una corrección positiva proporcional al área superficial del núcleo. En una gota de líquido, este término representaría el efecto de la energía de la tensión superficial, que se basa en el hecho de que una molécula en la superficie de una gota experimenta fuerzas de atracción sólo desde un lado, de

www.FreeLibros.me

manera que su energía de amarre es menor que la de una molécula del interior. Por lo tanto, el simple hecho de hacer que la energía total de amarre sea proporcional al volumen de la gota, sobrestima la energía de amarre de las moléculas superficiales, y se deberá hacer una corrección que sea proporcional al número de dichas moléculas, o bien, al área superficial. El término

$$f_3(Z, A) = +a_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}} \tag{16–30}$$

representa la energía de Coulomb positiva del núcleo cargado que se supone es una esfera cuyo radio es proporcional a $A^{1/3}$. En el caso de una gota de líquido, cargada, se tendría un término similar. Los dos últimos términos incluyen propiedades específicas de un núcleo. Por una parte, existe la tendencia de tener $Z = N$. Esto puede explicarse mediante el término

$$f_4(Z, A) = +a_4 \frac{(Z - A/2)^2}{A} \tag{16–31}$$

que es cero para $Z = N = (A - Z)$, o bien $2Z = A$; pero que, de otra manera, es positiva y aumenta al incrementarse la desviación a esa condición. La forma que se utiliza en la ecuación (16–31) es la más sencilla que tiene estas propiedades; pero existe también cierta justificación teórica que se presentará en la sección 7. La tendencia a tener Z par y N par, se explica mediante el término,

$$f_5(Z, A) = 0, \quad \begin{cases} -f(A), & Z \text{ par}, \quad (A - Z) = N \text{ par} \\ \begin{matrix} Z \text{ par}, & (A - Z) = N \text{ non} \\ Z \text{ non}, & (A - Z) = N \text{ par} \end{matrix} \\ +f(A), & Z \text{ non}, \quad (A - Z) = N \text{ non} \end{cases} \tag{16–32}$$

que reduce la masa, si tanto Z y N son pares, y la incrementa si Z y N son impares. La forma de la función $f(A)$ se determina mediante un ajuste de los datos. Se ha encontrado que el mejor ajuste para una ley de potencia simple, se obtiene con

$$f(A) = a_5 A^{-1/2} \tag{16–32'}$$

Utilizando las ecuaciones de la (16–26) a la (16–32'), obtenemos,

$$M_{Z,A} = 1.008142\, Z + 1.008982\,(A - Z) - a_1 A + a_2 A^{2/3} + a_3 Z^2 A^{-1/3} + a_4 (Z - A/2)^2 A^{-1} + \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ +1 \end{pmatrix} a_5 A^{-1/2} \quad \text{(uam)} \tag{16–33}$$

Esta expresión se denomina *fórmula semiempírica de la masa*, porque los *parámetros a_1 a a_5 se obtienen en forma empírica, ajustando las masas*

www.FreeLibros.me

medidas. Weizsacker (1935) fue el primero en obtener este tipo de fórmula. Desde entonces, se han determinado los parámetros en varias ocasiones. Green (1954) encontró

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.01692 \\ a_2 &= 0.01912 \\ a_3 &= 0.000763 \quad \text{(todos en uam)} \\ a_4 &= 0.10178 \\ a_5 &= 0.012 \end{aligned} \tag{16–33'}$$

Usando estos parámetros, se puede obtener un ajuste muy aceptable para las masas medidas de *todos* los núcleos estables, excepto los que tienen valores muy pequeños de A; por lo general, la discrepancia es menor de varios milésimos de 1 uam. En la figura 16–16 se muestra una comparación, en la que la curva continua indica la energía de amarre promedio por nucleón, evaluada gracias a la ecuación (16–33), y los puntos dan la misma cantidad evaluada directamente a partir de las masas medidas. La fórmula semiempírica de la masa es de gran utilidad, ya que describe con bastante exactitud las masas de varios cientos de núcleos estables y de una mayor cantidad de núcleos inestables, en función de 5 parámetros solamente.

6. Números mágicos

El modelo de la gota de líquido explica el comportamiento promedio de los núcleos en relación con la masa y, por lo tanto, en relación con la estabilidad. Sin embargo, algunos núcleos que tienen ciertos valores de Z y/o N, muestran desviaciones notables de este comportamiento promedio, siendo extrañamente estables. Estos valores de Z y/o N son los *números mágicos*,

$$2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 \tag{16–34}$$

La situación es análoga a la estabilidad desacostumbrada de los sistemas electrónicos de los átomos de gases nobles, que contienen un número mágico, 2, 10, 18, 36, 54, 86 de electrones. Sin embargo, en el caso nuclear, los efectos que indican la estabilidad poco usual, no son tan pronunciados como en el caso atómico y es necesario considerarlos a todos, a fin de demostrar en forma concluyente el carácter "mágico" de los números (16–34). Estas consideraciones, debidas en su mayor parte a Mayer (1948), son las siguientes:

1. Existe una tendencia de los núcleos a tener un valor mágico de Z y/o N. Esto podemos verlo al analizar la figura 16–17. Por ejemplo, hay 6 isótopos estables para $Z = 20$, mientras que el número promedio de isótopos estables en esa región de la tabla periódica es de alrededor de 2. Para $Z = 50$, hay 10 isótopos estables, aunque el número promedio en esa región es, aproximadamente, 4. Hay 7 núcleos estables que tienen $N = 82$, a pesar de que la cantidad promedio en esa región de N es sólo de, poco más o menos, 3. Se pueden observar varios ejemplos similares.

www.FreeLibros.me

2. En la figura 16–16 se indica que la energía promedio de amarre por nucleón es notablemente superior para núcleos con Z y N (o cualquiera de ambos) igual a 2 y 8, que la de los núcleos cercanos. El ejemplo más notable es el del $^2He^4$, para el cual $Z = N = 2$. Estos efectos son más pronunciados todavía si se toma en cuenta una medida de estabilidad más sensible que la energía promedio de amarre por nucleón. Esta es E_b, *la energía de amarre del "último" neutrón o protón* del núcleo, que es la energía mínima requerida para separar a un neutrón o un protón del núcleo. Como ejemplo, vemos que la energía de amarre del último neutrón en $^2He^4$ (la energía necesaria para producir la reacción $^2He^4 \rightarrow {}^2He^3 + {}^0n^1$) es 20.6 Mev. La energía de amarre del último protón en $^2He^4$ es 19.8 Mev, que son anormalmente altas. En la figura 16–18 se muestra una gráfica de la energía de amarre del último neutrón de varios núcleos pesados. La abscisa es el número de neutrones del núcleo y la ordenada es la diferencia entre el valor real de la energía de amarre del último neutrón y el valor predicho por la fórmula semiempírica de la masa. El valor predicho es una función suave de N (excepto para los efectos del término 16–32), y disminuye lentamente desde alrededor de 7 Mev para valores intermedios de N, hasta aproximadamente 5 Mev para valores grandes de N. La estabilidad poco usual de los núcleos con $N = 28, 50, 82, 126$, se demuestra mediante la energía excepcionalmente grande que se requiere para separar su último neutrón.

3. Existen algunas otras pruebas menos convincentes, tales como el hecho de que para 3 de los 4 emisores espontáneos de neutrones, $^8O^{17}$, $^{36}Kr^{87}$ y $^{54}Xe^{137}$, N es igual al número mágico más 1. Esto implica una afinidad extrañamente pequeña para los neutrones adicionales.

La analogía entre los números mágicos nucleares y atómicos, hizo que muchos científicos buscaran una explicación del fenómeno nuclear, que fuera análoga a la expuesta en el caso del fenómeno atómico. El lector recordará que el punto clave en esta explicación son las capas cerradas que forman los electrones que se mueven *independientemente* en el potencial atómico. No obstante, cuando los números mágicos nucleares se estudiaron seriamente por primera vez (1948), parecía muy difícil aceptar que cualquier explicación

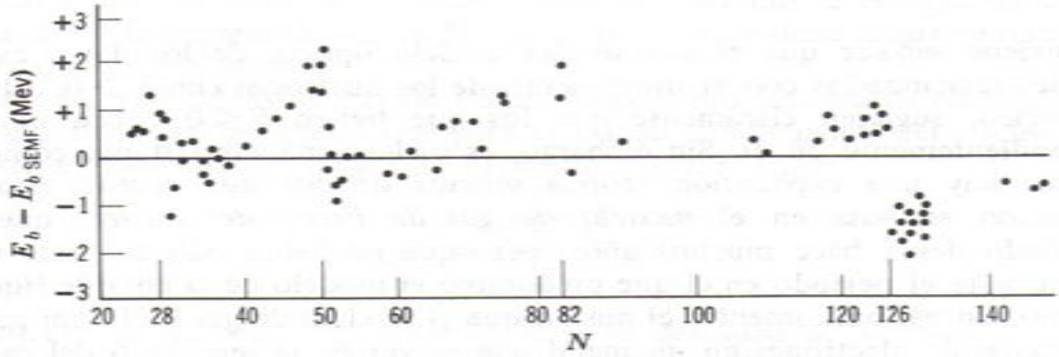

Figura 16-18. La energía de enlace del último neutrón de varios núcleos. Tomado de J. A. Harvey, *Phys, Rev.*, **81**, 353 (1951).

www.FreeLibros.me

basada en el movimiento de una partícula independiente pudiera ser válida en el caso del núcleo. La razón fue que durante varios años había predominado el modelo de la gota de líquido y un hecho básico para este modelo era que un nucleón de un núcleo interacciona con los que le rodean fuertemente. Al existir estas interacciones fuertes, el nucleón se vería constantemente dispersado al desplazarse a través del núcleo, y seguiría una trayectoria errática, más semejante al movimiento browniano que al movimiento de un electrón que se desplaza independientemente a lo largo de su órbita en una capa cerrada.

Sin embargo, desde el punto de vista actual, no hay problemas para comprender el movimiento de partícula independiente de los nucleones en un núcleo. En efecto, es una extrapolación muy razonable del modelo óptico (1952). Los cálculos registrados en las ecuaciones (16–13) y (16–14), indican que la longitud de atenuación Λ de un nucleón que se mueve a través de un núcleo, aumenta en un factor de 6, conforme disminuye la energía total del nucleón, desde $E = +20$ Mev a $E = +2$ Mev, y que Λ es varias veces las dimensiones nucleares a energías menores. Una extrapolación de este comportamiento, de $E = 0$ a $E < 0$, predice que, para los nucleones ligados que corresponden a $E < 0$, la longitud de atenuación Λ es muy larga y, por lo tanto, que los nucleones ligados pueden moverse en forma bastante independiente en el núcleo. En otras palabras, un nucleón que se mueve por un núcleo con $E > 0$ debe tener una cierta probabilidad de sufrir colisiones que involucren una pérdida de energía en el marco en el que el CM del núcleo está en reposo, porque se desplaza en un potencial complejo. Sin embargo, la dependencia energética de $E > 0$ de las partes reales o imaginarias de este potencial, indicadas por la figura 16–10, permite aceptar más fácilmente que para $E < 0$, no existe una parte imaginaria en el potencial, de modo que no pueda haber colisiones con pérdida de energía en el marco del CM del núcleo. No obstante, puesto que prácticamente todas las colisiones entre un nucleón y otro nucleón implican una pérdida de energía en este marco, podemos concluir que si el potencial es puramente real para los nucleones ligados, no pueden producirse tales colisiones entre estos nucleones y, por lo tanto, deben moverse independientemente a través del núcleo.

7. El modelo de gas de Fermi

Conviene señalar que el análisis del modelo óptico, de los datos experimentales relacionados con el movimiento de los nucleones con $E > 0$, a través del núcleo, sugieren claramente que los que tienen $E < 0$ deben moverse independientemente en él. Sin embargo, es incluso más importante comprender que hay una explicación teórica sencilla de por qué sucede esto. La explicación se basa en el *modelo de gas de Fermi del núcleo*, que fue presentado desde hace muchos años; pero que no había sido del todo aceptado durante el período en el que predominó el modelo de la gota de líquido. Este modelo es, básicamente, el mismo que el modelo de gas de Fermi para la conducción de electrones en un metal que se vio en la sección 6 del capítulo 12 y que supone que los neutrones y los protones se mueven dentro de un potencial de atracción de dimensiones nucleares y que, en el estado base, estos

www.FreeLibros.me

nucleones llenan los niveles energéticos en tal forma que reducen a un mínimo la energía total; pero no violan el principio de exclusión. (Recuerde que tanto los neutrones como los protones son partículas de Fermi con números cuánticos de *spin*, $i = \frac{1}{2}$, al igual que los electrones.) En la figura 16–19 se indican los niveles de energía que han llenado los neutrones en el estado base de un núcleo. Puesto que un protón puede distinguirse de un neutrón, el principio de exclusión se aplica independientemente en los dos tipos de nucleones y debemos imaginarnos un diagrama separado e independiente, que representa los niveles energéticos que llenan los protones en el estado base del núcleo.

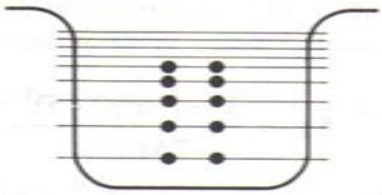

Figura 16-19. Representación esquemática de los niveles de energía que llenan los neutrones en el estado base de un núcleo.

Estos diagramas nos permiten ver inmediatamente por qué puede haber una ausencia casi total de colisiones entre los nucleones, cuando el núcleo está en su estado base. El punto es que todos los niveles que son energéticamente accesibles ya están llenos y, por ello, no pueden producirse colisiones, excepto en las que dos nucleones del mismo tipo exactamente intercambien energía. No obstante, el efecto neto de un intercambio de este tipo entre dos partículas no distinguibles entre sí, es el mismo que si no se produjera ninguna colisión en absoluto. Entonces, podemos comprender por qué para el estado base del núcleo, el potencial es real y los nucleones se mueven independientemente. Podemos comprender también cómo el principio de exclusión puede ser eficaz, incluso para inhibir colisiones entre un nucleón de energía positiva baja y los nucleones ligados de un núcleo. En efecto, algunos cálculos basados en el modelo de gas de Fermi, han demostrado que la reducción en la parte imaginaria del potencial del modelo óptico al disminuir la energía (la dependencia sobre la energía de W_0 en la figura 16–10), se debe fundamentalmente al principio de exclusión.

Más aún, el modelo de gas de Fermi proporciona una buena estimación de la profundidad del potencial real para el estado fundamental del núcleo. Este se obtiene evaluando la energía de Fermi (12–38), mediante:

$$E_f = \frac{3^{2/3}\pi^{4/3}\hbar^2}{2M}\rho^{2/3}$$

en función de la masa del nucleón M y su densidad ρ. Veamos el gas de neutrones de Fermi en un núcleo esférico uniforme, de radio,

$$R = r_0 A^{1/3}$$

www.FreeLibros.me

Para un núcleo típico, la cantidad de neutrones es:

$$N = 0.6A$$

De donde,

$$\rho = \frac{N}{\frac{4}{3}\pi r_0^3 A}$$

nos da:

$$\rho = \frac{0.6A}{1.33\pi r_0^3 A} = \frac{0.45}{\pi r_0^3}$$

y la energía de Fermi es:

$$E_f = \frac{3^{2/3}\pi^{1/3}\hbar^2(0.45)^{2/3}}{2M\pi^{2/3}r_0^3} \tag{16-35}$$

Si usamos una constante de radio $r_0 = 1.25 \times 10^{-13}$ cm, que sea consistente con el radio del potencial del modelo óptico de la expresión (16–10′), y evaluando los otros parámetros, obtenemos:

$$E_f \simeq 34 \text{ Mev}$$

Las relaciones entre la profundidad del potencial V_0, la energía de Fermi E_f y la energía de amarre, E_b, del último neutrón, se muestran en la figura 16–20. Como mencionamos con anterioridad, el valor medido de E_b es de, aproximadamente, 6 Mev, para una gran variedad de núcleos. Así, el modelo de gas de Fermi predice que:

$$|V_0| = E_f + E_b \simeq 34 + 6 = 40 \text{ Mev}$$

que concuerda satisfactoriamente con el valor de 50 Mev que se obtiene extrapolando a $E < 0$, los valores obtenidos del modelo óptico (extrapolando V_0 de la figura 16–10).

La tendencia de los núcleos a tener $Z = N$ tiene una explicación sencilla gracias al modelo de gas de Fermi. Considere un núcleo de Z muy pequeña, en donde este efecto domina debido a que el potencial de Coulomb es muy

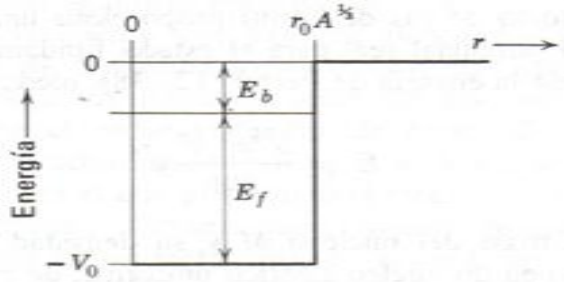

Figura 16-20. Ilustración de la relación entre la profundidad del potencial, la energía de Fermi y la energía de enlace del último neutrón.

www.FreeLibros.me

pequeño. En este núcleo, hay dos gases de Fermi independientes, los neutrones y los protones, que se mueven en el mismo potencial nuclear. Los niveles de energía de este sistema se indican en la figura 16–21. Exceptuando el efecto de un potencial de Coulomb positivo muy pequeño que actúa sobre el sistema de protones, los niveles de energía de los dos sistemas son idénticos, ya que, para ambos, el potencial nuclear es el mismo. Es evidente, entonces, que para un valor grande de A, la energía total del núcleo se reduce a un mínimo, cuando los niveles se llenan con $Z = N$, ya que, si se violara esta condición, los nucleones ocuparían niveles de energía mayor que la necesaria. El análisis cuantitativo de este argumento lleva al término (16–31), que se usó en la fórmula semiempírica de la masa para expresar la tendencia a que $Z = N$. De acuerdo con las ecuaciones anteriores (16–35), la energía de Fermi de los sistemas de neutrones y protones se puede expresar como:

$$E_{f_n} = C(N/A)^{2/3}, \qquad E_{f_p} = C(Z/A)^{2/3}$$

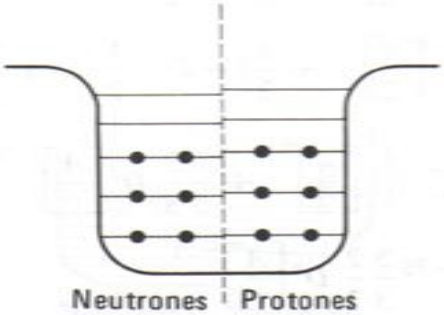

Figura 16-21. Representación esquemática de gases independientes de Fermi de neutrones y protones, en un núcleo.

en donde C es una constante. A continuación, usaremos la expresión (12–40) para evaluar la energía total de los sistemas de neutrones y protones, medidas a partir de la base del potencial, en función de E_{f_n} y E_{f_p}. Lo cual nos da:

$$E_{t_n} = C' \frac{N^{5/3}}{A^{2/3}}, \qquad E_{t_p} = C' \frac{Z^{5/3}}{A^{2/3}}$$

en donde $C' = 3C/5$. La energía del núcleo es la suma de estos dos términos, que es:

$$E(Z, A) = C'A^{-2/3}[N^{5/3} + Z^{5/3}] \tag{16–36}$$

Esto está en función sólo de Z y A, ya que

$$N + Z = A \tag{16–37}$$

Como habíamos dicho antes, el mínimo de la función (16–36), sujeta a la condición (16–37), se encuentra para $N = Z = A/2$. Al desviarse de este

www.FreeLibros.me

mínimo, la energía del núcleo aumenta y la corrección correspondiente en la fórmula semiempírica de la masa será proporcional a este aumento. De donde,

$$f_4(Z, A) \propto E(Z, A) - E(Z, A)_{\min} = C'A^{-2/3}\{N^{5/3} + Z^{5/3} - 2[A/2]^{5/3}\}$$

Ahora, sea,

$$D \equiv \frac{N - Z}{2} = N - \frac{A}{2} = \frac{A}{2} - Z$$

Entonces,

$$f_4(Z, A) \propto A^{-2/3}\{[A/2 + D]^{5/3} + [A/2 + (-D)]^{5/3} - 2[A/2]^{5/3}\}$$

Utilice la serie de Taylor para desarrollar las dos primeras cantidades dentro de las llaves, conservando los términos hasta D^2. Esto nos da:

$$\left[\frac{A}{2} + D\right]^{5/3} \simeq \left[\frac{A}{2}\right]^{5/3} + \frac{5}{3}D\left[\frac{A}{2}\right]^{2/3} + \frac{5}{3}\frac{2}{3}\frac{D^2}{2}\left[\frac{A}{2}\right]^{-1/3}$$

$$\left[\frac{A}{2} + (-D)\right]^{5/3} \simeq \left[\frac{A}{2}\right]^{5/3} + \frac{5}{3}(-D)\left[\frac{A}{2}\right]^{2/3} + \frac{5}{3}\frac{2}{3}\frac{(-D)^2}{2}\left[\frac{A}{2}\right]^{-1/3}$$

de manera que

$$f_4(Z, A) \propto A^{-2/3}\left\{2\left[\frac{A}{2}\right]^{5/3} + \frac{5}{3}\frac{2}{3}D^2\left[\frac{A}{2}\right]^{-1/3} - 2\left[\frac{A}{2}\right]^{5/3}\right\}$$

$$\propto A^{-2/3}\frac{5}{3}\frac{2}{3}D^2\left[\frac{A}{2}\right]^{-1/3}$$

$$\propto A^{-1}D^2 = \frac{(A/2 - Z)^2}{A}$$

lo cual concuerda con la ecuación (16–31).

El modelo de gas de Fermi proporciona también una explicación parcial para la tendencia de los núcleos a tener valores pares de Z y N. Consideremos el núcleo de Z y N pares, representado en la figura 16–21 y supongamos que construimos el núcleo del siguiente valor más elevado de A, agregando un nucleón. Para reducir al mínimo la energía total, el nucleón irá al nivel de energía más bajo que se encuentre disponible. Este puede ser un nivel de neutrones o protones; pero supongamos que se trata de un nivel de neutrones, como se ilustra en la figura. Así, este núcleo contendrá un neutrón adicional. Ahora, construyamos el núcleo siguiente de la serie, agregando otro nucleón, que será también un neutrón, puesto que existe todavía un lugar vacío en el nivel de neutrones y este nivel es todavía de energía más baja que el nivel vacío de protones. Podemos ver que únicamente para uno de los tres núcleos involucrados en esta discusión, N o Z es impar, y para ninguno de ellos son impares ambos valores de N y Z. Esta explicación indica lo que sucede; pero no es completa. Las medidas de masa, que exige el término (16–32) en la fórmula semiempírica de masa, demuestran que hay también una *energía de apareamiento* que incrementa la energía de amarre del núcleo, cuando N o Z

www.FreeLibros.me

se hacen pares. El origen de la energía de apareamiento reside en el hecho de que la fuerza entre dos nucleones es de atracción. Cuando se agrega el segundo nucleón a un nivel de energía, la fuerza de atracción que ejerce sobre el nucleón que ya se encontraba presente, produce un potencial negativo que hace disminuir la energía de ambos nucleones, o sea, reduce el nivel de energía de que se trate.

Antes de dejar el modelo del gas de Fermi, presentamos la figura 16–22, que indica la forma de los potenciales que actúan sobre los protones y los neutrones en un núcleo de valor Z intermedio o grande. Debido al potencial de Coulomb, el potencial total que actúa sobre los protones es elevado; sin embargo, el nivel lleno más elevado debe tener esencialmente la misma energía, tanto para los neutrones como para los protones, con el fin de que el núcleo sea estable. Esto proporciona una explicación muy gráfica de la razón por la que hay más neutrones que protones en un núcleo de valor Z grande.

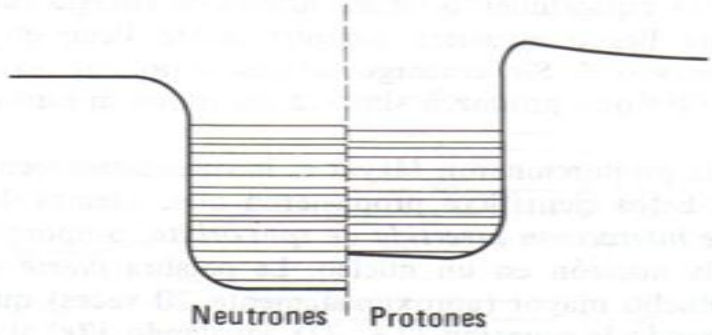

Figura 16-22. Ilustración de por qué hay más neutrones que protones en un núcleo de valor Z grande.

8. El modelo de capas

El modelo de gas de Fermi establece la validez de tratar el movimiento de los nucleones ligados en un núcleo en términos del movimiento independiente de cada nucleón en un potencial neto común de $V(r)$, que representa la atracción promedio de todos los demás nucleones. En este modelo se incluyen ciertas propiedades de mecánica cuántica de un sistema de partículas de Fermi que no interactúan, mediante el uso de la ecuación (12–38), y no se resuelve explícitamente la ecuación de Schrödinger para $V(r)$. Esto resulta adecuado para la descripción de ciertas propiedades promedio del núcleo; pero para una descripción más detallada y capaz de tomar en consideración los números mágicos, es necesario incluir más propiedades importantes de mecánica cuántica de ese sistema, resolviendo realmente la ecuación de Schrödinger para $V(r)$. Al estudio del núcleo en el que se emplea este procedimiento se le llama *modelo de capa del núcleo.* El lector observará que este modelo de núcleo está relacionado con el modelo de gas de Fermi, en la misma forma que la teoría

www.FreeLibros.me

de Hartree del átomo se encuentra relacionada con la teoría atómica de Thomas-Fermi.

Observará, asimismo, que estos modelos nucleares son mucho más vagos que las teorías atómicas correspondientes. En las teorías atómicas autoconsistentes, el potencial neto $V(r)$ está determinado completamente por la teoría; en los modelos nucleares, el radio y la forma exacta del potencial neto $V(r)$ debe incluirse *ad hoc*.

El procedimiento del modelo de capas consiste en encontrar los niveles de energía de los neutrones y los protones para el potencial $V(r)$ de un núcleo particular, resolviendo la ecuación de Schrödinger para este potencial y, a continuación construir el núcleo llenando esos niveles, en el sentido creciente de la energía, con N neutrones y Z protones. Del mismo modo que la teoría de Hartree, las energías de los niveles dependen de los números cuánticos n y l, y cada nivel tiene una capacidad $2(2l+1)$ correspondiente a los 2 valores posibles de m_s y los $(2l+1)$ valores posibles de m_l.* Se esperaba poder encontrar un forma para los potenciales $V(r)$ de los diversos núcleos, en la que la disposición y el espaciamiento de los niveles de energía fueran tales que un nivel fuertemente ligado estuviera completamente lleno en los núcleos con números mágicos N o Z. Sin embargo, se descubrió que no existe una forma razonable para $V(r)$ que produzca siquiera un orden apropiado en los niveles de energía.

La solución la proporcionaron Mayer e, independientemente, Haxel, Jensen y Suess (1949). Estos científicos propusieron que, además del potencial $V(r)$, existe una *fuerte interacción invertida de spin-órbita*, proporcional a $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$, que actúa sobre cada nucleón en un núcleo. La palabra *fuerte* significa que esta interacción es mucho mayor (aproximadamente 20 veces) que lo que pudiera predecirse, utilizando la ecuación (13–27), igualando $V(r)$ al potencial nuclear neto y m a la masa del nucleón. *Invertida* significa que la energía del nucleón se reduce cuando $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ es positivo y aumenta cuando es negativo, de tal modo que el signo de la interacción spin-órbita, es el inverso del signo de la interacción magnética spin-órbita experimentada por un electrón en un átomo. Sin embargo, puesto que la magnitud de la interacción spin-órbita es proporcional a $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$, del mismo modo que para un electrón, la magnitud del desdoblamiento spin-órbita será aproximadamente proporcional al valor del número cuántico l, lo mismo que para un electrón.**

El efecto neto de la interacción propuesta spin-órbita, se indica en la figura 16–23. La parte de la izquierda muestra la disposición y el espaciamiento aproximado de los niveles de energía que llenan los nucleones en los núcleos con potenciales $V(r)$, en la forma de pozos rectangulares con bordes redondeados, tales como los que se utilizan en el modelo óptico; la parte de la derecha muestra el modo en que esos niveles se dividen, debido a la interac-

* Los números cuánticos n, l, m_l, m_s, al igual que los otros números cuánticos, los vectores de impulso angular y la terminología relacionada, tienen el mismo significado que en la teoría de la estructura electrónica de los átomos.

** Esta es la regla del intervalo de Lande (13–43), que depende sólo de la suposición de que el potencial es proporcional a $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$, además del postulado de que, puesto que $j = l \pm \frac{1}{2}$, la cantidad $j+1$ es más o menos proporcional a l.

www.FreeLibros.me

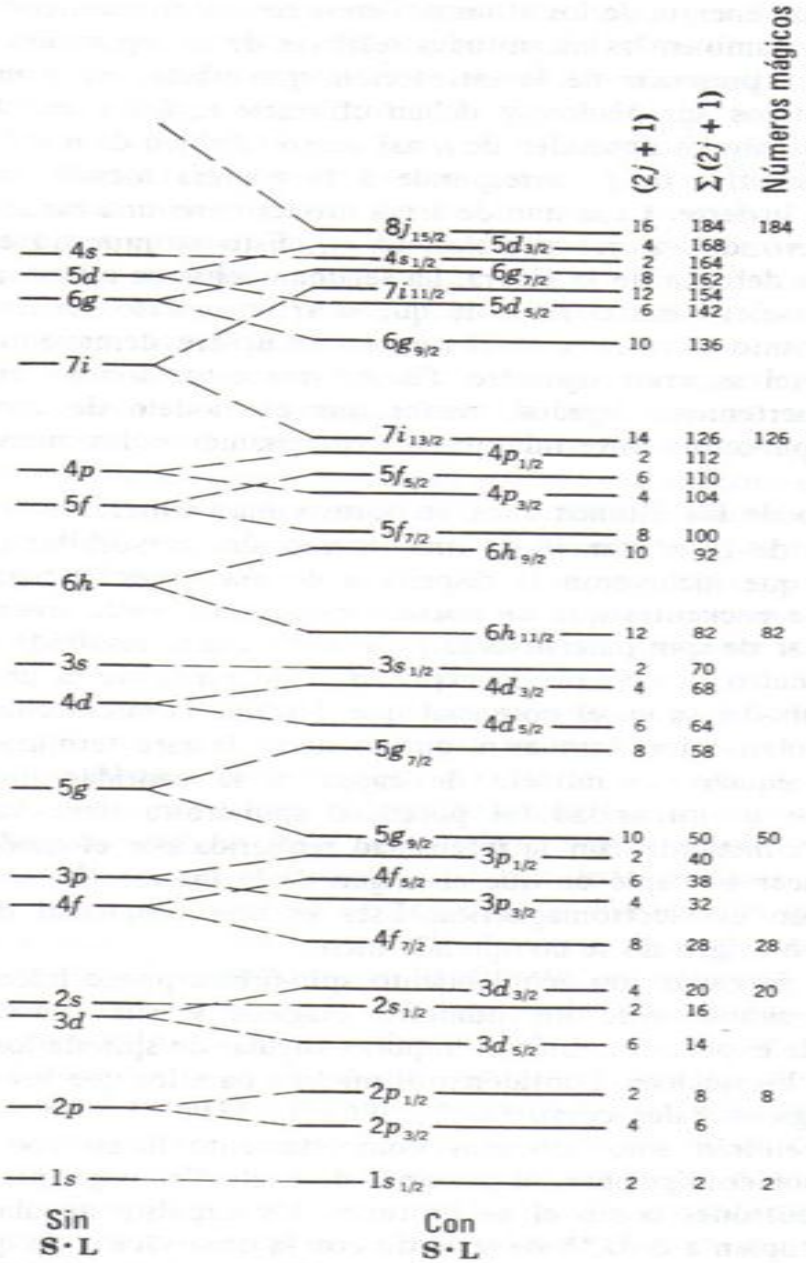

Figura 16-23. Disposición de los niveles de energía más elevados, llenos con nucleones, de acuerdo con el modelo de capas.

ción spin-órbita. Este no es un diafragma de niveles de energía para un núcleo en particular; sino que da el orden en el que los niveles van apareciendo a medida que aumenta el radio del potencial, al incrementar A. Así, el diagrama da el orden en el que se llenan los niveles más elevados de energía del núcleo. El diagrama es análogo a la tabla 13–2, dando la disposición de los niveles

www.FreeLibros.me

más elevados de energía de los átomos, llenos con electrones, con la excepción de que indica también las magnitudes relativas de la separación entre niveles adyacentes. En presencia de la interacción spin-órbita, m_l y m_s no son ya números cuánticos apropiados, y deben utilizarse n, l, j y m_j. Asimismo, las energías de los niveles dependen de j, así como también de n y l, de tal modo que el mayor valor de j corresponde a la energía menor, puesto que la interacción se invierte. Cada uno de estos niveles tiene una capacidad $(2j + 1)$, igual al número de valores posibles de m_j. Esto se muestra en la primera columna de la derecha de la figura. La segunda columna muestra la capacidad total de los niveles hasta el nivel de que se trate, incluso. La tercera columna muestra lo mismo para cada nivel que se encuentre demasiado alejado, por debajo del nivel superior siguiente. Puesto que éstos son los niveles que se encuentran fuertemente ligados, vemos que el modelo de capas de fuerte interacción spin-órbita invertida predice precisamente los números mágicos (16–34).*

En el curso de los últimos años, se obtuvo una verificación completamente independiente de la existencia de una interacción spin-órbita, por medio de experimentos que incluyeron la dispersión de nucleones de baja energía por los núcleos. Se encuentra que un nucleón dispersado puede tener su vector de impulso angular de spin parcialmente polarizado, como resultado de la interacción con el núcleo, y esto puede explicarse sólo mediante la presencia de un término de spin-órbita en el potencial que describe la interacción. Además, el signo de la polarización demuestra que el signo de este término es el mismo que el que requiere el modelo de capas, y la cantidad de polarización demuestra que su intensidad (el potencial spin-órbita tiene varios Mev de profundidad) concuerda con la intensidad requerida por el modelo de capas. Es preciso hacer hincapié en que el origen de la interacción spin-órbita para los núcleos, no es electromagnética. Esta es una propiedad de las fuerzas nucleares, cuyo origen no se comprende bien.

El modelo de capas con acoplamiento spin-órbita puede hacer mucho más que explicar simplemente los números mágicos y sus consecuencias. Por ejemplo, puede explicar también el impulso angular de spin de los estados base de casi todos los núcleos. Consideremos núcleos para los que los dos valores N y Z sean mágicos, tales como $^{8}O^{16}$, $^{20}Ca^{40}$, $^{82}Pb^{208}$. De acuerdo con el modelo, contendrán sólo subcapas completamente llenas con neutrones y protones y, por consiguiente, el principio de exclusión exige que tanto para el sistema de neutrones como el de protones, los impulsos angulares de spin y orbitales se acoplen a cero,** de acuerdo con la observación de que $i = 0$, para estos núcleos. Para núcleos tales como los $^{7}N^{15}$, $^{8}O^{17}$, $^{19}K^{39}$, $^{82}Pb^{207}$ y

* Debe mencionarse que las funciones propias que se obtuvieron al resolver la ecuación de Schrödinger para el potencial $V(r)$ demuestran que las densidades de probabilidad de los nucleones en los estados propios de este potencial, *no* tienen la propiedad de ser grandes sólo en un rango restringido de r. Así, en el modelo nuclear de capas, no hay "capas" de espesor relativamente restringido, en el que se muevan los nucleones. El contraste en este punto, entre el comportamiento del núcleo y el del átomo, se debe a la diferencia en la forma de $V(r)$ de los dos sistemas.

** Vea la exposición relacionada con la tabla 13–9.

www.FreeLibros.me

$^{83}Bi^{209}$, que contienen un número mágico de nucleones de un tipo y un número mágico más o menos 1 de nucleones del otro tipo, el principio de exclusión exige que el impulso angular total del sistema sea el impulso angular total del nucleón o hueco extra.* Así, la figura 16–23 muestra que estos núcleos deben tener $i = \frac{1}{2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ y $\frac{9}{2}$, respectivamente, lo cual va también de acuerdo con la observación. Tomemos ahora en consideración núcleos para los que N y/o Z están más alejados de los números mágicos. Estos núcleos contendrán subcapas con más de un nucleón o hueco, y el problema relativo a cómo se acoplan los impulsos angulares de spin y orbital del núcleo en esas subcapas, es análogo al mismo problema para la estructura electrónica de un átomo. Sin embargo, hay diferencias importantes. La mayoría de los átomos parecen ser ejemplos de acoplamiento *LS*, mientras que casi todos los núcleos parecen constituir ejemplos de acoplamiento *JJ*. Por supuesto, esto es simplemente una consecuencia de la fuerte interacción spin-órbita en los núcleos. Parece ser que otra de las consecuencias es que el acoplamiento en los núcleos es mucho más simple que en los átomos. Consideremos cualquier núcleo con valores pares de N y Z. Como se mencionó en la sección 1, se ha descubierto que todos esos núcleos tienen $i = 0$. Resulta evidente que esto significa que, siempre que haya un número par de nucleones en una subcapa, los impulsos angulares totales de esos nucleones se acoplarán simplemente a cero. A continuación, suponemos que el acoplamiento *JJ* es suficientemente fuerte para que la adición de un nucleón más a la subcapa no destruya el acoplamiento de los nucleones que se encontraban ya presentes; el impulso angular total de toda la subcapa será el correspondiente al nucleón "impar". De acuerdo con esta *suposición, todo el impulso angular de un núcleo de A impar se deberá al impulso angular total del nucleón impar simple, en el nivel de energía más elevada que esté ocupado, e i será igual al valor de j para ese nivel.* Con sólo una o dos excepciones, esta suposición permite que los valores observados de i para todos los núcleos de A impar, se expliquen de acuerdo con la figura 16–23. No obstante, al hacer esto, es necesario dejar margen para intercambios ocasionales de la disposición de ciertos niveles de energía estrechamente espaciados,** debido al efecto de la energía de acoplamiento.

El modelo de capas con acoplamiento spin-órbita, más la suposición adicional que acabamos de mencionar, proporciona una explicación, en cierto modo menos satisfactoria de los momentos magnéticos de los núcleos de A impar. La predicción es que el momento magnético del núcleo se debe al momento magnético del nucleón impar simple, debido a que las contribuciones de otros núcleos se cancelan entre sí. Ahora, es fácil calcular el momento magnético de un nucleón simple de valor j dado, en términos del factor orbital g (que es 1 para el protón y cero para el neutrón), y en términos de su factor de spin g (que es tal que da componentes Z del momento magnético intrínseco $+2.79\mu_N$ para el protón y $-1.91\mu_N$ para el neutrón, en donde el signo da la orientación relativa al spin). Para protones, se han encontrado dos valores que corresponden a las dos posibilidades $j = l + \frac{1}{2}$ y $j = l - \frac{1}{2}$; para los neutrones,

* Vea la exposición relacionada con la tabla 13–9.

** Recuerde que esto sucede también en los niveles atómicos de energía.

www.FreeLibros.me

se han encontrado otros dos valores. Una gráfica de estos dos valores del momento magnético en función de j forma las llamadas *líneas de Schmidt*. Cuando las líneas de Schmidt del protón se comparan con los momentos magnéticos observados de núcleos de Z impar y N par, y las líneas de Schmidt del neutrón se comparan con núcleos de Z par y N impar, puede verse que las predicciones concuerdan con la tendencia general de los valores observados; pero que el acuerdo está lejos de ser perfecto. Esto demuestra que es sólo una aproximación el suponer que un número par de nucleones se acoplan siempre para dar un impulso angular total igual a cero. La aproximación es bastante buena para conducir a la predicción de valores correctos del impulso angular de spin nuclear, debido a que esta cantidad está cuantizada; así, si existe alguna probabilidad de que el número par de nucleones tenga, ocasionalmente, un impulso angular total no igual a cero, debe haber también una probabilidad correspondiente de que el nucleón impar tenga exactamente el impulso angular total adecuado para compensar y mantener el impulso angular total del sistema constante. Sin embargo, si esto sucede, el momento magnético del sistema, que no está cuantizado, puede ser apreciablemente diferente del valor previsto. Aparentemente, es esto lo que sucede.

9. El modelo colectivo

El modelo de capas se basa en la idea de que las partes constituyentes de un núcleo se mueven independientemente. El modelo de la gota de líquido implica lo contrario, puesto que en una gota de líquido incompresible, el movimiento de cualquier parte constituyente depende del de todas las partes cercanas. El conflicto entre estas ideas indica el estado presente de la compresión teórica del núcleo. Asimismo, pone de manifiesto que un modelo proporciona una descripción unificada de sólo un conjunto *limitado* de fenómenos, sin tomar en consideración, en absoluto, la existencia de modelos en conflicto, utilizados para describir otros conjuntos de fenómenos. Contrasta esto con una teoría, como la cuántica o la de la relatividad. Una teoría proporciona una descripción de un conjunto muy *grande* de fenómenos y los límites existentes entre éste y otros conjuntos de fenómenos, se funden sin conflicto en las teorías utilizadas para la descripción de otros grupos de fenómenos.

Como en todos los campos científicos, el desarrollo teórico de la física nuclear se lleva a cabo en dos niveles. En uno de ellos se desarrollan *modelos* que correlacionan resultados experimentales y proporcionan descripciones simples de los fenómenos incluidos. A continuación, se trata constantemente de ampliar la gama de aplicabilidad de cada modelo, para eliminar cualquier conflicto aparente entre los diversos modelos y, finalmente, fundir esos modelos en un modelo unificado simple. En otro nivel, se intenta desarrollar *teorías* que expliquen las propiedades de los modelos a partir de las leyes fundamentales de la naturaleza. Como ejemplo, una teoría del núcleo sería capaz de explicar los valores numéricos de los parámetros utilizados en la fórmula semiempírica de la masa, de acuerdo con las leyes de fuerza entre nucleones.

www.FreeLibros.me

El desarrollo paralelo de modelos y teorías no fue muy evidente en nuestro análisis de la física atómica, porque se trata de un campo en el que, en la actualidad, existen teorías aceptables. En esta etapa, los modelos pierden gran parte de su importancia y, por consiguiente, sólo se utilizan en una exposición si tienen un interés histórico particular, valor pedagógico o si constituyen instrumentos útiles de cálculo. Un buen ejemplo es la descripción de Bohr de la estructura atómica, un modelo que se discutió en forma detallada, precisamente por esas tres razones.

En secciones ulteriores describiremos algunos de los intentos que se han hecho para desarrollar teorías del núcleo y las fuerzas nucleares. En esta sección, vamos a describir un ejemplo de uno de los intentos para reunir dos modelos aparentemente contradictorios y constituir un modelo unificado, que recibe el nombre de *modelo colectivo* de A. Bohr y Mottelson (1953), y ha resultado muy eficiente para combinar ciertas características del modelo de capas y el de la gota de líquido. El modelo supone que los nucleones, en un núcleo, se mueven independientemente en un potencial real. No obstante, el potencial no es el estático y esféricamente simétrico $V(r)$ que se utilizó en el modelo de capas; en lugar de ello, se trata de un potencial capaz de sufrir deformaciones. Estas representan el movimiento colectivo de los nucleones en el núcleo: el tipo de movimiento asociado con una gota de líquido. Como en el modelo de capas, los nucleones llenan los niveles de energía del potencial, que se separan por medio la misma interacción spin-órbita y forman una *coraza* que contiene un número par de protones y un número impar de neutrones, más (para los núcleos de A impar) un nucleón impar simple. Como en el modelo de capas el nucleón impar desempeña un papel importante en la determinación de las propiedades de todo el núcleo. Sin embargo, en el modelo colectivo, el nucleón impar no es enteramente responsable de esas propiedades, debido a que la coraza no es inerte y puede tener un impulso angular, etc. La forma instantánea de la coraza se describe mediante la forma instantánea del potencial. Su separación de la simetría esférica afecta al movimiento del nucleón impar y, a su vez, el movimiento de éste afecta a la forma de la coraza. El último acoplamiento se debe a lo que puede describirse como reacción centrífuga, ejercida por el nucleón impar sobre las paredes del potencial. El efecto neto es que una "ola de marea" circula en torno a la superficie de la coraza, siguiendo el movimiento del nucleón impar. Como puede suponer el lector, los cálculos basados en este modelo son muy complejos, por lo tanto, nos limitaremos a describir los resultados.

Se ha descubierto que el modelo colectivo preserva todas las características del modelo de capas que concuerdan con el experimento y, asimismo, proporciona nuevas características, que permiten que esta concordancia se amplíe considerablemente. Por ejemplo, en este modelo, parte del impulso angular total del núcleo resulta del impulso angular orbital de la onda de marea que circula en torno a la superficie de la coraza. Esta deformación constituye una corriente y provoca un momento magnético proporcional al impulso angular orbital asociado. Sin embargo, la constante de proporcionalidad es menor que la expresión habitual (11–7 con el signo cambiado y la masa electrónica reemplazada por la protónica) por un factor Z/A, que es la razón del número de nucleones cargados al número total de nucleones. Por consiguiente, esta

www.FreeLibros.me

parte del impulso angular de spin llevado por la coraza, no contribuye con el mismo momento magnético que podría aportar en otra forma, y el cambio es exactamente el que se requiere para explicar la discrepancia entre las líneas de Schmidt y los momentos magnéticos nucleares medidos.

Otra característica que puede explicarse con facilidad en términos del modelo colectivo es el momento cuadripolar eléctrico nuclear Q. En ocasiones anteriores hemos dado una definición cualitativa de esta cantidad (vea la sección 1). Cuantitativamente, el momento cuadripolar eléctrico en torno al eje z se define mediante la ecuación*

$$Q = \int \rho(x, y, z)[3z^2 - (x^2 + y^2 + z^2)]\, d\tau = Z[3\overline{z^2} - (\overline{x^2} + \overline{y^2} + \overline{z^2})] \tag{16–38}$$

en donde $\rho(x, y, z)$ es la densidad de carga nuclear en unidades de cargas protónicas, y donde la integral se toma sobre el volumen nuclear. El valor de Q es Z, el número de protones en el núcleo, por el promedio pesado con respecto a su distribución de carga de la cantidad $[3z^2 - (x^2 + y^2 + z^2)]$. Así resulta evidente que $Q = 0$ si $\rho(x, y, z)$ es esféricamente simétrico, puesto que, en este caso, $\overline{x^2} = \overline{y^2} = \overline{z^2}$. Si $\rho(x, y, z)$ no es esféricamente simétrico, debe tener, por lo menos, un eje de simetría a lo largo de la dirección en torno a la que se efectúa la precesión del vector de impulso angular de spin nuclear. En la expresión (16–38), esto se toma como el eje z, y la ecuación demuestra inmediatamente que $Q > 0$, si $\rho(x, y, z)$ se alarga en la dirección z, de tal modo que $\overline{z^2} > \overline{x^2} = \overline{y^2}$, y que $Q < 0$ si $\rho(x, y, z)$ se aplasta en la dirección z, de tal modo que $\overline{z^2} < \overline{x^2} = \overline{y^2}$. La figura 16–24 muestra un diagrama de todos los valores conocidos actualmente de Q para núcleos estables de A impar, medidos en circunstancias en las que Q se hace máximo, debido a que el vector de impulso angular de spin nuclear tiene su componente máximo posible a lo largo del eje $z(m_i = i)$. La abscisa es Z, para núcleos de Z impar y N par, y los valores de Q para estos núcleos se indican con cruces; la abscisa es N para núcleos de Z par y N impar, y los valores de Q para estos núcleos se indican por medio de puntos. La ordenada es la razón de Q al cuadrado del radio de la distribución de carga nuclear.

Algunas de las características de este diagrama están de acuerdo cualitativamente con lo que pudiera esperarse a partir del modelo de capas. Por ejemplo, este modelo podría predecir $Q < 0$ para un núcleo de Z impar y N par, con Z igual a un número mágico más uno. La razón es que ese núcleo contiene sólo subcapas completamente llenas de protones, para las que la distribución de carga es esféricamente simétrica, más un protón que se desplaza en una "órbita" cerca del plano x-y, para el que $\overline{z^2} < \overline{x^2} = \overline{y^2}$. El modelo de capas puede predecir también $Q > 0$ para un núcleo de Z impar y N par, con Z igual a un número mágico menos uno, puesto que el momento cuadripolar se debería enteramente a un hueco protónico que se moviera en una órbita cercana al plano x-y. Así, el hecho de que Q pasa por cero, de valores positivos a negativos, cada vez que el número de protones impares pasa por un

* Vea también la nota al pie de la página 630.

www.FreeLibros.me

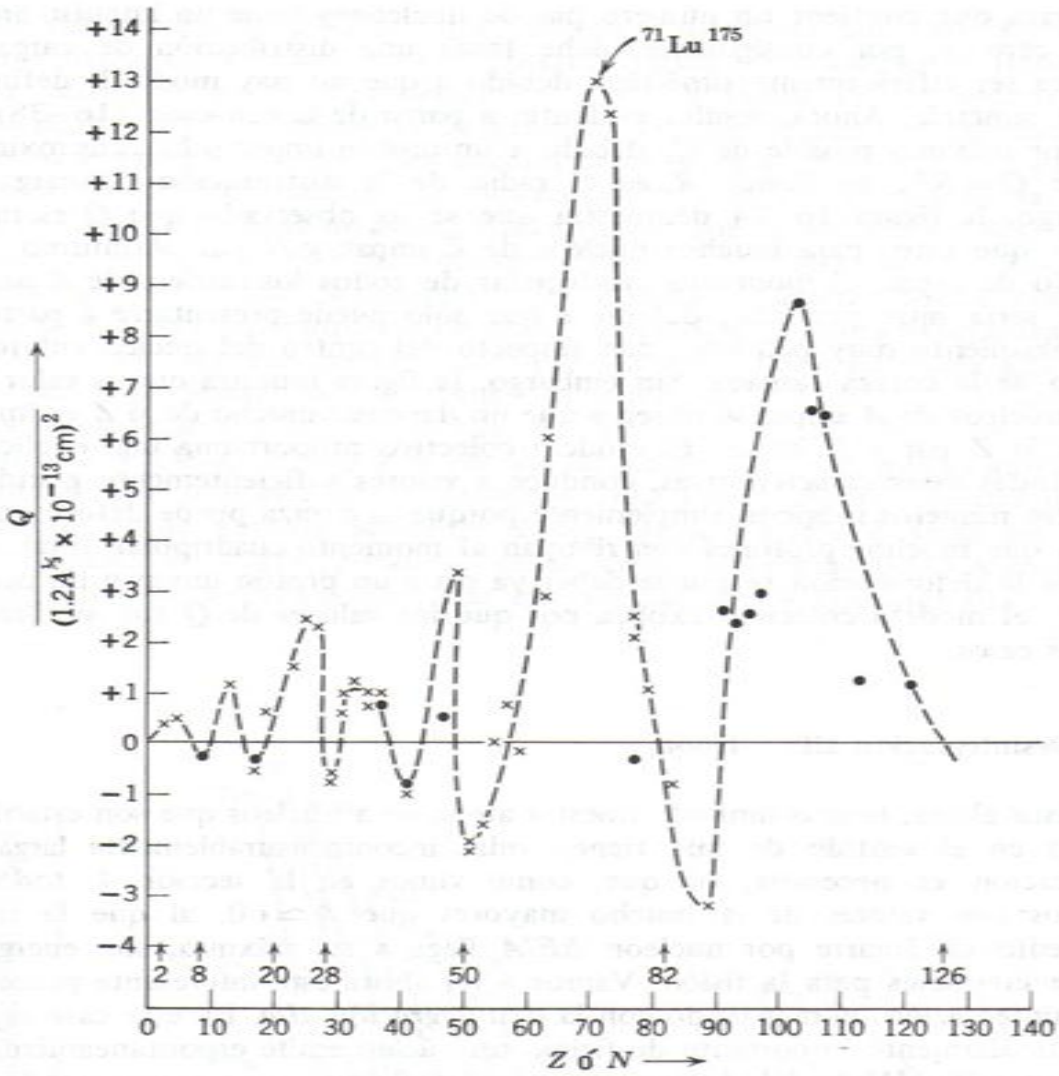

Figura 16-24. Momentos cuadripolares de núcleos estables de A impar.

número mágico y, asimismo, el hecho concomitante de que Q atraviesa cero en la dirección opuesta, en algún punto entre cada par de números protónicos mágicos, puede comprenderse sobre la base del modelo de capas.* Sin embargo, las magnitudes de Q no pueden comprenderse en términos de este modelo. De acuerdo con el modelo de capas, el momento cuadripolar de *cualquier* núcleo de Z impar y N par se debe enteramente al protón impar, puesto que

* Observe que Q no se comporta en esta forma a 20. Esta y otras pruebas recientes, se han interpretado en el sentido de que el 20 es un número algo menos mágico que los otros números mágicos. Observe también que a 40 (que corresponde a llenar el nivel $3p_{1/2}$) y a 14 ó 16 (que corresponde a llenar los niveles $3d_{5/2}$ ó $3s_{1/2}$), Q se comporta como lo hace en los números mágicos. Sin embargo, no se considera que 40, 14 ó 16 sean números mágicos, porque no se observa ninguno de los efectos usuales.

www.FreeLibros.me

la coraza que contiene un número par de nucleones tiene un impulso angular total cero y, por consiguiente, debe tener una distribución de carga que parezca ser esféricamente simétrica, debido a que no hay modo de definir un eje de simetría. Ahora, resulta evidente, a partir de la ecuación (16–38), que el valor máximo posible de Q, debido a un protón impar solo es aproximadamente $Q = R^2$, en donde R es el radio de la distribución de carga. Sin embargo, la figura 16–24 demuestra que se ha observado que Q es mucho mayor que esto, para muchos núcleos de Z impar y N par. Asimismo, en el modelo de capas, el momento cuadripolar de todos los núcleos de Z par y N impar sería muy pequeño, debido a que sólo puede presentarse a partir del desplazamiento muy pequeño, con respecto del centro del núcleo entero, del centro de la coraza cargada. Sin embargo, la figura muestra que el valor de Q para núcleos de A impar se observa que no depende mucho de si Z es impar y N par o Z par y N impar. El modelo colectivo proporciona una explicación para todas estas características; conduce a valores suficientemente grandes de Q entre números mágicos, simplemente porque la coraza puede deformarse, de modo que muchos protones contribuyan al momento cuadripolar total. Puesto que la deformación se puede deber ya sea a un protón impar o un neutrón impar, el modelo colectivo explica por qué los valores de Q son similares en ambos casos.

10. Desintegración alfa y fisión

Hasta ahora, hemos limitado nuestra atención a núcleos que son estables, al menos en el sentido de que tienen vidas inconmensurablemente largas. La calificación es necesaria, ya que, como vimos en la sección 4, todos los núcleos con valores de A mucho mayores que $A \simeq 60$, al que la energía promedio de amarre por nucleón $\Delta E/A$ llega a su máximo, son energéticamente inestables para la fisión. Vamos a ver ahora este interesante proceso de la desintegración, comenzando con la *desintegración alfa*. En este caso especial y particularmente importante de fisión, un núcleo emite espontáneamente una partícula alfa, ${}^2He^4$, debido a que su masa inicial $m_{Z,A}$ es mayor que la suma de su masa final $m_{Z-2,\ A-4}$ y la masa de la partícula $m_{2,4}$. La energía equivalente a la diferencia de masa aparece como energía cinética de la partícula alfa. Pasando por alto los equivalentes de masa de las energías de amarre electrónico, esta *energía de desintegración alfa* E puede escribirse, en términos de masas atómicas, como:*

$$E = [M_{Z,A} - (M_{Z-2,A-4} + M_{2,4})]c^2 \qquad (16\text{–}39)$$

Si se utiliza la fórmula semiempírica de masa para estimar las masas en esta ecuación, predice que E aumenta lentamente con A, alcanzando valores de 5 ó 6 Mev para los núcleos más pesados; sin embargo, esta predicción no es

* No se registra una emisión espontánea de ${}^0n^1$, ${}^1H^1$, ${}^1H^2$ ó ${}^2He^3$ de los núcleos que se producen naturalmente, debido a que los valores de E, calculados de ecuaciones similares a la (16–39), son negativos para todos estos procesos.

www.FreeLibros.me

suficientemente exacta para ser útil, debido a que pasa por alto efectos de números mágicos, que son muy importantes para los núcleos que tienen un interés particular en la desintegración alfa. La figura 16–25 muestra los valores de E para los núcleos en la gama de los que decaen con emisión alfa, obtenidos a partir de mediciones directas de la energía cinética de la partícula alfa, con técnicas de análisis de alcance o impulso y/o el uso de la ecuación (16–39) con masas medidas. Podemos ver que la energía de desintegración alfa E se eleva a un pico, aproximadamente de 4 Mev, por encima de la tendencia general, y que esta última se incrementa lentamente con A, como lo predice la fórmula semiempírica de masa. El pico se presenta exactamente en $^{84}Po^{212}$, y es fácil comprender por qué. Al emitir una partícula alfa, este núcleo *padre* se desintegra para formar un núcleo *hijo* $^{82}Pb^{208}$, que tiene los valores mágicos de $Z = 82$ y $N = 126$. El incremento en la energía de desintegración alfa se eleva, debido a la energía de amarre del hijo, que es aproximadamente 4 Mev más alta que el promedio. (La figura 16–18 muestra que el incremento es de aproximadamente 2 Mev, debido a que Z tiene un valor mágico y cerca de 2 Mev, porque N es un valor también mágico.) A partir de la figura 16–25, vemos también que las energías de los emisores alfa conoci-

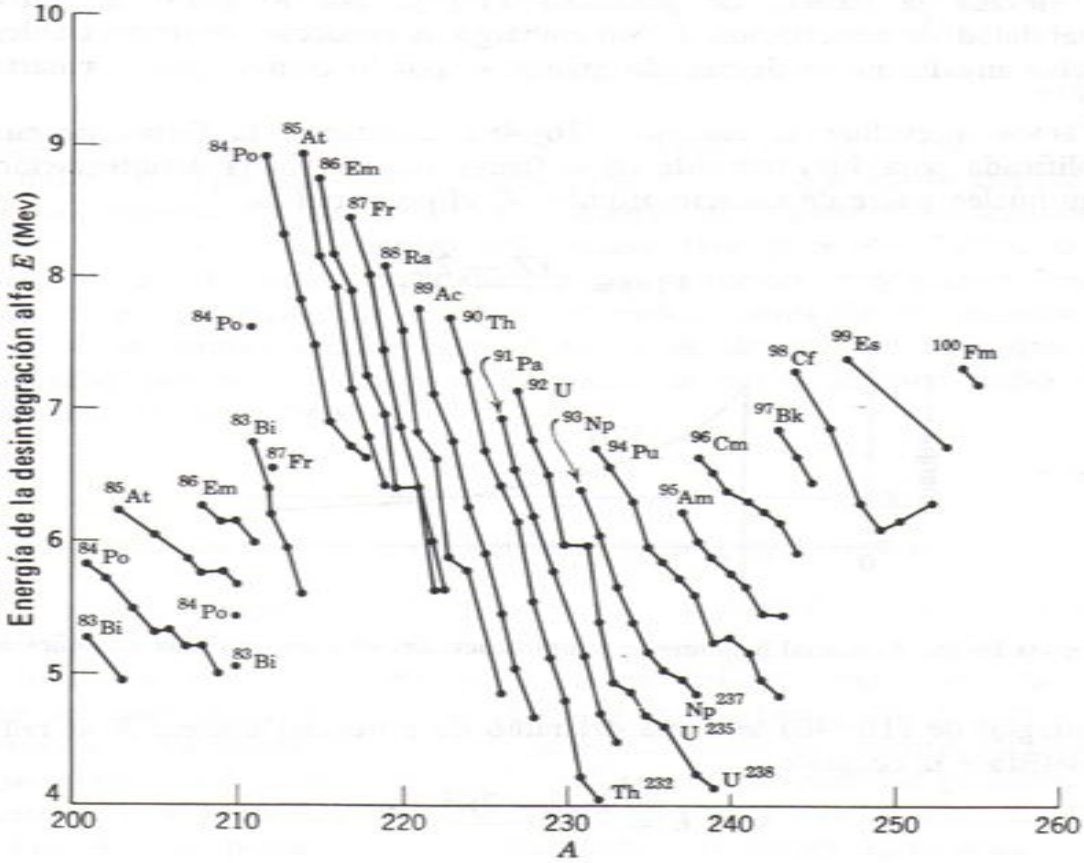

Figura 16-25. Energía de la desintegración alfa para los núcleos en la gama de núcleos que decaen con emisión alfa. Tomado de I. Perlman, A. Ghiorso y G. T. Seaborg, *Phys. Rev.*, 77, 26 (1950).

www.FreeLibros.me

dos van de 8.9 Mev para $^{84}Po^{212}$ a 4.1 Mev para $^{90}Th^{232}$ Luego entonces, observe que todas estas energías están muy por debajo de la energía máxima de la barrera de Coulomb que actúa sobre la partícula alfa, que es de, aproximadamente, 30 Mev. Por lo tanto, la partícula alfa puede escapar del núcleo sólo mediante el proceso de penetración de barrera, analizado en la sección 3 del capítulo 8.

En la ecuación (8–58) de esa sección, obtuvimos la expresión:

$$T = e^{-2\int\sqrt{(2M/\hbar^2)[V(r)-E]}\,dr} \tag{16–40}$$

para la probabilidad de que una partícula alfa de masa M penetre la barrera de potencial $V(r)$, si su energía cinética lejos del núcleo es E. En realidad, esta ecuación sólo es válida en el caso de la emisión de partículas alfa de impulso angular orbital cero, debido a que sólo para este caso es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (15–76), en la coordenada radial r, la misma que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, en la coordenada rectangular x, que se utilizó para derivar la (16–40). Para la emisión de partículas alfa de impulso angular orbital diferente de cero, el coeficiente de u en la ecuación (15–76) es más negativo; esto tiene el mismo efecto que hacer más elevada la barrera de potencial $V(r)$ y, por lo tanto, se reduce la probabilidad de penetración T. Sin embargo, la reducción es despreciable, si el impulso angular no es demasiado grande y, por lo común, puede pasarse por alto.

Vamos a evaluar la ecuación (16–40), utilizando la forma ligeramente simplificada para $V(r)$ indicada en la figura 16–26. En la desintegración alfa de un núcleo padre de número atómico Z, el potencial es:

$$V(r) = \frac{2(Z-2)e^2}{r}$$

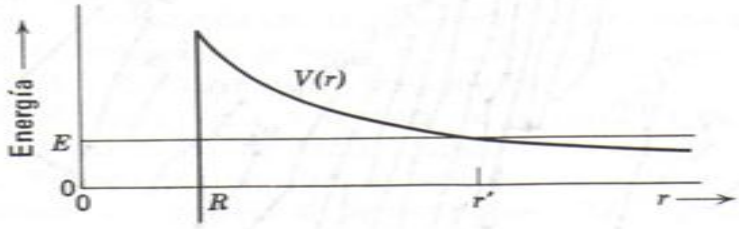

Figura 16-26. Potencial ligeramente simplificado del sistema partícula alfa-núcleo.

La integral de (16–40) se toma del radio de potencial nuclear R al radio r', que satisface la ecuación

$$E = \frac{2(Z-2)e^2}{r'}$$

Así,

$$T = e^{-\frac{2\sqrt{2M}}{\hbar}\int_R^{r'}\sqrt{\frac{2(Z-2)e^2}{r}-E}\,dr}$$

www.FreeLibros.me

Cambiando a la variable ρ definida por

$$\cos^2 \rho = \frac{E}{2(Z-2)e^2} r = \frac{r}{r'}$$

el integrando se convirte en $\operatorname{sen}^2 \rho$ y la integral da, inmediatamente:

$$T = e^{-\frac{2\sqrt{2ME}}{\hbar} r' \left[\cos^{-1}\left(\frac{R}{r'}\right) - \left(\frac{R}{r'}\right)\left(1-\frac{R}{r'}\right)^{1/2}\right]}$$

Puesto que R/r' es bastante pequeña en comparación a 1, los términos entre corchetes o paréntesis rectangulares pueden desarrollarse. El resultado es:

$$T \simeq e^{-\frac{2\sqrt{2ME}}{\hbar} r' \left[\frac{\pi}{2} - 2\left(\frac{R}{r'}\right)^{1/2}\right]}$$

Al evaluar r', esto se convierte en

$$T \simeq e^{\left[\frac{8M^{1/2}e}{\hbar}(Z-2)^{1/2}R^{1/2} - \frac{2\pi(2M)^{1/2}e^2}{\hbar}(Z-2)E^{-1/2}\right]}$$

que da

$$T \simeq e^{2.97(Z-2)^{1/2}R^{1/2} - 3.95(Z-2)E^{-1/2}} \tag{16–41}$$

cuando E se da en unidades de Mev y R en unidades de 10^{-13} cm.

Como en la expresión (8–59), supondremos, ahora, que existe una partícula alfa con energía E, que efectúa $v/2R$ intentos en la barrera por segundo, en donde v es su velocidad dentro del núcleo. Hay poca cosa sobre la que podamos basar esta suposición, debido a que se conoce muy poco respecto a lo que hace una partícula alfa en un núcleo, antes de ser emitida. Sin embargo, nos permite escribir para el *índice de desintegración* λ, que es la probabilidad por segundo de que el núcleo se desintegre por medio de la emisión alfa, la expresión simple

$$\lambda = \frac{v}{2R} T \tag{16–42}$$

Substituyendo T de la (16–41), y tomando logaritmos, tenemos

$$\ln \lambda \simeq \ln \frac{v}{2R} + 2.97(Z-2)^{1/2}R^{1/2} - 3.95(Z-2)E^{-1/2} \tag{16–43}$$

Esto hace que resulte evidente que λ es, en realidad, insensible a la forma exacta del coeficiente de T en la (16–42). En la figura 16–27, los puntos muestran que los valores medidos de $\ln \lambda$ para todos los emisores alfa naturales que existen, y la curva muestra los valores de esta cantidad predicha en la ecuación (16–43), utilizando $R = 8 \times 10^{-13}$ cm y $Mv^2/2 = E$. La ecuación (16–43) se puede trazar gráficamente, en forma aproximada, como función de $(Z-2)E^{-1/2}$ únicamente, debido a que, esencialmente, no hay cambio en $\ln(v/2R)$ y muy poco cambio en $2.97(Z-2)^{1/2}R^{1/2}$, sobre la gama restringida de núcleos involucrados. El único cambio procede de

www.FreeLibros.me

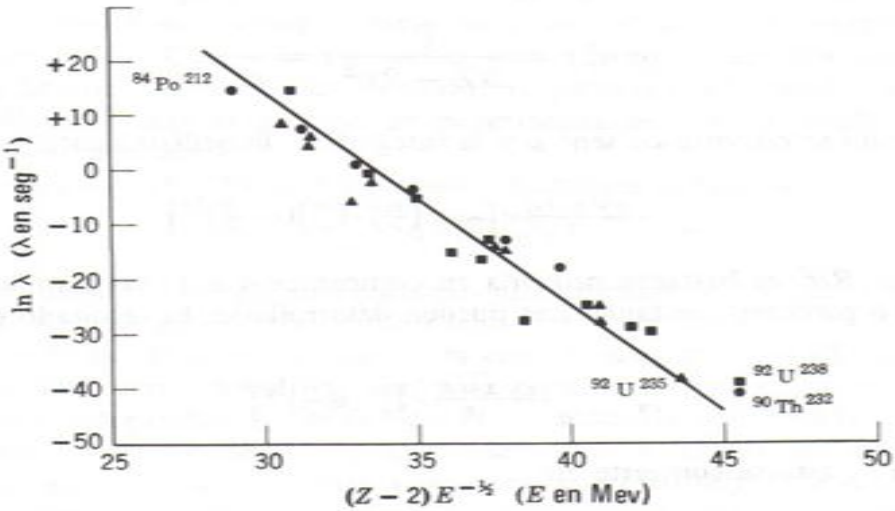

Figura 16-27. Relación entre la rapidez de desintegración alfa y las energías de desintegración alfa. Series ● $= 4n$; ■ $= 4n + 2$; ▲ $= 4n + 3$. Tomado de R. B. Leighton, *Principles of Modern Physics*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1959.

$-3.95(Z - 2)E^{-1/2}$, que varía, debido a que E lo hace a partir de aproximadamente 4 hasta cerca de 9. Podemos ver que esto conduce a una variación de, aproximadamente, 55 en $\ln \lambda$, correspondiente a una variación en λ de aproximadamente un factor de $e^{55} \simeq 10^{25}$. La correlación entre la variación extremadamente rápida de λ, y la lenta de E fue observada primeramente por Geiger y Nuttall (1911), a partir de la compilación de los datos experimentales. Desarrollaron una fórmula empírica, para dar las características esenciales de la dependencia de la energía de la ecuación teórica (16–43), que se debe a Gamow, Condon y Gurney (1928).

Tomemos ahora en consideración un sistema que contiene $N(0)$ núcleos inestables de la misma especie en el tiempo $t = 0$. Si la probabilidad por segundo de que cualquiera de los núcleos se desintegre es el índice de desintegración λ, el número de núcleos que quedan en el tiempo t es

$$N(t) = N(0)e^{-\lambda t} \tag{16–44}$$

y la *vida media* τ, o tiempo promedio requerido para que uno de los núcleos se desintegre, es:

$$\tau = 1/\lambda \tag{16–45}$$

Estas relaciones son (13–116) y (13–117), que se obtuvieron a partir de la desintegración de un sistema de átomos excitados, mediante la emisión de cuantos; pero una revisión de su obtención demostrará que se aplican igualmente bien a cualquier sistema en el que puede definirse una probabilidad constante por segundo de desintegración,

www.FreeLibros.me

En un sistema más típico, hay varias especies nucleares diferentes, que se desintegran sucesivamente, unas en otras. Por ejemplo, $^{92}U^{234}$ se desintegra mediante la emisión alfa en $^{90}Th^{230}$; este núcleo se desintegra mediante la emisión alfa en $^{88}Ra^{226}$; este núcleo, a su vez, se desintegra mediante la emisión alfa en $^{86}Em^{222}$; y este núcleo, por emisión alfa, se desintegra en el $^{84}Po^{218}$. Por consiguiente, un sistema lleno inicialmente con $^{92}U^{234}$, contendrá eventualmente una mezcla de todos esos núcleos. La desintegración de esa *serie radiactiva* se indica esquemáticamente en la figura 16–28. El símbolo $N_0(t)$ es el número de núcleos *padres* en el sistema en el tiempo t, y el símbolo λ_0 es la probabilidad por segundo de que se produzca la desintegración de esos núcleos. Se utilizan símbolos similares para los números y los índices de desintegración del *primer hijo*, el *segundo hijo*, etc. En este sistema, la relación (16–44) sólo es válida para el padre. Sin embargo, pueden obtenerse relaciones análogas para los hijos a partir del siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \frac{dN_0(t)}{dt} &= -N_0(t)\lambda_0 \\ \frac{dN_1(t)}{dt} &= N_0(t)\lambda_0 - N_1(t)\lambda_1 \\ \frac{dN_2(t)}{dt} &= N_1(t)\lambda_1 - N_2(t)\lambda_2 \\ &\vdots \end{aligned} \tag{16–46}$$

Figura 16-28. Ilustración de la desintegración de una serie radioactiva.

El término negativo a la derecha de cada ecuación representa la pérdida de núcleos por segundo, debida a la desintegración en los siguientes núcleos de la serie; el término positivo representa la ganancia de núcleos por segundo, debida a la desintegración de los núcleos anteriores de la serie. Existen numerosas soluciones interesantes para este conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas, dependiendo de las condiciones iniciales y las constantes λ.

Una solución de importancia particular es, para el caso en que λ_0 es muy pequeña en comparación con todas las demás λ. En ese caso, el padre de la serie se desintegra mucho más lentamente que todos sus hijos y, después de un tiempo suficiente, se alcanza una condición de *equilibrio*. En equilibrio, todos los $N(t)$ son constantes, de modo que los primeros miembros de todas las ecuaciones (16–46) tienden a cero. (Esto puede ser exactamente cierto para todas las ecuaciones, excepto la primera; para ésta sólo puede ser, evidente-

www.FreeLibros.me

mente, una aproximación. Sin embargo, es una aproximación muy buena, si λ_0 es muy pequeña, como se supuso.) Al aplicar esta condición, tendremos:

$$0 = N_0(t)\lambda_0 - N_1(t)\lambda_1$$
$$0 = N_1(t)\lambda_1 - N_2(t)\lambda_2$$
$$\vdots$$

que da

$$N_0(t)\lambda_0 = N_1(t)\lambda_1 = N_2(t)\lambda_2 = \cdots \qquad (16\text{–}47)$$

El equilibrio se obtiene después de un tiempo tal que $\lambda t \gg 1$ para todos los valores de λt excepto $\lambda_0 t$, independientemente de las condiciones iniciales. Este caso es importante, debido a la dependencia de E, de A, y por lo tanto de λ, es por lo común tal que satisface el requisito de que λ_0 sea muy pequeño en comparación a todas las demás λ (vea la parte de la figura 16–25 entre $A = 240$ y $A = 210$). Observe que la relación (16–47) muestra que, en equilibrio, el número de núcleos de una especie particular es inversamente proporcional al índice de desintegración de esa especie. Esta relación se utiliza con frecuencia, para determinar los valores de λ a partir de medidas de $N(t)$ y una λ conocida.

Ahora, estamos en condiciones de comprender cómo pueden encontrarse en la naturaleza núcleos emisores alfa de vidas medias muy cortas. Por ejemplo, ${}^{84}\mathrm{Po}^{212}$, cuyo tiempo de vida es de, aproximadamente, 10^{-6} seg, puede extraerse de ciertos minerales que existen en la naturaleza y que, probablemente, han existido durante millones de años. Por supuesto, la razón es simplemente que los emisores alfa de vida corta son miembros de series radioactivas con padres de vida media muy larga y están en equilibrio en esas series. Hay tres de esas series que existen naturalmente: la *serie* $4n$, cuyo padre es ${}^{90}\mathrm{Th}^{232}$, con una vida media $\tau = 2.01 \times 10^{10}$ años, la *serie* $4n + 2$, cuyo padre es ${}^{92}\mathrm{U}^{238}$, con una vida media de $\tau = 6.52 \times 10^9$ años y la *serie* $4n + 3$, cuyo padre es ${}^{92}\mathrm{U}^{235}$, con una vida media de $\tau = 1.02 \times 10^9$ años. Los nombres caracterizan los valores de A para los núcleos que son miembros de la serie. Por ejemplo, el padre de una serie $4n + 3$ tiene A igual a cuatro veces un entero más 3, en donde el entero es 58. Puesto que cada desintegración alfa reduce A por cuatro, todos los hijos de esta serie tendrán también valores A iguales a cuatro veces algún entero menor más 3.

Además de las series $4n$, $4n + 2$ y $4n + 3$, hay evidentemente también espacio para una serie $4n + 1$. En realidad, esa serie existe y su padre es ${}^{93}\mathrm{Np}^{237}$, con una vida media $\tau = 3.25 \times 10^6$ años. La serie puede producirse artificialmente, utilizando una reacción nuclear para crear el padre; pero no se encuentra en la naturaleza, puesto que la vida media del padre es muy corta en comparación a la edad de la Tierra (estimada a partir de ciertas evidencias geológicas y cosmológicas como del orden de 10^9 años) y, por consiguiente, cualesquiera núcleos padres inicialmente presentes se han desintegrado. A este respecto, observe que la figura 16–25 muestra que las energías de desintegración alfa de los padres de las tres series que existen naturalmente son particularmente bajas. Si fueran menos de 1 Mev mayores, esos padres tendrían también tiempos de vida cortos en comparación a la edad de la Tierra,

www.FreeLibros.me

todos los emisores alfa se hubieran desintegrado desde hace mucho tiempo y los elementos que ocurren naturalmente se detendrían en $Z = 82$, en lugar de $Z = 92$. La misma figura permite ver con claridad por qué los elementos que existen naturalmente se detienen en $Z = 92$; esto se debe a que las energías de desintegración alfa de todos los núcleos con $Z \geqslant 93$ son suficientemente grandes para conducir a tiempos de vida cortos en comparación a la edad de la Tierra. Finalmente, una extrapolación mental de la figura 16–25 a $Z \leqslant 82$, o un cálculo real de las energías de desintegración alfa a partir de las masas medidas, demuestra que los elementos correspondientes son aparentemente estables a la desintegración alfa, debido a que las energías de desintegración alfa son tan pequeñas que los tiempos de vida son inconmensurablemente largos. De manera estricta, varios núcleos con $Z \leqslant 82$ son inestables; pero sus tiempos de vida son tan largos que la desintegración no puede observarse.

La desintegración alfa se produce, esencialmente, debido a que la energía de repulsión de Coulomb total del protón en el núcleo se reduce mediante la emisión de un fragmento que contiene dos de esos protones (la partícula alfa); pero una disminución todavía mayor en la energía se obtiene mediante la emisión de un fragmento que contiene una fracción mayor de los protones. Si el núcleo se divide en dos partes, la energía total de repulsión de Coulomb del sistema se reduce obviamente al mínimo cuando las partes contienen números iguales de protones. El cálculo realizado en la sección 4 demuestra que, cuando un núcleo de valor Z grande sufre ese proceso de *fisión*, la disminución en el equivalente de energía de la masa total del sistema es de, aproximadamente, 200 Mev. Esto se debe, casi enteramente, a la reducción en la energía total de repulsión de Coulomb del sistema. La mayor parte de esta energía se la llevan los dos fragmentos de fisión, como energía cinética.

Las etapas involucradas en un proceso de fisión se indican esquemáticamente mediante el conjunto de dibujos de la figura 16–29. Estos dibujos definen (de manera bastante imprecisa) un parámetro s que caracteriza el avance del proceso. Es conveniente usar este parámetro y, en particular, trazar

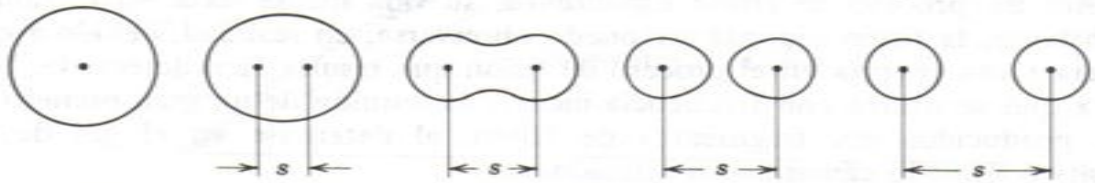

Figura 16-29. Representación esquemática de los pasos involucrados en un proceso de fisión.

gráficamente la parte de la energía del sistema que depende de s. Esto se muestra en la figura 16–30, mediante la función $V(s)$. Comenzando con s pequeña, hay relativamente poco cambio en la energía de repulsión de Coulomb al incrementarse s; pero el área superficial del núcleo aumenta rápidamente. A partir del punto de vista, claramente adecuado, del modelo de la gota de líquido, el incremento del área superficial produce un aumento en la energía de tensión superficial. Así, $V(s)$ aumenta al hacerlo s, para s pequeño.

www.FreeLibros.me

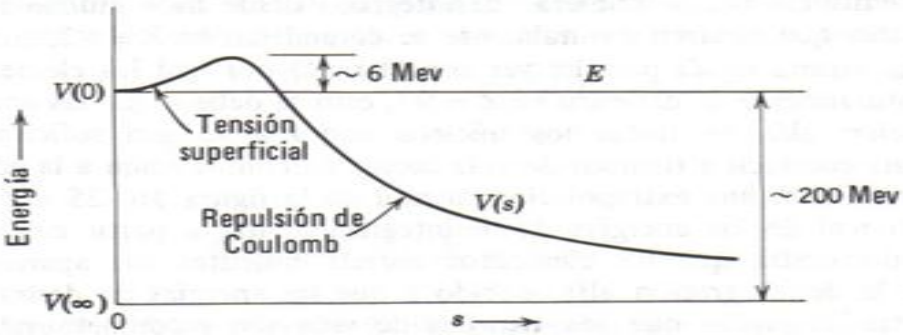

Figura 16-30. Diagrama de energía para un núcleo fisionable.

A medida que s sigue aumentando, el efecto de tensión superficial hace que el núcleo "se resquebraje" y, eventualmente, se divida. Después de esa división, la energía de tensión superficial no cambia ya con s y $V(s)$ disminuye al incrementarse s, siguiendo la reducción de la energía de repulsión de Coulomb de los dos fragmentos. Puesto que $V(s)$ aumenta al principio y disminuye después, debe pasar necesariamente por un punto máximo. Los cálculos basados en el modelo de la gota de líquido muestran que para un núcleo típico de valor Z grande, este punto máximo es de aproximadamente 6 Mev por encima de $V(0)$. Sabemos ya que $V(0)$ es de aproximadamente 200 Mev por encima de $V(\infty)$.

La figura 16–30 muestra que los núcleos son normalmente estables a la desintegración por fisión, puesto que se encuentran, con una energía total $E = V(0)$, al fondo de la depresión en el potencial $V(s)$. El proceso puede tener lugar mediante penetración de barrera; pero, debido a que la masa M que entra en el exponente de la expresión (16–40) para la penetrabilidad de la barrera es muy grande, la probabilidad de penetración de la barrera es *extremadamente* pequeña. Por ejemplo, si $^{92}U^{238}$ se desintegrara solamente mediante un proceso de *fisión espontánea*, su vida media sería $\sim 10^{16}$ años. No obstante, la fisión espontánea puede observarse, en realidad, debido a que se libera tanta energía en el proceso de fisión que resulta fácil detectarla. Una técnica que se utiliza con frecuencia incluye la reunión de un gran número de iones, producidos por fragmentos de fisión, al detenerse en el gas de un dispositivo llamado cámara de ionización.

Otro proceso mucho más importante es la *fisión inducida*. Por lo común, se produce mediante la captura por el núcleo de un neutrón de baja energía. Como la energía de enlace E_b del último neutrón en el núcleo de valor Z grande, es de aproximadamente 5 ó 6 Mev, en casos favorables, el núcleo que efectúa la captura recibe suficiente energía para sobrepasar el tope de la barrera de fisión. Muy frecuentemente, esta energía se convierte, en realidad, en vibraciones del tipo que conduce a la fisión. La fisión inducida es quizás el mejor ejemplo de los movimientos colectivos implícitos en el modelo de la gota de líquido. El proceso se ilustra, en términos de un diagrama de energía, en la figura 16–31. Para $^{92}U^{233}$ y $^{92}U^{235}$, la energía de enlace E_b es suficiente para hacer que la energía total E sea superior al tope de la barrera.

www.FreeLibros.me

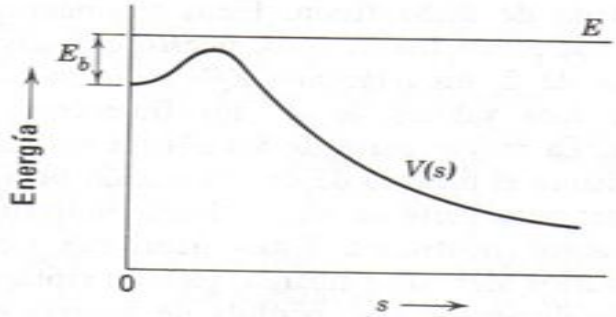

Figura 16-31. Diagrama de energía en el que se ilustra la fisión inducida.

Para $^{92}U^{238}$ no es suficiente, y el neutrón debe llevar también aproximadamente 1 Mev de energía cinética. La diferencia entre los dos casos refleja el hecho de que E_b para los núcleos formados cuando $^{92}U^{233}$ y $^{92}U^{235}$ capturan un neutrón, es aproximadamente 1 Mev mayor que E_b para el núcleo formado cuando $^{92}U^{238}$ captura un neutrón. La razón es que la energía de apareamiento (16–32) es negativa en el primer caso y cero en el segundo. La fisión puede inducirse también mediante la captura de un rayo gamma de energía suficiente o por la captura de un protón de alta energía (un protón de baja energía no sería capturado, debido a que lo rechaza el núcleo por la barrera coulombiana de aproximadamente 15 Mev de altura).

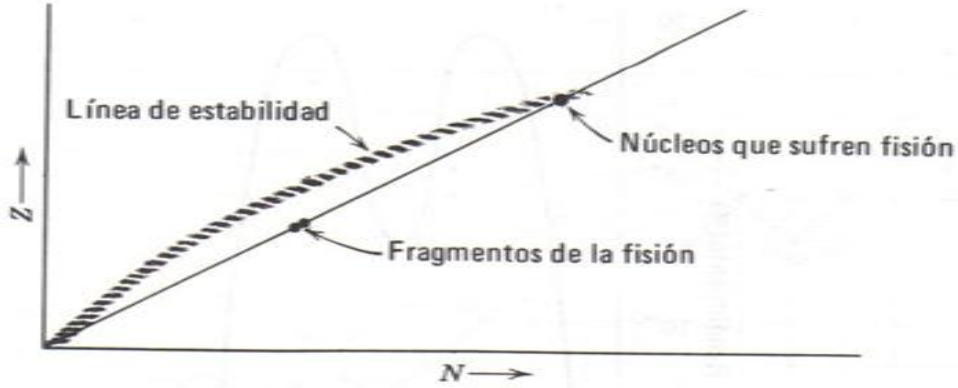

Figura 16-32. Ilustración de por qué se produce una emisión de neutrones en la fisión.

La posibilidad de utilizar la fisión para producir energía en una *reacción en cadena* surge en la circunstancia de que se emiten dos o tres neutrones, en promedio, en cada proceso de fisión. Esto puede comprenderse, examinando la figura 16–32, en la que se trazan los valores Z y N de los núcleos, que son más estables, para cada valor de A, como en la figura 16–17. Estos núcleos se representan mediante la *línea de estabilidad* sombreada. El punto grande indica el núcleo en fisión. Los dos puntos pequeños indican los dos fragmen-

www.FreeLibros.me

tos que son el resultado de dicha fisión. Estos fragmentos tienen la misma relación Z/N que el núcleo en fisión; pero, puesto que sus valores de A son menores por un factor de 2, sus relaciones Z/N serán menores que las de los núcleos estables con esos valores de A, los fragmentos de fisión tienen demasiados neutrones. La mayor parte de los ajustes necesarios en la relación Z/N tienen lugar mediante el proceso de desintegración beta, que analizaremos en la sección siguiente; pero parte de ella se logra, simplemente, mediante la emisión de unos cuantos neutrones. Estos neutrones tienen, típicamente, energías cinéticas de varios Mev; sin embargo, pierden rápidamente energía por procesos que incluyen dispersión con pérdida de energía en el material que contiene los núcleos en fisión y no pueden ya inducir la fisión en el $^{92}U^{238}$. Es por eso que este isótopo, por lo común, no resulta directamente útil en una reacción en cadena. Sin embargo, la disminución del número de neutrones emitidos en la fisión no es indeseable, puesto que, como su energía se hace tan baja que su longitud de onda de De Broglie es mayor que el radio de los núcleos ^{92}U, la sección transversal para la captura por esos núcleos se incrementa, al aumentar la longitud de onda o disminuir la energía.* Para una reacción en cadena, es importante capturar tantos neutrones como sea posible; la reacción se autosostiene sólo si al menos uno de los neutrones emitidos en cada fisión se recaptura posteriormente. En los *reactores*, se aprovecha la dependencia de la energía de la sección transversal de captura, mediante la dispersión de neutrones por algún material de bajo peso atómico, de tal modo que pierden energía, mediante el retroceso y, finalmente, entran en equilibrio térmico a la energía cinética muy baja $\frac{3}{2}kT \simeq 0.025$ ev. Esto no se hace en

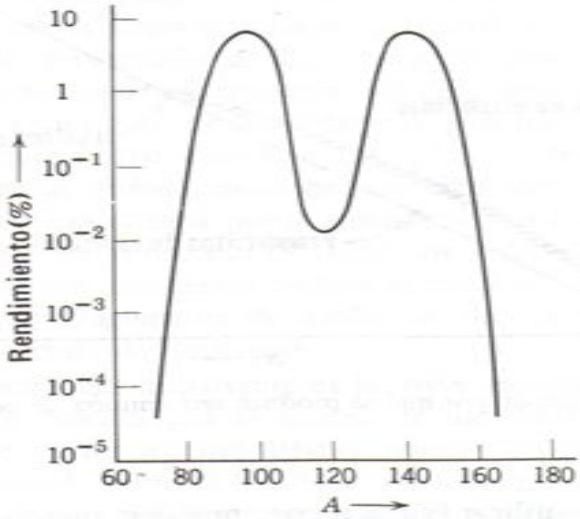

Figura 16-33. Distribución de las masas de fragmentos emitidos en fisión por neutrones térmicos.

* Esto debió quedar aclarado en la exposición del capítulo anterior.

www.FreeLibros.me

una *bomba*, porque se necesita demasiado tiempo ($\sim 10^{-6}$ seg). En los *reactores de cría* puede usarse cierta cantidad de $^{92}U^{238}$ indirectamente, para producir fisiones. Estos núcleos capturan neutrones, y en lugar de fisionarlos, los núcleos inestables resultantes, $^{92}U^{239}$ sufren dos desintegraciones beta sucesivas, convirtiéndose en los núcleos estables $^{94}Pu^{239}$, que tienen las mismas propiedades de fisión que $^{92}U^{233}$ y $^{92}U^{235}$.

Hemos simplificado nuestro estudio de la fisión, hablando como si el proceso condujera siempre a dos fragmentos iguales. En realidad, esto sucede con muy poca frecuencia. La figura 16–33 muestra la distribución en los valores A de los fragmentos a partir de la fisión de $^{92}U^{235}$ por neutrones de energía térmica. Esta distribución es típica. Puesto que se presenta un pico cerca de valores de A correspondientes a $N = 50$, mientras que otro tiene lugar cerca de valores de A que corresponden a $N = 82$, se supone que esas distribuciones bimodulares se deben a la influencia de los números mágicos. Sin embargo, no se comprenden bien los detalles relativos a su origen.

11. Desintegración beta

Hemos simplificado también nuestro estudio de la serie radioactiva, al pasar por alto los procesos de *desintegración beta*, que, en efecto, son una característica importante de esas series. Esto se ilustra mediante los procesos que tienen lugar en la serie $4n$, que se representan en la figura 16–34. Además de los procesos de desintegración alfa, hay procesos de desintegración beta, en los que un núcleo Z, A emite un electrón cargado negativamente y se transforma

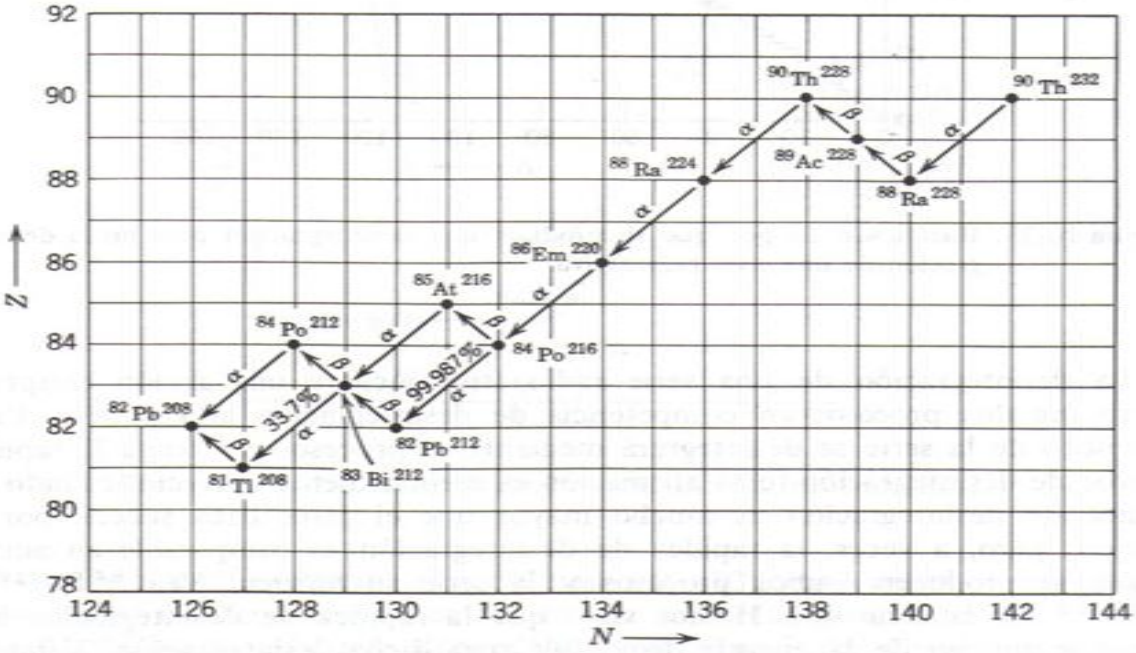

Figura 16-34. Procesos de desintegración que se producen en la serie $4n$.

www.FreeLibros.me

en el núcleo $Z + 1$, A. Así, en estos procesos, Z aumenta en 1, N disminuye en 1 y el núcleo se convierte en el núcleo siguiente que se encuentra sobre la recta de pendiente de 135° en el diagrama de Z en función de N (hay también otros tipos de procesos de desintegración beta que describiremos más adelante). En los procesos de desintegración alfa, Z disminuye en 2, N disminuye en 2 y el núcleo se convierte en el siguiente; pero en un núcleo que se encuentra en una recta de 45° de pendiente, en el diagrama de Z en función de N.

La razón por la que se producen estos procesos de desintegración beta en la serie $4n$, así como también en las otras series, puede comprenderse, superponiendo la figura 16–34 sobre un diagrama de valores Z y N de los núcleos más estables, para cada valor de A, como se muestra en la figura 16–35. Como la pendiente de la línea de estabilidad es apreciablemente menor que 45°, deben producirse desintegraciones beta, para que las pendientes promedio de la serie radioactiva sean esencialmente las mismas que la pendiente de la línea de estabilidad. La necesidad de que suceda esto refleja simplemente el requisito de que cada miembro de la serie radioactica sea "tan estable como sea posible".

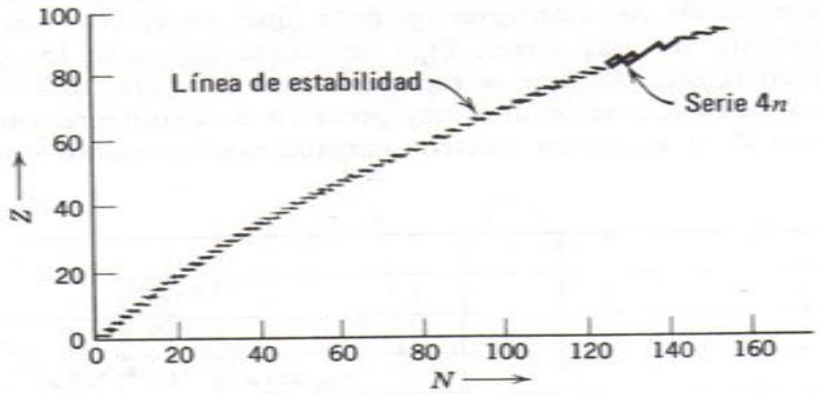

Figura 16-35. Ilustración de por qué se produce una desintegración beta en la desintegración de una serie radioactiva.

La desintegración de una serie radioactiva incluye una acción recíproca entre los dos procesos en competencia de desintegración alfa y beta. Cada miembro de la serie se desintegrará mediante el proceso que tenga la rapidez mayor de desintegración (esta afirmación es esencialmente correcta, cuando un índice de desintegración es mucho mayor que el otro. Esto sucede por lo común; pero, a veces, la rapidez de desintegración es comparable en ambos casos, se producen ambos procesos y la serie *se bifurca.* Vea $^{84}Po^{216}$ y $^{83}Bi^{212}$ en la serie $4n$). Hemos visto que la rapidez de desintegración alfa depende mucho de la energía disponible para dicha desintegración. Vamos a ver que esto es también cierto en el caso de la desintegración beta.

www.FreeLibros.me

Para analizar la energía disponible en la desintegración beta, es conveniente hacer un diagrama de $M_{Z,A}$, la masa de átomos de valores Z y A dados, en función de Z para valores fijos de A. Se muestran diagramas típicos en la figura 16–36 para valores impares de A, y en la 16–37 para los valores pares. Excepto cerca del valor mágico de N y/o Z, las masas se describen muy bien

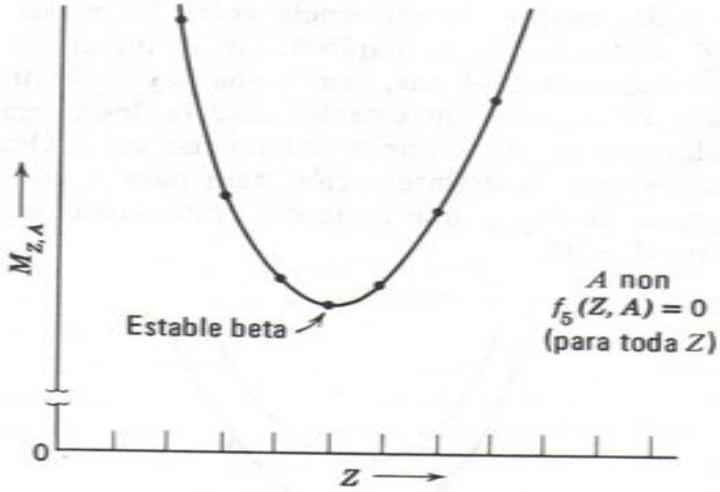

Figura 16-36. Las masas de los átomos con un valor impar dado de A.

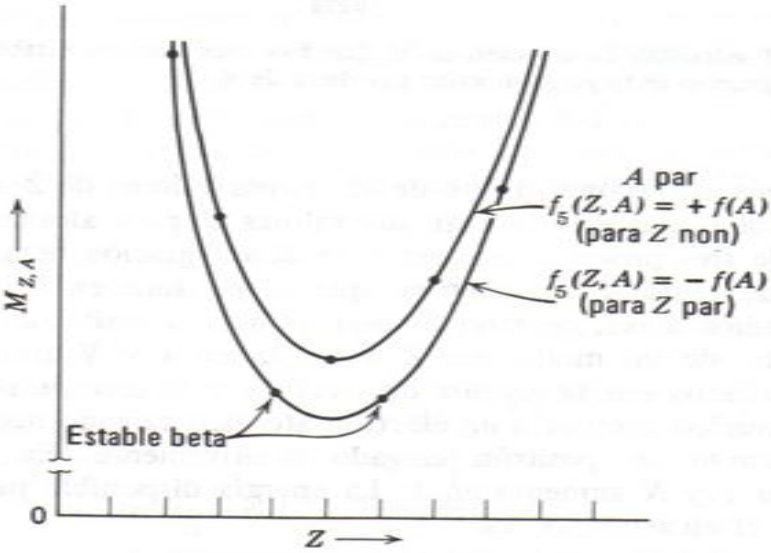

Figura 16-37. Las masas de átomos con un valor par dado de A.

mediante la fórmula semiempírica de masa (16–33). Para valores impares de A, los valores de $M_{Z,A}$ se encuentran en una parábola ligeramente oblicua. La forma parabólica se debe a la dependencia que tiene Z del término (16–31); la oblicuidad se debe a la dependencia que tiene Z de los términos (16–27) y

www.FreeLibros.me

(16–30). Para valores pares de A, hay dos parábolas correspondientes a los dos valores posibles del término (16–32). La parábola superior corresponde a Z impar y N impar; la parábola inferior corresponde a Z par y N par. A partir del diagrama para valores impares de A, vemos que para un valor impar dado de A, hay sólo un núcleo que es estable ante la desintegración beta, el núcleo del átomo de masa más pequeña (se encuentra muy raramente una excepción aparente a esta regla, cuando la diferencia entre las masas para dos valores adyacentes de Z al fondo de la parábola de A impar, es extremadamente pequeña). Para el diagrama de A par, vemos que hay generalmente dos núcleos con un valor dado de A, que son estables ante la desintegración beta y que, ambos tienen valores pares de Z que se diferencian en 2. Ocasionalmente, hay tres núcleos estables ante la desintegración beta para A par. La figura 16–38 muestra un diagrama de $M_{Z,A}$ que representa esta situación. Puede encontrarse un ejemplo para $A = 96$.

Figura 16-38. Ilustración de un caso en el que hay tres núcleos estables ante la desintegración beta para un valor par dado de A.

Los núcleos de valores dados de A, cuyos valores de Z son tales que no resultan estables, pueden cambiar sus valores Z para alcanzar la estabilidad, por medio de tres procesos diferentes de desintegración beta. Uno de ellos es el proceso de *emisión de electrón*, que se produce en la serie radioactiva. Como indicamos antes, en este proceso, el núcleo emite un electrón cargado negativamente, de tal modo que Z aumenta en 1 y N disminuye en 1. Los otros dos procesos son la *captura de electrón* y la *emisión de positrón*. En el primero, el núcleo captura a un electrón atómico cargado negativamente, y en el último, emite un positrón cargado positivamente. En ambos casos, Z disminuye en 1 y N aumenta en 1. La energía disponible para la emisión de electrón por el núcleo Z, A, es:

$$E = [M_{Z,A} - M_{Z+1,A}]c^2 \tag{16–48}$$

La energía disponible para la captura de electrón por ese núcleo es

$$E = [M_{Z,A} - M_{Z-1,A}]c^2 \tag{16–49}$$

La energía disponible para la emisión de un positrón por el núcleo es:

$$E = [M_{Z,A} - M_{Z-1,A} - 2m]c^2 \tag{16–50}$$

www.FreeLibros.me

en donde m es la masa en reposo del electrón. La energía E va de una fracción pequeña de 1 Mev a más de 10 Mev y, típicamente, es del orden de 1 Mev. Por supuesto, en todos estos procesos, la energía disponible se debe a las diferencias en las masas de los *núcleos* incluidos. Estas tres ecuaciones se escriben en términos de las masas de los *átomos*, tales como $M_{Z,A}$, simplemente debido a que es conveniente y convencional el hacerlo así. Un momento de reflexión le demostrará al lector que, aunque estas ecuaciones utilizan la aproximación habitual de pasar por alto los equivalentes de masa de las energías de enlace de los electrones atómicos, las energías de masa en reposo de todos los electrones involucrados en el proceso se toman adecuadamente en consideración. Observe que hay una gama en la que la diferencia en las masas entre dos átomos es de índole tal que la captura de electrón es posible; pero resulta energéticamente prohibida la emisión de positrón. Sin embargo, si $M_{Z,A}$ es mayor que $M_{Z-1,A}$ en más de $2m$, tanto la captura de un electrón como la emisión de un positrón pueden tener lugar. En estas circunstancias, la emisión de un positrón es, por lo común, el proceso más importante para los núcleos de valores pequeños de Z.
Para núcleos de valores intermedios y grandes de Z, las funciones de onda de los electrones atómicos son atraídas hacia el núcleo positivamente cargado y se repele la función de onda de un positrón. Esos dos efectos tienden a hacer que la captura de un electrón resulte relativamente más probable y, sobre todo, en el caso de un electrón de la capa K, la captura de un electrón predomina casi siempre.

Ahora vamos a ocuparnos de la interesante cuestión relativa a lo que le sucede a la energía disponible en los procesos de desintegración beta. Tomemos en consideración el más común de estos procesos, la emisión de un electrón. Un núcleo Z, A, que suponemos está estacionario en el estado inicial, emite un electrón y retrocede, como se indica en la figura 16–39. Puesto que hay precisamente dos partículas en el estado final, debe haber sólo una forma en la que la energía total disponible E pueda compartirse. De hecho, puesto

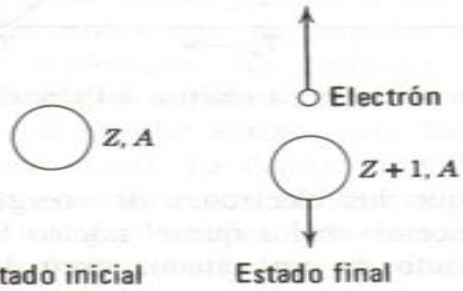

Figura 16-39. El proceso de desintegración beta, bajo la suposición de que hay dos partículas en el estado final.

que el núcleo es de gran masa, su velocidad de retroceso es muy baja, y lleva poca energía cinética. Así, el electrón debe llevar consigo esencialmente toda la energía E, en la forma de energía cinética. No obstante, las mediciones efectuadas en una etapa temprana del estudio de la radioactividad, utilizando

www.FreeLibros.me

imanes para el análisis del impulso y otras técnicas, demostraron que los electrones se emiten con un espectro de energías cinéticas T_e, como se indica en la figura 16–40.*

Durante numerosos años, el hecho de que se emiten electrones en el proceso de desintegración beta, con un espectro de energías, resultó muy misterioso y provocó muchas dificultades. Los electrones emitidos en el punto final $T_e^{máx}$ del espectro se llevan toda la energía E disponible porque $T_e^{máx}$ se observa que es igual a E, dentro de la precisión experimental. Sin embargo, los electrones más típicos se llevan mucha menos energía que la E que, como muestran las diferencias de masa, debe liberarse en el proceso, y pudiera parecer que parte de esta energía desaparece. Se han hecho numerosas sugerencias con el fin de resolver este dilema. Por ejemplo, se sugirió que los electrones emitidos del núcleo podrían perder energía mediante colisiones con los electrones átomicos, al salir del átomo. Si fuera ése el caso, y si los átomos que emiten electrones estuvieran encerrados en un sistema aislado, la energía perdida se degradaría, finalmente, en la forma de calor, como lo haría la energía que llevan realmente consigo los electrones emitidos, de tal modo que toda la energía E sería depositada finalmente, en el sistema; no obstante, los experimentos realizados por Ellis y Wooster (1927), utilizando un calorímetro con paredes de plomo muy gruesas, demostró que la energía depositada en el calorímetro por la emisión de un electrón, es igual a la energía promedio del espectro, que es menos de la mitad de E.

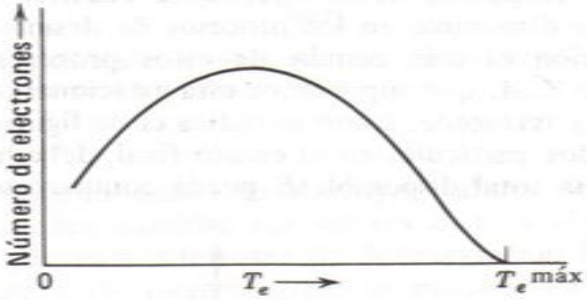

Figura 16-40. Espectro típico de energía cinética del electrón en la desintegración beta.

Otra sugestión fue que los electrones de energía cinética más baja que $T_e^{máx}$ se emiten en procesos en los que el núcleo final $Z + 1$, A queda con exceso de energía en uno de sus estados excitados, y que estos estados excitados están tan cerca entre sí que el espectro de electrones emitidos parece ser continuo. El núcleo excitado emitirá subsecuentemente esta energía en la forma de un rayo gamma. Sin embargo, esta teoría no podía sostenerse,

* En algunos casos, existen también algunos grupos de electrones monoenergéticos en los espectros medidos. Estos provienen de un proceso llamado conversión interna, que no tiene ninguna relación con la desintegración beta y que se explicará en la siguiente sección.

www.FreeLibros.me

debido a que hay numerosos casos en los que se emiten electrones con un espectro de energías, pero no rayos gamma; y, asimismo, porque otras evidencias demuestran que los estados excitados no están espaciados en forma tan cercana como lo que se requeriría. La situación era lo suficientemente grave como para que numerosos científicos comenzaran seriamente a tomar en consideración la posibilidad de abandonar la ley de la conservación de la energía, hasta que Pauli (1931), propuso una alternativa menos desagradable.

Pauli postuló que hay una partícula llamada neutrino que se emite junto con el electrón en cada proceso de emisión de electrón; pero que no se observa, debido a que:

1. Los neutrinos interactúan en forma extremadamente débil con la materia.

Esta propiedad permite a los neutrinos y la energía que llevan, atravesar las gruesas paredes de plomo del calorímetro de Ellis y Wooster. Pauli postuló también que:

2. Los neutrinos no están cargados.
3. Los neutrinos tienen un número cuántico de impulso angular de spin $s = \frac{1}{2}$.
4. Los neutrinos tienen una masa en reposo igual a cero.

Se requiere la segunda propiedad, con el fin de que la carga se conserve en el proceso de emisión del electrón. La tercera propiedad permite que el impulso angular total se conserve en este proceso. Tomemos en consideración un núcleo Z, A que emite un electrón para convertirse en el núcleo $Z + 1, A$ y, por ejemplo, supongamos que A es par. Entonces, los números cuánticos de impulso angular de spin i de los dos núcleos, el inicial y el final, serán enteros (vea el concepto 6 de la sección 1). Si sólo se emite el electrón con $s = \frac{1}{2}$, sería imposible que el impulso angular total final del sistema fuera igual al impulso angular total entero inicial, debido a que la suma de un impulso angular semientero (el electrón) más un impulso angular entero (el núcleo final), sólo podría ser semientero. Sin embargo, si se emite también un neutrino con $s = \frac{1}{2}$, habrá dos impulsos angulares semienteros que pueden combinarse con el impulso angular entero, para formar un impulso angular total entero igual al valor inicial. La cuarta propiedad de los neutrinos fue postulada por Pauli para concordar con la observación de que el punto final $T_e^{\text{máx}}$ del espectro de energía cinética del electrón es igual a la energía disponible E. Cuando se emite un electrón en el punto final, lleva toda la energía disponible y no queda ninguna para energía cinética o de masa en reposo del neutrino.

No obstante, en general, el electrón se emitirá con una energía cinética T_e menor que la energía disponible E, y el neutrino se emitirá con una energía cinética diferente de cero T_ν, de modo que

$$T_e + T_\nu = E = T_e^{\text{máx}} \tag{16–51}$$

De acuerdo con el postulado de Pauli, hay tres partículas en el estado final del proceso de emisión. El retroceso del núcleo de masa grande toma muy poca

www.FreeLibros.me

de la energía disponible y, por lo tanto, esencialmente toda ésta se divide entre el electrón y el neutrino. Puesto que hay un número infinito de modos en los que puede efectuarse esta división, resulta evidente que el postulado permite la distribución de energías cinéticas del electrón T_e, para formar un espectro continuo.

El postulado constituye también la base de la teoría de la forma de este espectro. En su forma más elemental, debida a Fermi (1934), la teoría es muy simple. Tomemos en consideración un proceso en el que un sistema efectúa una transición de un estado inicial, consistente en el núcleo Z, A, a un estado final, consistente en el núcleo $Z+1$, A, más un electrón que se mueve hacia afuera con un impulso $\mathbf{p}_e$ y un neutrino que se desplaza hacia el exterior con un impulso $\mathbf{p}_\nu$. Sabemos que los electrones no existen dentro de los núcleos y no hay razón para creer que los neutrinos sí existan dentro del núcleo. Por lo tanto, debemos imaginarnos que el electrón y el neutrino se crean en la transición, del mismo modo que se crea un cuanto en una transición cuántica de un átomo. Entonces, la función propia para el estado inicial es:

$$\psi_i = \psi_{Z,A} \tag{16–52}$$

la función propia que describe el núcleo Z, A y la del estado final es:

$$\psi_f = \psi_{Z+1,A}\psi_e\psi_\nu \tag{16–53}$$

en donde suponemos que en el estado final no hay interacciones entre el núcleo, el electrón y el neutrino, de tal modo que la función propia para el sistema puede escribirse como producto de la función propia $\psi_{Z+1,A}$ para el núcleo $Z+1$, A, la función propia ψ_e para el electrón, y la función propia ψ_ν para el neutrino. Si no hay interacciones, las funciones propias para el electrón y el neutrino son ondas planas de partícula libre de la forma (15–23). Esto es,

$$\psi_e = L^{-3/2}e^{i\mathbf{K}_e\cdot\mathbf{r}} \tag{16–54}$$

en donde,

$$\mathbf{K}_e = \mathbf{p}_e/\hbar \tag{16–54'}$$

y

$$\psi_\nu = L^{-3/2}e^{i\mathbf{K}_\nu\cdot\mathbf{r}} \tag{16–55}$$

en donde,

$$\mathbf{K}_\nu = \mathbf{p}_\nu/\hbar \tag{16–55'}$$

y donde $\mathbf{r}$ es el vector de posición del origen de coordenadas al centro de los núcleos Z, A y $Z+1$, A.* Estas funciones propias se normalizan, utilizando condiciones periódicas a la frontera, en una caja de lado de longitud L. A continuación, utilizamos la extensión tridimensional de la Regla de Oro N.° 2

* Suponemos que el núcleo Z, A es estacionario y hacemos caso omiso del retroceso del núcleo $Z+1$, A.

www.FreeLibros.me

(ecuación 9–45), para calcular la rapidez con la que el sistema efectuará transiciones del estado inicial a los finales. Esto indica que la rapidez de transición es de, aproximadamente,

$$\frac{2\pi}{\hbar} v_{fi}^* v_{fi} \rho_f \tag{16–56}$$

La cantidad ρ_f es la densidad de estados finales del sistema, y la cantidad v_{fi} es el elemento de matriz del potencial de interacción V, la perturbación que causa las transiciones, tomada entre el estado inicial y el final. Esto es,

$$v_{fi} \equiv \int \psi_f^* V \psi_i \, d\tau \tag{16–56'}$$

Puesto que no sabemos nada respecto a este potencial de interacción, tenemos libertad para hacer la suposición más simple posible con respecto a su forma. De acuerdo con Fermi, suponemos que V es una constante universal g, que se conoce como *constante de acoplamiento de desintegración beta.* Por tanto,

$$v_{fi} = g \int \psi_f^* \psi_i \, d\tau = gL^{-3} \int \psi_{Z+1,A}^* e^{-i\mathbf{K}_e \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{K}_\nu \cdot \mathbf{r}} \psi_{Z,A} \, d\tau \tag{16–57}$$

Sólo habrá contribuciones a la integral de valores de r del orden de los radios nucleares, puesto que para valores mayores, $\psi_{Z+1,A}$ y $\psi_{Z,A}$ obviamente se anulan. Sin embargo, para los procesos de emisión de un electrón, excepto los de energía desacostumbradamente alta, un cálculo rápido demostrará que K_e y K_ν son siempre suficientemente pequeños para que $\mathbf{K}_e \cdot \mathbf{r} \lesssim 0.1$ y $\mathbf{K}_\nu \cdot \mathbf{r} \lesssim 0.1$, para r del orden de los radios nucleares o menor que éstos. Para obtener una aproximación bastante buena, podemos hacer que ambos exponenciales de la ecuación (16–57) sean iguales a la unidad, y obtener,

$$v_{fi} \simeq gL^{-3} \int \psi_{Z+1,A}^* \psi_{Z,A} \, d\tau$$

o bien,

$$v_{fi} \simeq gL^{-3} M \tag{16–58}$$

en donde la cantidad

$$M \equiv \int \psi_{Z+1,A}^* \psi_{Z,A} \, d\tau \tag{16–58'}$$

se denomina *elemento nuclear matriz.* Si examinamos la expresión (16–56), veremos que, puesto que M es independiente de los impulsos del electrón y el neutrino, estas cantidades entran en la rapidez de transición, o bien, en la forma del espectro del electrón, sólo a través de la densidad de los estados finales ρ_f.

www.FreeLibros.me

Puesto que se supone que las transiciones conducen a estados finales del sistema en los que el núcleo estacionario $Z+1, A$ está en un estado simple (por lo común, el fundamental), ρ_f contiene sólo la densidad de estados del electrón y el neutrino. En realidad, ρ_f es esencialmente el producto de las densidades de estados de esas partículas. De acuerdo con nuestro análisis de la sección 3 del capítulo 15, ambas partículas tienen densidades finitas de estados debido a las restricciones impuestas por las condiciones periódicas a la frontera usadas para normalizar las funciones propias (16–54) y (16–55). Como en ese análisis, podemos tomar inmediatamente los resultados (12–37) del cálculo de la densidad de estados para un electrón de energía cinética T_e en una caja de longitud L. De acuerdo con nuestra notación presente, esto es:

$$N(T_e)\,dT_e = \frac{m^{3/2}L^3T_e^{1/2}\,dT_e}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3} \tag{16–59}$$

Escribamos la (16–59) en términos del impulso de electrón p_e, utilizando la ecuación

$$\frac{p_e^2}{2m} = T_e \tag{16–60}$$

Derivando obtenemos

$$\frac{p_e\,dp_e}{m} = dT_e$$

Multiplicando esto por la raíz cuadrada de la expresión (16–60), se obtiene,

$$\frac{p_e^2\,dp_e}{2^{1/2}m^{3/2}} = T_e^{1/2}\,dT_e$$

que nos permite escribir la fórmula (16–59) como:

$$N(T_e)\,dT_e = \frac{L^3p_e^2\,dp_e}{2\pi^2\hbar^3} \tag{16–61}$$

Puede demostrarse que la expresión (16–61), que incluye sólo el impulso p_e, es una expresión relativísticamente correcta, aun cuando la (16–59) procede de la ecuación no relativista de Schrödinger y la (16–60), que no es relativista.* Por consiguiente, la ecuación (16–61) puede aplicarse a electrones relativistas y, asimismo, a los neutrinos relativistas, emitidos en las transiciones de que nos ocupamos. Para las últimas partículas, la ecuación es:

$$N(T_\nu)\,dT_\nu = \frac{L^3p_\nu^2\,dp_\nu}{2\pi^2\hbar^3} \tag{16–62}$$

* La razón es las restricciones periódicas de la condición a la frontera que llevan a la densidad finita de los estados, se refieren básicamente a los valores permitidos de la longitud de onda de De Broglie o, a través de la expresión $p = h/\lambda$, válida tanto desde el punto de vista clásico como del relativista, son restricciones impuestas a los valores permitidos del impulso.

www.FreeLibros.me

Ahora bien, la ecuación (16–51) muestra que en una transición dada, T_ν está determinada por el valor de T_e. De hecho, al derivar esta ecuación obtenemos

$$dT_\nu = -dT_e \tag{16–63}$$

Por lo tanto, T_e es suficiente para especificar los estados finales de la transición. El número de estados finales en los que la energía cinética del electrón está entre T_e y $T_e + dT_e$, es:

$$d^2N = -N(T_\nu)\, dT_\nu\, N(T_e)\, dT_e = -\frac{L^6 p_\nu^2\, dp_\nu\, p_e^2\, dp_e}{4\pi^4\hbar^6}$$

en donde el signo menos compensa el hecho de que dT_ν y dT_e son intrínsecamente del signo opuesto. El número de estos estados por unidad de energía cinética del electrón es

$$\frac{d^2N}{dT_e} = -\frac{L^6 p_\nu^2\, dp_\nu\, p_e^2\, dp_e}{4\pi^4\hbar^6\, dT_e} \tag{16-64}$$

Para simplificar esto, observamos que para el neutrino de masa en reposo cero, la energía cinética es la misma que la energía total relativista y, como en la expresión (3–10),

$$cp_\nu = T_\nu \tag{16-65}$$

Derivando, obtenemos,

$$c\, dp_\nu = dT_\nu = -dT_e \tag{16-66}$$

en donde hemos utilizado la ecuación (16–63). Substituyendo ésta en la (16–64), tenemos:

$$\frac{d^2N}{dT_e} = \frac{L^6 p_\nu^2 p_e^2}{4\pi^4\hbar^6 c}\, dp_e \tag{16-67}$$

La cantidad p_ν^2 puede eliminarse, utilizando las ecuaciones (16–65) y (16–51), que dan:

$$p_\nu^2 = \frac{T_\nu^2}{c^2} = \frac{(T_e^{\text{máx}} - T_e)^2}{c^2}$$

Así, la ecuación (16–67) puede escribirse como:

$$\frac{d^2N}{dT_e} = \frac{L^6(T_e^{\text{máx}} - T_e)^2}{4\pi^4\hbar^6 c^3}\, p_e^2\, dp_e \tag{16-68}$$

Si tomamos la expresión (16–68) como la densidad de los estados finales para los que el impulso del electrón se encuentra entre p_e y $p_e + dp_e$, y

www.FreeLibros.me

utilizando la ecuación (16–58) tenemos una expresión para $R(p_e)dp_e$, la rapidez de transiciones a estos estados. Esto es,

$$R(p_e)\,dp_e \simeq \frac{g^2M^*M}{2\pi^3\hbar^7c^3}(T_e^{\text{máx}} - T_e)^2p_e^2\,dp_e \qquad (16\text{–}69)$$

La función $R(p_e)$ es el espectro de impulso de los electrones emitidos en las transiciones. Estos resultados aparecen en una forma conveniente, puesto que la mayor parte de los experimentos dan directamente el espectro de impulso. Predicen que un diagrama de la cantidad $[R(p_e)/p_e^2]^{1/2}$ en función de $(T_e^{\text{máx}} - T_e)$, o, simplemente, en función de T_e, debe dar una línea recta. La figura 16–41 muestra ese *diagrama de Kurie* (*o de Fermi*) para el más simple de todos los procesos de emisión de electrón:

$$^0n^1 \rightarrow {}^1\text{H}^1 + e^- + \nu \qquad (16\text{–}70)$$

la desintegración de un neutrón $^0n^1$ en un protón $^1\text{H}^1$, más un electrón e^- y un neutrino ν. El neutrón se desintegra en esta forma, debido a que $[M_{0,1} - M_{1,1}]c^2 = +0.78$ Mev. La vida media τ de la desintegración es de aproximadamente 1100 seg.

Estos datos proporcionan un ejemplo bastante típico de la clase de concordancia que se obtiene entre la teoría simple de Fermi y los datos experimentales para la desintegración beta de núcleos de valores bajos de Z. Las desviaciones al extremo de baja energía del espectro se encuentra, con frecuencia, que son un resultado de dificultades experimentales, tales como la autoabsorción de electrones de baja energía en la fuente. Sin embargo, para núcleos de valores elevados de Z, hay desviaciones claras entre el experimento y la teoría simple en el extremo de baja energía del espectro, que son más pronunciadas, y de sentido contrario en comparación a las de la figura 16–41. Estas desviaciones para núcleos de valor elevado de Z se deben al uso de ondas planas (ecuación 16–54) para las funciones propias del electrón. Esto consti-

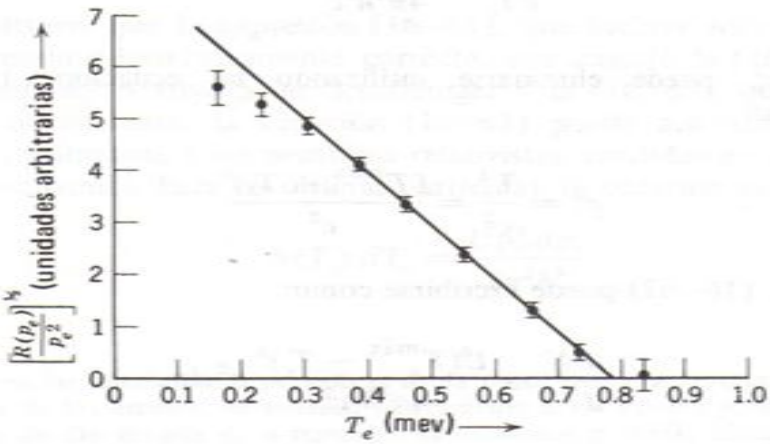

Figura 16-41. Un diagrama de Kurie (o de Fermi) para la desintegración beta del neutrón. Tomado de J. M. Robson, *Phys. Rev.*, 83, 349 (1951).

www.FreeLibros.me

tuye una aproximación excelente para las funciones propias del neutrino, debido a que los neutrinos interactúan tan débilmente que, en realidad, se comportan como partículas libres. Sin embargo, los electrones interactúan con bastante fuerza con el campo de Coulomb del núcleo final. Esta interacción de atracción tiende a hacer que ψ_e sea mayor que una onda plana en la región cercana al núcleo y, en esa forma, se incrementa el índice de transición. Puesto que la atracción de Coulomb es más importante para valores pequeños de T_e, el efecto consiste en realzar la parte de baja energía del espectro. La teoría simple de Fermi se aplica también directamente a la emisión de un positrón; pero el efecto de Coulomb tiene un signo diferente, debido a que la interacción es de repulsión. Esto hace que la función propia del positrón sea menor que una onda plana cerca del núcleo, y conduzca a un vaciado de la parte de baja energía del espectro. Cuando se incluyen en la teoría correcciones para esos efectos de Coulomb, sus predicciones concuerdan por lo común bastante bien con los experimentos exactos, incluso para electrones o positrones de energías muy bajas.

Por supuesto, la cuestión relativa a la forma del espectro no se plantea en la captura de electrón. En este proceso, hay solamente dos partículas en el estado final, el núcleo $Z-1$, A y el neutrino. La última partícula lleva siempre esencialmente toda la energía disponible E, puesto que la masa del núcleo es muy grande. Aunque sólo se emite un neutrino en el proceso primario de captura de electrón, puede observarse dicho proceso experimentalmente, detectando los rayos X que se emiten subsecuentemente, al llenarse el hueco dejado en el sistema electrónico del átomo.

Mediante la integración de la expresión (16–69) sobre todo el espectro, puede calcularse la razón de transición a todos los estados finales. Como en la ecuación (13–118), esta probabilidad total por segundo de que el núcleo inicial se desintegre, es igual al recíproco de su vida media τ. Así que,

$$\frac{1}{\tau} \simeq \frac{g^2 M^* M}{2\pi^3 \hbar^7 c^3} \int_0^{p_e^{\text{máx}}} (T_e^{\text{máx}} - T_e)^2 p_e^2 \, dp_e \tag{16–71}$$

Para convertir completamente el integrando en una función de p_e, escribimos:

$$\begin{aligned}(T_e^{\text{máx}} - T_e)^2 &= [T_e^{\text{máx}} + mc^2 - (T_e + mc^2)]^2 \\ &= (E_e^{\text{máx}} - E_e)^2\end{aligned}$$

en donde mc^2 es la energía de masa en reposo y E_e es la energía relativista total del electrón y en donde hemos utilizado las ecuaciones (1–22′) y (1–24); sin embargo, de acuerdo con la expresión (1–25),

$$E_e = \sqrt{c^2 p_e^2 + m^2 c^4}$$

Por lo tanto,

$$\frac{1}{\tau} \simeq \frac{g^2 M^* M}{2\pi^3 \hbar^7 c^3} \int_0^{p_e^{\text{máx}}} \left(\sqrt{c^2 p_e^{\text{máx}^2} + m^2 c^4} - \sqrt{c^2 p_e^2 + m^2 c^4}\right)^2 p_e^2 \, dp_e^2$$

www.FreeLibros.me

Al integrar esto, se obtiene

$$\frac{1}{\tau} \simeq \frac{g^2 M^* M m^5 c^4}{2\pi^3 \hbar^7} F(\alpha) \tag{16–72}$$

en donde,

$$F(\alpha) = -\tfrac{1}{4}\alpha - \tfrac{1}{12}\alpha^3 + \tfrac{1}{30}\alpha^5 + \tfrac{1}{4}\sqrt{1+\alpha^2}\,\mathrm{senh}^{-1}\sqrt{1+\alpha^2} \tag{16–72'}$$

con

$$\alpha \equiv p_e^{\text{máx}}/mc$$

La función $F(\alpha)$ tiene el comportamiento

$$F(\alpha) \simeq \begin{cases} \tfrac{1}{30}\alpha^5, & \alpha \gg 5 \\ \tfrac{2}{105}\alpha^7, & \alpha \ll 0.5 \end{cases} \tag{16–72''}$$

y un comportamiento intermedio entre estos límites.

Cuando se incluyen correcciones de Coulomb, $F(\alpha)$ se reemplaza por una función $F(\alpha, Z)$. No se puede dar una expresión analítica para $F(\alpha, Z)$; pero se pueden encontrar gráficas y tablas en varias referencias. Para Z pequeña, $F(\alpha, Z) \simeq F(\alpha)$. Para $Z = 100$, $F(\alpha, Z) \simeq 100F(\alpha)$ en el caso de emisión de un electrón, y $F(\alpha, Z) \simeq 0.1F(\alpha)$ en el caso de emisión de un positron, cuando α tiene un valor correspondiente a la energía típica disponible de desintegración beta, $E = 1$ Mev.

La ecuación (16–72) muestra que la vida media τ de un núcleo en desintegración beta depende mucho de $p_e^{\text{máx}}$ y, por lo tanto, fuertemente de la energía disponible E. Las vidas medias observadas para los núcleos inestables ante la desintegración beta que se producen naturalmente, va de valores del orden de 1 seg para una energía disponible de varios Mev, a valores del orden de 10^7 seg, para energías disponibles de varios centenares de Mev. (Sin embargo, observe que la vida media de un núcleo en desintegración alfa es una función todavía más fuerte de la energía disponible en la desintegración alfa.)

La ecuación (16–72) muestra también que la cantidad

$$F(\alpha, Z)\tau \simeq \frac{2\pi^3\hbar^7}{g^2 m^5 c^4}\frac{1}{M^* M} \tag{16–73}$$

depende sólo de una colección de constantes universales, y el valor del elemento matriz nuclear

$$M \equiv \int \psi^*_{Z\pm 1, A}\psi_{Z, A}\, d\tau \tag{16–73'}$$

en donde indicamos ahora que la teoría se aplica igualmente bien a la emisión de un electrón o la de un positrón. El producto $F\tau$ es inversamente proporcional a M^*M y más pequeño cuando toma su valor máximo posible $M^*M = 1$.

www.FreeLibros.me

Esto ocurre cuando la función propia $\psi_{Z\pm1,A}$ es idéntica a la $\psi_{Z,A}$, debido a que, en esas circunstancias, la condición de normalización para las funciones propias requiere que la expresión (16–73′) da $M = 1$. Si las funciones propias $\psi_{Z\pm1,A}$ y $\psi_{Z,A}$ no son idénticas, $M^*M < 1$, y esta cantidad se hace menor, a medida que las funciones propias se hacen menos similares. En efecto, M y, por consiguiente, M^*M, son exactamente cero si $\psi_{Z\pm1,A}$ y $\psi_{Z,A}$ son tan diferentes que correspondan a valores distintos de spin nuclear i, o bien, a diferentes paridades nucleares. La primera restricción se plantea debido a que las funciones propias $\psi_{Z\pm1,A}$ y $\psi_{Z,A}$, como cualesquiera otras funciones propias, son ortogonales con respecto a todos sus números cuánticos, incluyendo el número cuántico i. La segunda restricción se plantea, debido a que, si las paridades de esas dos funciones propias son diferentes, el integrando entero será de paridad impar,* y la contribución a la integral de la expresión (16–73′) de cada punto (x, y, z) se cancelará mediante la contribución del punto $(-x, -y, -z)$. Estas dos restricciones constituyen las *reglas de selección de Fermi:*

$$\Delta i = 0 \qquad (16\text{–}74)$$

La paridad nuclear no debe cambiar.

que establece condiciones sobre ls paridades y los spins relativos de los estados de los núcleos Z, A y $Z \pm 1, A$ que, si se violan, provocan que el elemento de matriz nuclear M se anule idénticamente. Las transiciones que satisfacen las reglas de selección se denominan *transiciones permitidas.*

Del modelo de capas se desprende inmediatamente que las transiciones beta entre los estados fundamentales de cualquier conjunto de núcleos espejo son siempre transiciones permitidas. Como se mencionó en la sección 3, los dos núcleos de un conjunto de núcleos espejo consisten de un número impar de protones y el mismo número impar de neutrones, más un protón extra para uno de los núcleos y un neutrón extra para el otro. Los estados propios del neutrón y el protón, llenos por los nucleones de un conjunto típico de núcleos espejo se representan en la figura 16–42. En el modelo de capas, el spin nuclear es igual al impulso angular total del nucleón impar simple y,

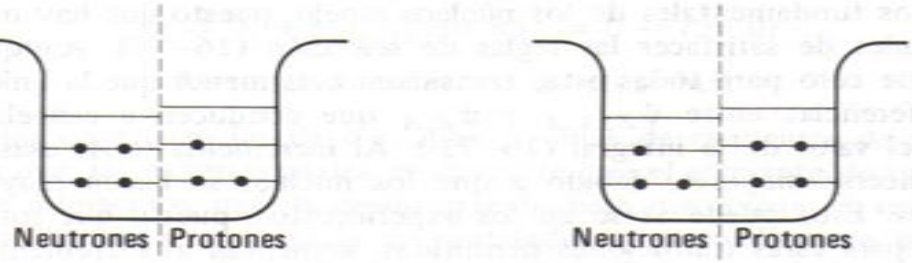

Figura 16-42. Representación esquemática de los estados fundamentales de un conjunto típico de núcleos espejo.

* Esto es, (par) (non) = (non), y (non) (par) = (non).

www.FreeLibros.me

puesto que éste está en el mismo estado propio en cada núcleo del conjunto, los spins de esos dos núcleos serán los mismos. Asimismo, en el modelo de capas, las funciones propias completas $\psi_{Z\pm1,A}$ y $\psi_{Z,A}$ pueden escribirse como productos de las funciones propias para cada uno de los nucleones A que se mueven independientemente, y la paridad nuclear será el producto de las paridades de cada una de esas funciones propias. Puesto que hay dos nucleones en cada estado propio, con excepción del estado propio que contiene el nucleón impar simple y, puesto que, el producto de las paridades de dos funciones propias de la misma paridad es siempre par,* la paridad nuclear es igual a la de la función propia del nucleón impar simple. Como este nucleón está en el mismo estado propio en cada núcleo del conjunto, se sigue que las paridades de esos dos núcleos son las mismas. Estos argumentos nos conducen no sólo a la conclusión de que las funciones propias completas $\psi_{Z\pm1,A}$ y $\psi_{Z,A}$ para un conjunto de núcleos espejo son bastante similares para satisfacer las reglas de selección (16–74); sino también a la conclusión mucho más fuerte de que esas dos funciones propias completas deben ser esencialmente idénticas. Difieren sólo en que la función propia para un nucleón (el impar simple) es una función propia del protón para uno de los núcleos y una función propia del neutrón para el otro y, puesto que esas funciones propias son para el mismo estado propio, son idénticas, excepto para los efectos de Coulomb. Sin embargo, hemos visto que $\psi_{Z\pm1,A} \simeq \psi_{Z,A}$, de modo que $M^*M \simeq 1$. Por esto, llegamos a la conclusión de que para todas las transiciones beta entre los estados fundamentales de conjuntos de núcleos espejo, el producto $F\tau$ debe asumir su valor mínimo posible. Esta conclusión se verifica gracias a los experimentos, que muestran que para todas esas transiciones, los valores $F\tau$ caen todos en torno a $F\tau \simeq 10^{3.5}$ seg, y que los valores $F\tau$ para esas transiciones son los más pequeños que se han observado. Utilizando estos valores experimentales de $F\tau$ en la expresión (16–73) y estableciendo la suposición de que $M^*M = 1$, para estos casos, la constante de acoplamiento de desintegración beta puede evaluarse. El resultado es:

$$g \simeq 1.4 \times 10^{-49} \text{ erg-cm}^3 \tag{16–75}$$

Por supuesto, hay muchas transiciones permitidas que no tienen lugar entre los estados fundamentales de los núcleos espejo, puesto que hay muchas otras posibilidades de satisfacer las reglas de selección (16–74). Aunque M^*M es mayor que cero para todas estas transiciones, es menor que la unidad, debido a las diferencias entre $\psi_{Z\pm1,A}$ y $\psi_{Z,A}$ que conducen a cancelaciones que reducen el valor de la integral (16–73′). Al incrementarse A, esas diferencias deben hacerse mayores, debido a que los núcleos se hacen mayores y más complejos. Esto puede verse en los experimentos, puesto que los valores $F\tau$ medidos para estas transiciones permitidas, aumentan al incrementarse A. Los valores mayores de $F\tau$ para transiciones permitidas son de aproximadamente $F\tau \simeq 10^{5.5}$ seg.

Si alguna parte de las reglas de selección (16–74) se viola, $M^*M \equiv 0$. Sin embargo, para esas *transiciones prohibidas*, se ha observado que $F\tau$ no se hace

* Es decir, (par) (par) = (par), y (non) (non) = (par).

www.FreeLibros.me

infinitamente grande, como lo predice la ecuación (16–73), sino que se incrementa sólo de acuerdo con un factor de 10^3. Esto refleja simplemente el hecho de que la ecuación (16–73) no es exacta, debido a que se basa en varias aproximaciones. Una de éstas es hacer $e^{-i\mathbf{K}_e\cdot\mathbf{r}}e^{-i\mathbf{K}_\nu\cdot\mathbf{r}} \equiv e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ igual a la unidad en la ecuación (16–57). Puede efectuarse una corrección a esta aproximación utilizando la expresión más exacta de (16–57), obtenida desarrollando $e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ en una serie de potencias y tomando los dos primeros términos. Esto da para el elemento de matriz del potencial de interacción para la desintegración beta,

$$v_{fi} \simeq gL^{-3}\left[\int \psi^*_{Z\pm1,A}\psi_{Z,A}\,d\tau - i\mathbf{K}\cdot\int \psi^*_{Z\pm1,A}\mathbf{r}\psi_{Z,A}\,d\tau\right] \qquad (16\text{–}76)$$

Evidentemente, pueden presentarse situaciones en las que el primer término se anule; pero no el segundo. Puesto que $\mathbf{K}\cdot\int \psi^*_{Z\pm1,A}\mathbf{r}\psi_{Z,A}\,d\tau \leqslant \mathbf{K}\cdot\mathbf{r} \lesssim 10^{-1}$ para desintegraciones beta de energía normal, este segundo término hace que sea posible tener transiciones prohibidas siempre y cuando los valores $F\tau$ sean mayores que los de las transiciones permitidas, por un factor de $\gtrsim(10^{-1})^{-2} = 10^2$. Se presenta una posibilidad similar a partir de un término de orden $v/c \lesssim 10^{-1}$, que debería aparecer en realidad en el elemento de matriz del potencial de interacción para la desintegración beta, debido a efectos relativistas.

La situación se complica todavía más, debido a la observación experimental de que hay ciertas transiciones beta que violan las reglas de selección de Fermi (16–74); pero, sin embargo, tienen valores $F\tau$ tan pequeños como para cualquiera de las transiciones permitidas por esas reglas. Esto implica que en esas transiciones, el potencial de interacción para la desintegración beta V en la expresión (16–56′) no es constante, como supuso inicialmente Fermi, sino que es de un tipo más complicado, que conduce a un elemento de matriz del potencial de interacción que da diferentes reglas de selección. Las investigaciones teóricas demuestran que hay varios tipos de elementos de matriz que son posibles y que, algunos de ellos conducen a las reglas de selección de Fermi, mientras que otros lo hacen a las *reglas de selección de Gamow-Teller:*

$$\Delta i = 0, \pm 1 \qquad (\text{pero no } i = 0 \rightarrow i = 0)$$
$$\text{La paridad nuclear no debe cambiar.} \qquad (16\text{–}77)$$

Al evaluar las consecuencias de los tipos posibles de elementos de matriz y compararlas con las experimentales, se descubre que el elemento de matriz del potencial de interacción para la desintegración beta que existe en realidad en la naturaleza, contiene una mezcla de cantidades aproximadamente iguales de los tipos que conducen a las reglas de selección de Fermi que de los que llevan a las reglas de selección de Gamow-Teller. Estas comparaciones no se basan en la forma del espectro de desintegración beta, debido a que éste se encuentra dominado siempre por la misma densidad de estados para todos los tipos de elementos de matriz. No vamos a ocuparnos de la teoría en que se basan estas comparaciones, ya que estos puntos sólo son realmente inteligibles en el lenguaje de la teoría relativista de Dirac de la mecánica cuántica. Un motivo

www.FreeLibros.me

similar nos induce a evitar hacer una distinción entre *neutrinos* y *antineutrinos*.

Sin embargo, debemos tomar en consideración una propiedad descubierta recientemente del elemento de matriz del potencial de interacción para la desintegración beta, que es extremadamente interesante y no difícil de describir. Se ha descubierto que este elemento de matriz no es *escalar*, sino que, en lugar de ello es, por lo menos en parte, *pseudoescalar*. La distinción es que un escalar no cambia con la operación de paridad que se realiza —esto es, cuando las coordenadas de cada punto (x, y, z) cambian a $(-x, -y, -z)$—, mientras que un pseudoescalar cambia de signo en esta operación.

Un ejemplo de escalar es el potencial de interacción de Coulomb, o cualquier otro potencial de interacción que pueda escribirse como $V(r)$. Como el argumento r es la magnitud de un vector $\mathbf{r}$ $V(r)$ no cambia en la operación de paridad de reflejar $\mathbf{r}$ respecto del origen, aun cuando $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ en esta operación. Puesto que el elemento matriz de $V(r)$ es un cierto promedio de esta cantidad, dicho elemento matriz es escalar. En efecto, con la excepción del elemento de matriz del potencial de interacción para la desintegración beta, los elementos de matriz de todos los potenciales de interacción conocidos de la física clásica, atómica y nuclear, son escalares. Por ejemplo, tomemos en consideración el elemento de matriz del potencial de interacción spin-órbita, que es proporcional a $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$. Investigamos lo que le sucede a $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ en la operación de paridad, escribiendo $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ y observando que en esta operación, tanto $\mathbf{r}$ como $\mathbf{p}$ cambian de signo.* Así, $\mathbf{L}$ no cambia de signo. Para establecer la distinción entre su comportamiento en la operación de paridad, los vectores que cambian de signo, tales como los $\mathbf{r}$ y $\mathbf{p}$ se llaman *vectores polares*, y los que no cambian de signo, tales como el $\mathbf{L}$ se llaman *vectores axiles*. Todos los vectores de impulso angular, incluyendo $\mathbf{S}$, son axiles. Por consiguiente, vemos que el elemento de matriz del potencial de interacción spin-órbita es escalar, porque $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ no cambia de signo en la operación de paridad. Un ejemplo de pseudoescalar es la cantidad $\mathbf{P} \cdot \mathbf{A}$, en donde $\mathbf{P}$ es un vector polar y $\mathbf{A}$, un vector axil. Se trata de un pseudoescalar, puesto que cambia de signo en la operación de paridad, porque $\mathbf{P}$ cambia de signo y $\mathbf{A}$ no lo hace. El elemento de matriz del potencial de interacción para la desintegración beta contiene cantidades de este tipo. Puesto que la operación de paridad equivale a dejar el punto (x, y, z) fijo y reflejando los ejes de coordenadas respecto al origen, la operación equivale a pasar de un sistema derecho a otro izquierdo y, puesto que al menos una parte del elemento de matriz del potencial de interacción para la desintegración beta cambia de signo en esta operación, la descripción de los procesos de desintegración beta que produce este elemento matriz, dependerán de si se utiliza un sistema de coordenadas derecho o uno izquierdo. Cuando se descubrió esto, resultó extremadamente sorprendente, debido a que había sido una suposición fundamental la de que la descripción de *todos* los procesos físicos debe ser independiente de si se utiliza un sistema de coordenadas derecho o uno izquierdo.

* $\mathbf{p}$ cambia de signo, puesto que $m\,dx/dt \to m\,d(-x)/dt = -m\,dx/dt$, y en igual forma para las otras componentes del impulso.

www.FreeLibros.me

Esta suposición resultó incorrecta para la desintegración beta en experimentos realizados por Wu y sus colaboradores (1947), hechos por sugerencia de Lee y Yang (1956). En estos experimentos, que describimos primeramente en un sistema de coordenadas derecho, los vectores de impulso angular de spin **I** de los núcleos $^{27}Co^{60}$ emisores de electrones, se alinearon con respecto a un campo magnético externo, utilizando la interacción de estructura hiperfina a temperaturas tan bajas que la energía térmica de equilibrio kT es comparable al corrimiento hiperfino de la energía. En estas circunstancias, una mayoría de átomos se encuentra en el estado más bajo de energía, en ese estado, **I** se alinea esencialmente con respecto al campo magnético aplicado. El ángulo entre la dirección de **I** y la dirección del vector de impulso **p** se midió, a continuación, para cada electrón emitido, y se hizo una gráfica de la distribución de esos ángulos. Se descubrió que esta distribución es asimétrica, con aproximadamente una preferencia del 30 por ciento por la emisión de electrones cuyos vectores de impulso **p** están en el hemisferio opuesto al vector de spin **I**. Así, en el proceso promedio de emisión $\mathbf{p} \cdot \mathbf{I} < 0$. Sin embargo, $\mathbf{p} \cdot \mathbf{I}$ es pseudoescalar, puesto que **p** es un vector polar e **I**, un vector axil. Así, en cualquier sistema izquierdo, el signo de este pseudoescalar cambiará, en el proceso promedio de emisión $\mathbf{p} \cdot \mathbf{I} > 0$, y la descripción de este proceso, por lo tanto, depende de si se utiliza un sistema derecho o uno izquierdo. Esto demuestra que el elemento de matriz del potencial de interacción para la desintegración beta debe ser pseudoescalar, o, al menos, contener una parte pseudoescalar. Si fuera puramente escalar, la distribución de electrones sería necesariamente simétrica, de tal modo que en el proceso promedio de emisión $\mathbf{p} \cdot \mathbf{I} = 0$, la descripción de este proceso sería independiente de si se utilizara un sistema de coordenadas derecho o uno izquierdo, aun cuando el pseudoescalar $\mathbf{p} \cdot \mathbf{I}$ cambia de signo, debido a que $-0 = +0$.

Puesto que el elemento de matriz del potencial de interacción para la desintegración beta no es escalar, no es cierto que para el potencial de interacción $V(-x, -y, -z) = V(x, y, z)$. Así las funciones propias para todo el sistema no tienen necesariamente una paridad definida (vea la nota al pie de la página 452), y no es necesario que todo el sistema conserve la paridad. Los experimentos indican que no lo hace. La paridad del estado inicial, que consiste en los núcleos Z, A no es igual que la paridad del estado final, consistente en el núcleo $Z \pm 1$, A más el neutrino, el electrón o el positrón emitidos.

Concluimos esta sección con breves descripciones de algunos otros experimentos recientes que incluyen la desintegración beta y neutrinos que tienen un interés particular. En el período posterior a 1950, Allen, Sherwin y otros, hicieron numerosas medidas de la velocidad de retroceso del núcleo que queda en el estado final de un proceso de desintegración beta. Puesto que la masa del núcleo es muy grande en comparación al electrón y al neutrino, la velocidad de retroceso es suficientemente lenta para que pueda medirse, tomando electrónicamente el tiempo (varios microsegundos) que necesita el núcleo para desplazarse a una distancia dada (varios centímetros) en una dirección determinada, a través de un vacío (libre de campos). Esta medida determina el vector de impulso del núcleo en retroceso. Al medir también el vector de impulso del electrón emitido, es posible demostrar que el impulso

www.FreeLibros.me

lineal puede conservarse sólo si se emite en el proceso un neutrino. Además, el impulso requerido del neutrino concuerda con la exactitud experimental (10 por ciento) con la energía del neutrino que se requiere para conservar la energía, si la masa en reposo del neutrino es cero, como supuso Pauli.

Incluso después de que se realizaron estos experimentos de retroceso, se creía todavía firmemente, en ciertos lugares, que el neutrino no era realmente una partícula, sino sólo un mito establecido inteligentemente para tomar en cuenta la conservación de la energía, el impulso angular y el impulso lineal. Este punto de vista tuvo cierto valor, en tanto no fue posible detectar el neutrino. Sin embargo, experimentos realizados por Cowan y Reines, en 1956, lograron detectar esta partícula y, en esa forma, le dieron el estatuto correspondiente de cualquier otra partícula. En estos experimentos extremadamente difíciles, observaron la reacción

$$\nu + {}^{1}\mathrm{H}^{1} \rightarrow {}^{0}n^{1} + e^{+} \tag{16–78}$$

la captura de un neutrino ν por un protón ${}^{1}\mathrm{H}^{1}$, conduce a un neutrón ${}^{0}n^{1}$ y un positrón e^{+}. Esta es la inversa de la reacción

$${}^{0}n^{1} + e^{+} \rightarrow {}^{1}\mathrm{H}^{1} + \nu \tag{16–79}$$

que es una forma alternativa del proceso de desintegración del neutrón (16–70). Un punto que resultará interesante dentro de poco es que la reacción (16–79) debe tener aproximadamente la misma vida media $\tau \sim 10^{3}$ seg, que la reacción (16–60), debido a que los elementos de matriz y las densidades de los estados que rigen los tiempos de vida contienen esencialmente los mismos factores, aunque en orden diferente. La reacción de Cowan-Reines (16–78) tuvo lugar sobre los protones contenidos en un depósito muy grande de materia centelleante hidrogenada, expuesta al flujo enorme de neutrinos emitidos por desintegraciones beta inducidas por la fisión en un reactor nuclear, y los positrones se detectaron mediante centelleos que produjeron en el mismo depósito. Se utilizaron métodos complejos para reducir al mínimo los centelleos de fondo. Esto era necesario, debido a que se esperaba menos de una reacción por minuto, a pesar de la magnitud del flujo de neutrinos y el tamaño del blanco hidrogenado, puesto que la interacción de los neutrinos con la materia es extremadamente débil. Para demostrar esto, efectuamos un cálculo aproximado de la sección transversal para la reacción (16–78), como sigue. Tomemos en consideración un neutrino de energía típica de 1 Mev, incidente sobre un protón, y supongamos que hay una posibilidad de interacción entre esas dos partículas, siempre que estén suficientemente cerca para permitir una superposición apreciable de sus funciones de onda. Esto ocurrirá cuando su separación relativa sea comparable a la longitud de onda de De Broglie del neutrino, $\sim 10^{-10}$ cm. Puesto que su velocidad relativa es $\sim 10^{10}$ cm-seg^{-1}, el tiempo máximo durante el que puede haber superposición es $\sim 10^{-20}$ seg. Ahora bien, supongamos que la vida media para la reacción (16–78) es aproximadamente el mismo que la vida media $\sim 10^{3}$ seg para su reacción inversa la (16–79). Esta suposición se justifica por el principio de reversibilidad microscópica, mencionado después de la ecuación (13–84). Entonces, la probabilidad de que la reacción (16–78) tenga

www.FreeLibros.me

lugar en el tiempo $\sim 10^{-20}$ seg es $\sim 10^{-20}/10^3 = 10^{-23}$, y la sección transversal σ para esta interacción es la sección transversal $\sim(10^{-10}\ \text{cm})^2 = 10^{-20}\ \text{cm}^2$ para colisiones con funciones de onda que se superponen veces la probabilidad que se acaba de evaluar. Esto da $\sigma \sim 10^{-20}\ \text{cm}^2 \times 10^{-23} = 10^{-43}\ \text{cm}^2$. Un cálculo exacto, basado en el método que utilizamos para evaluar los tiempos de vida de los procesos que conducían a la emisión del neutrino, da

$$\sigma \simeq \frac{2g^2M^*M}{\pi\hbar^4 c}\frac{p_e^2}{v_e} \tag{16-80}$$

Para un positrón de impulso p_e y una velocidad v_e, correspondiente a la energía cinética típica de 1 Mev, la expresión (16–80) predice una sección transversal de interacción de $\sigma \sim 10^{-44}\ \text{cm}^2$. Las medidas de Cowan y Reines van de acuerdo con este valor, dentro de la gran incertidumbre experimental.

Observe que la ecuación (16–80) muestra claramente que la pequeñez extrema de la sección transversal de interacción del neutrino es un resultado de la pequeñez extrema de la constante de acoplamiento de desintegración beta $g \sim 10^{-49}$ erg-cm^3. La sección transversal es tan pequeña que un neutrino emitido en una reacción nuclear en el interior del Sol, puede atravesar toda su masa con pocas probabilidades de ser absorbido. Las interacciones de desintegración beta son muy débiles en comparación a las interacciones nucleares.

Puede hacerse una comparación numérica, dividiendo la constante de acoplamiento de desintegración beta, que tiene las dimensiones de energía por volumen, por el volumen de un núcleo típico. Esto da una energía característica $\sim 10^{-49}\ \text{erg-cm}^3/(5 \times 10^{-13})^3\ \text{cm}^3 \sim 10^{-12}$ ergs ~ 1 ev, que es menor por un factor de $\sim 10^{-7}$ que la energía ~ 10 Mev que caracteriza a las interacciones nucleares. Puesto que el cuadrado de la constante de acoplamiento de desintegración beta entra en cantidades medibles, tales como la rapidez de transición y las secciones transversales, es apropiado decir que las *interacciones de desintegración beta son más débiles que las interacciones nucleares por un factor de* $\sim 10^{-14}$. El lector recordará que la comparación de la figura 16–12 indica que las interacciones electromagnéticas son sólo un poco más débiles que las nucleares. En la sección 16, una comparación cuantitativa demostrará que *las interacciones electromagnéticas son más débiles que las nucleares por un factor de* $\sim 10^{-3}$. Esta conclusión, más la sacada en la primera nota al pie de la sección 3, demuestra que las *interacciones gravitacionales son más débiles que las nucleares por un factor de* $\sim 10^{-38}$.

12. Conversión interna y desintegración gamma

El núcleo es un sistema de nucleones ligados en cierta región del espacio. Puesto que este sistema parece obedecer a las leyes de mecánica cuántica, debe tener un conjunto de estados cuantizados de energía. Hasta ahora, hemos tomado sólo en consideración el estado base de energía más baja; pero en esta sección nos volvemos hacia los estados excitados de energía más alta. Gran

www.FreeLibros.me

parte de lo que hemos aprendido con relación a los estados excitados se ha debido al estudio de los cuantos de alta energía, llamados rayos gamma, que se emiten en transiciones entre cierto estado excitado inicial de energía E_i y un estado final de energía $E_f < E_i$. Estas transiciones espontáneas de *desintegración gamma* son completamente análogas a las transiciones ópticas que tienen lugar entre los estados cuantizados de energía de un átomo. En ambos casos, las transiciones tienen lugar por medio de la interacción de los momentos de carga y los momentos magnéticos del sistema con campos electromagnéticos. La energía se conserva debido a que la energía del cuanto emitido es

$$h\nu = E_i - E_f \tag{16-81}$$

Hay numerosos procesos por medio de los que puede excitarse el núcleo a uno de sus estados de energía más alta. Por ejemplo, puede suceder que un proceso de desintegración alfa o beta deje al núcleo final en un estado excitado, en lugar de su estado base. Las posibilidades se indican esquemáticamente, para la desintegración beta, en el diagrama de nivel de energía de la figura 16–43. Por supuesto, el cambio de energía en la desintegración beta es la energía disponible de desintegración beta E y es igual a la energía total que se lleva el neutrino y el electrón o positrón. Por lo común, sólo se excitan unos cuantos estados del núcleo final, debido a que las desintegraciones beta a estados de ciertos spins y paridades, están prohibidos por las reglas de selección de desintegración beta y, porque la fuerte dependencia de la rapidez de transición de desintegración beta en E, hace que la rapidez de transición sea despreciable hacia estados más elevados que varios Mev por encima del estado base. En la excitación que sigue a la desintegración alfa, la dependencia todavía mayor de la rapidez de transición de desintegración alfa sobre la energía de desintegración alfa, limita normalmente la excitación del núcleo final a estados ligeramente inferiores a 1 Mev por encima del estado base.* Pueden excitarse estados de energía de hasta 6 u 8 Mev por encima del estado fundamental, cuando se libera esta energía de amarre mediante la captura de un nucleón de baja energía por un núcleo. Pueden excitarse estados de energía todavía más alta, mediante la captura de un nucleón de energía más elevada, procesos en los que se dispersa inelásticamente un nucléon de alta energía de un núcleo, y mediante numerosos otros procesos que incluyen las reacciones nucleares.

Después de la excitación de un núcleo, puede desintegrarse mediante la emisión de rayos gamma. Si la energía de la excitación es menor que la

* Observe que, cuando la desintegración alfa entre dos núcleos lleva a los estados excitados del núcleo final, el espectro de energía de la partícula alfa contendrá una *estructura fina* de componentes de energía baja. También es posible que la desintegración alfa se origine en estados excitados del núcleo inicial y, en este caso, el espectro contendrá componentes de *largo alcance* de mayor energía. Las situaciones similares que se producen en la desintegración beta, dan por resultado varios valores de la energía E disponible en la desintegración beta, y espectros de energía del electrón o el positrón que son una superposición de los espectros que corresponden a cada valor de E. Observe que, entonces, los datos sobre las energías de los estados excitados se pueden obtener directamente de un estudio de las energías de la desintegración alfa o beta. Para estos procesos y, sobre todo, para el último, el estudio de los tiempos de vida puede proporcionar también datos sobre los spins y las paridades de los estados excitados.

www.FreeLibros.me

energía de amarre del último nucleón en el núcleo, puede desintegrarse mediante una emisión gamma o por el proceso asociado de *conversión interna*, que veremos más adelante en esta misma sección. Para energías de excitación más altas que la energía de amarre del último nucleón, la desintegración por emisión de nucleones es posible y, por razones que explicaremos en la sección siguiente, al incrementarse la energía de excitación, la emisión del nucleón se convierte rápidamente en el modo predominante de desintegración. Como consecuencia de esto, la mayoría de los rayos gamma se emiten con energías inferiores a, aproximadamente, 6 u 8 Mev. En efecto, sus energías son generalmente mucho menores que esto, debido a que la desexcitación se produce frecuentemente en una *cascada* a través de una sucesión de estados de más baja energía, y no mediante la emisión de un rayo gamma simple que se lleve toda la energía de excitación. El límite más bajo para la energía de estos rayos gamma se establece por la mínima diferencia de energía entre los estados de energía nuclear bajos. Es del orden de 10^3 ev.

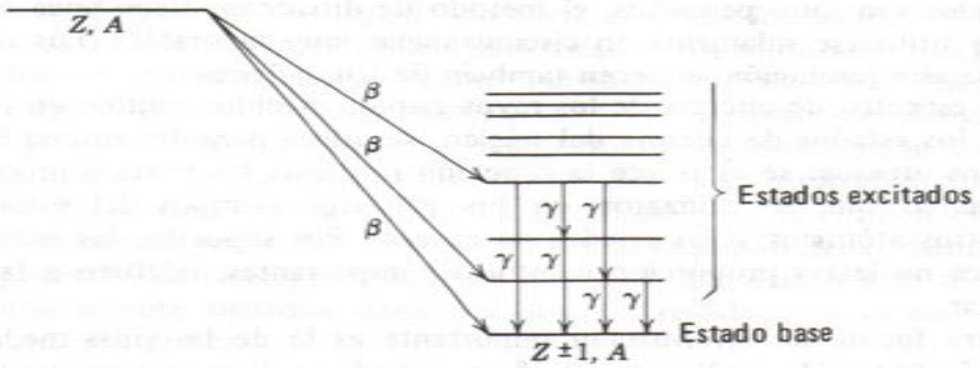

Figura 16-43. Excitación de un núcleo como resultado de la desintegración beta.

La mayoría de los métodos para medir las energías de rayos gamma o cuantos, en la gama de energías de 10^3 ev a 6 u 8 Mev y mayores, involucran la transferencia de su energía a electrones, por medio de los procesos fotoeléctricos y de Compton que se describen en el capítulo 14, o bien, a electrones y positrones, por medio de un proceso de producción de pares, que se describe en ese mismo capítulo. Las energías de estas partículas cargadas pueden medirse, a continuación, por medio de técnicas estándar. En el método quizá más usado, la energía se transfiere a electrones del cristal centelleante NaI, y las energías electrónicas se miden en el mismo cristal, midiendo la intensidad del pulso luminoso que emite, debido a centelleos producidos por los electrones. Para $h\nu < 0.3$ Mev, es más probable que toda la energía de un rayo gamma se transfiera a un solo electrón de átomos de I por el proceso fotoeléctrico. Para 0.3 Mev $< h\nu <$ 7 Mev, el efecto Compton es el más probable, y sólo una fracción de la energía del rayo gamma se transfiere a un electrón en una colisión. En esta gama, es necesario utilizar un cristal de NaI grande, con el fin de absorber toda la energía. Para $h\nu > 7$ Mev, predomina el proceso de producción de pares, y la energía del rayo gamma se divide entre

www.FreeLibros.me

la energía total de un electrón y un positrón. Para $h\nu$, todavía mayor, el alcance de estas partículas es demasiado grande para permitir que sus energías puedan medirse en un cristal NaI de tamaño conveniente y, en lugar de ello, se utiliza un dispositivo llamado espectrómetro de pares. En este aparato, se produce el par en una hoja metálica de algún material de Z alto, y las energías del electrón y el positrón emitidos se miden, analizando sus impulsos en un campo magnético. Los métodos que acabamos de describir tienen resoluciones de energía de rayos gamma de varios puntos por ciento, cuando mucho; pero existen también otros métodos de tipos diferentes y resoluciones mucho mejores. El que posee mejor resolución incluye la difracción de rayos gamma de una red cristalina de espaciamiento reticular conocido d. Aunque las longitudes de onda de rayos gamma $\lambda = c/\nu$ son hasta de varios órdenes de magnitud menores que d, la difracción puede utilizarse, haciendo que las distancias entre la fuente, la red cristalina y el detector sean muy grandes. Esto da un gran desplazamiento lineal, aunque el desplazamiento angular $\theta \sim \lambda/d$ sea pequeño. No obstante, puesto que todos los ángulos sólidos incluidos son muy pequeños, el método de difracción tiene poca eficiencia y puede utilizarse solamente en circunstancias muy favorables. Los otros métodos de alta resolución adolecen también de baja eficiencia.

El espectro de energía de los rayos gamma medido, emitido en transiciones entre los estados de energía del núcleo, se utiliza para determinar las energías de esos estados: se establece la conexión mediante los mismos procedimientos de tanteo que se utilizaron en los primeros tiempos del estudio de los espectros atómicos y los estados de energía. Por supuesto, las energías de los estados nucleares proporcionan informes importantes, relativos a la estructura nuclear.

Otra fuente de información importante es la de las vidas medias de esos estados. Si la vida media $\tau \gtrsim 10^{-10}$ seg, puede medirse cronometrando electrónicamente la desintegración entre el instante en que se excitó el estado (o sea, detectando la desintegración beta que condujo a la excitación) y el instante en que se desintegra (detectando el rayo gamma emitido). En casos extremos, se han encontrado vidas medias de hasta $\tau \sim 10^{8}$ seg. Todas las transiciones de rayos gamma con tiempos de vida que pueden medirse directamente se llaman *transiciones isoméricas*, para distinguirlas de las transiciones más típicas, que tienen vidas medias de $\tau \lesssim 10^{-10}$ seg, que no pueden medirse directamente. Sin embargo, si $\tau \lesssim 10^{-16}$ seg, puede determinarse indirectamente, midiendo la amplitud natural de la línea espectral del rayo gamma emitido en la transición y, a continuación, utilizando la relación (13–125). Esta técnica puede utilizarse para transiciones nucleares, sólo con la ayuda de un método ingenioso, llamado absorción de resonancia, que utiliza la absorción en un blanco, que contiene varias especies de núcleos, como espectrómetro de resolución extremadamente elevada para medir la amplitud de las líneas espectrales emitidas por una fuente, que contiene núcleos de las mismas especies. Se han observado vidas medias de desintegración gamma tan cortas como $\tau \sim 10^{-17}$ seg.

La enorme variación que se encuentra en las vidas medias para la desintegración gamma se debe, en parte, a la dependencia que tiene τ de la energía del rayo gamma emitido; sin embargo, una parte igualmente importante de

www.FreeLibros.me

esta variación se debe a la influencia de los spins y las paridades relativas de los estados nucleares inicial y final. Por consiguiente, el análisis de los valores de τ medidos experimentalmente, proporciona informes relativos a los spins y las paridades de los estados. Estas cantidades son tan importantes para caracterizar los estados como sus energías. El análisis se basa en la teoría de transiciones de desintegración gamma en los núcleos. Puesto que la teoría es básicamente la misma que la de las transiciones ópticas en átomos, que vimos en la sección 12 del capítulo 13, sería apropiado que el lector repasara esa sección.

En nuestro estudio de las transiciones ópticas en átomos, tomamos en consideración solamente las transiciones *dipolares eléctricas*, que se deben a oscilaciones periódicas en el momento dipolar eléctrico de la distribución de carga, y descubrimos que la rapidez de transición de tipo eléctrico para la emisión espontánea, es proporcional al "cuadrado del elemento de matriz del potencial de interacción para el momento asociado",* tomado entre estados involucrados en la transición. Un estudio absolutamente riguroso tomaría también en consideración el *cuadripolo eléctrico*, el *octupolo eléctrico*,** etc., transiciones que se deben a oscilaciones periódicas en los momentos asociados de la distribución de la carga, así como también el *dipolo magnético, el cuadripolo magnético, el octupolo magnético*,** etc., transiciones debidas a oscilaciones periódicas en los momentos asociados de la distribución de corriente (o de momentos magnéticos producidos por el spin electrónico). En cada caso, se descubriría que la rapidez de transición para la emisión espontánea por un momento particular, es proporcional al cuadrado del elemento de matriz del potencial de interacción para ese momento. No damos aquí todo el estudio completamente riguroso, debido a que, en realidad, no es necesario para las transiciones ópticas.

La justificación para despreciar todas las transiciones ópticas magnéticas es que la distribución de corriente es $\rho v/c$, en donde v es la velocidad característica de las cargas en movimiento, y es menor que la distribución de carga ρ por el factor v/c que, por lo común, es de $\sim 10^{-3}$. Como resultado, los momentos magnéticos son todos ellos menores que los momentos eléctricos correspondientes, de acuerdo con este factor (los momentos magnéticos producidos por el spin electrónico son del mismo orden que los producidos por la distribución de la corriente). Así, el cuadrado del elemento de matriz del potencial de interacción y, por consiguiente, el índice de transición es menor para cada uno de los momentos magnéticos que para los momentos eléctricos correspondientes, por un factor de $(v/c)^2 \sim 10^{-6}$.

* La definición no es muy precisa, pero la usamos para abreviar. La rapidez de transición para la emisión espontánea es proporcional a la rapidez de transición de la absorción e indica (13–77) que la última cantidad es realmente proporcional a una suma de términos, cada uno de los cuales es el elemento de matriz del potencial de interacción (perturbación) para una componente del momento dipolar eléctrico multiplicada por su complejo conjugado.

** Excepción hecha de un proceso especial en que interviene todo el átomo, no hay transiciones de monopolo eléctrico, ya que la conservación de la carga nuclear requiere que el momento sea constante; y no hay transiciones monopolares magnéticas, porque el momento asociado es cero.

www.FreeLibros.me

La justificación para despreciar las transiciones ópticas de cuadripolo eléctrico, octupolo eléctrico, etc., es que el elemento de matriz del potencial de interacción para cada momento sucesivamente mayor de la distribución de la carga, es menor que el elemento de matriz del momento precedente, por un factor $2\pi R/\lambda$, en donde R es el radio de la distribución de la carga y λ es la longitud de onda de la radiación. Este factor es también, por lo común, $\sim 10^{-3}$. El elemento de matriz del potencial de interacción para cada momento sucesivamente superior de la distribución de la corriente, disminuye de acuerdo con ese mismo factor. Dicho factor se debe a que el potencial de interacción de un momento dipolar en un campo espacialmente variable incluye productos del campo por distancias del orden de R, el potencial de interacción de un momento cuadripolar incluye productos de las primeras derivadas espaciales del campo por distancias del orden de R^2, el potencial de interacción de un momento octupolar incluye productos de las segundas derivadas espaciales del campo por distancias del orden de R^3, etc.* Sin embargo, en un campo que sea una función sinusoidal de la posición con longitud de onda λ, tal como sen $(2\pi x/\lambda)$, cada derivada espacial introduce un

* La ecuación (13–65) muestra que esto es cierto para el potencial de interacción de momento dipolar eléctrico, y es fácil verificarlo para los momentos eléctricos superiores. Sea el potencial eléctrico externo $V(x, y, z)$ y la distribución de carga $\sum q_j$, en donde (x_j, y_j, z_j) son las coordenadas de la carga q_j y en donde la suma se efectúa sobre todas las cargas. Entonces, la energía total de la distribución es $\sum q_j V(x_j, y_j, z_j)$. Haga un desarrollo de Taylor de $V(x, y, z)$ alrededor del origen (0, 0, 0) de la distribución de carga. Esto da

$$V(x, y, z) = [V_0] + \left[\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)_0 x + \left(\frac{\partial V}{\partial y}\right)_0 y + \left(\frac{\partial V}{\partial z}\right)_0 z\right]$$
$$+ \left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right)_0 x^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial y^2}\right)_0 y^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2}\right)_0 z^2\right.$$
$$\left. + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x\,\partial y}\right)_0 xy + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x\,\partial z}\right)_0 xz + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial y\,\partial z}\right)_0 yz\right] + \cdots$$

Use esto para evaluar la energía total, que es:

$$\sum_j q_j V(x_j, y_j, z_j) = \left[V_0 \sum_j q_j\right] + \left[(-E_x)_0 \sum_j q_j x_j + (-E_y)_0 \sum_j q_j y_j + (-E_z)_0 \sum_j q_j z_j\right]$$
$$+ \left[\frac{1}{2}\left(-\frac{\partial E_x}{\partial x}\right)_0 \sum_j q_j x_j^2 + \frac{1}{2}\left(-\frac{\partial E_y}{\partial y}\right)_0 \sum_j q_j y_j^2 + \frac{1}{2}\left(-\frac{\partial E_z}{\partial z}\right)_0 \sum_j q_j z_j^2\right.$$
$$\left. + \left(-\frac{\partial E_y}{\partial x}\right)_0 \sum_j q_j y_j x_j + \left(-\frac{\partial E_z}{\partial x}\right)_0 \sum_j q_j z_j x_j + \left(-\frac{\partial E_z}{\partial y}\right)_0 \sum_j q_j z_j y_j\right] + \cdots$$

en donde empleamos las relaciones $E_x = -\partial V/\partial x$, $E_y = -\partial V/\partial y$, $E_z = -\partial V/\partial z$ para introducir las componentes del campo eléctrico. El primer paréntesis rectangular es el potencial eléctrico de interacción monopolar, y la suma que contiene es la carga total; el segundo paréntesis rectangular es el potencial eléctrico de interacción dipolar y las tres sumas que contiene son las componentes del momento eléctrico dipolar. El tercer paréntesis rectangular es el potencial eléctrico de interacción cuadripolar y las seis sumas que contiene son las componentes del momento eléctrico cuadripolar. Esto comprueba nuestra teoría.

www.FreeLibros.me

factor de $2\pi/\lambda$. Por lo tanto, el potencial de interacción de cada momento sucesivamente mayor, contiene un factor extra de $2\pi R/\lambda$. El cuadrado del elemento de matriz y, por lo tanto, la rapidez de transición, es menor para transiciones de cuadripolo eléctrico que para transiciones de dipolo eléctrico, por un factor de $(2\pi R/\lambda)^2 \sim 10^{-6}$, y la rapidez de transición para momentos mayores son menores, por potencias pares sucesivamente crecientes de este factor. Todas las transiciones ópticas en los átomos, aparte de las transiciones de dipolo eléctrico, tienen rapidez de transición muy pequeña o vidas medias muy largas. Estas transiciones pueden despreciarse, debido a que en las vidas medias grandes, el átomo se desexcitará casi siempre por medio de colisiones o algún otro proceso no radioactivo, antes de tener probabilidad de producir una irradiación.

Estas simplificaciones no pueden obtenerse para transiciones de desintegración gamma en los núcleos. En primer lugar, $(v/c)^2 \sim 10^{-2}$ y $(2\pi R/\lambda)^2 \sim 10^{-4}$, en el caso típico en el que $A = 200$, y $h\nu = 1$ Mev. Por consiguiente, el factor de supresión de la rapidez para las transiciones magnéticas no es tan pequeño, como tampoco lo es el de supresión de la rapidez para las transiciones asociadas con los momentos superiores. Lo que es todavía más importante es el hecho de que no hay colisiones entre núcleos ni otros procesos no radioactivos (excepto la conversión interna), si la energía de excitación es menor que la energía de amarre del nucleón. Así, todos los estados con energía de excitación menor que la energía de amarre del nucleón.

También es interesante encontrar la relación entre las componentes del momento eléctrico cuadripolar y la cantidad Q definida por la ecuación (16–38). En el caso al que se aplica esta definición, hay un eje de simetría a lo largo del eje z, cada una de las tres últimas componentes se anula y $\sum_j q_j x_j^2 = \sum_j q_j y_j^2$. Entonces, el potencial de interacción cuadrupolar es:

$$\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial y^2}\right)_0\right]\sum_j q_j x_j^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2}\right)_0 \sum_j q_j z_j^2$$

en donde hemos cambiado nuevamente al potencial eléctrico externo V; pero, para un potencial externo, el teorema de electrostática de Laplace requiere que

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = 0$$

De manera que el potencial eléctrico de interacción cuadripolar se puede expresar como

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2}\right)_0 \left[\sum_j q_j z_j^2 - \sum_j q_j x_j^2\right] = \frac{1}{4}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2}\right)_0 Q$$

en donde

$$Q \equiv \sum_j q_j[2z_j^2 - 2x_j^2] = \sum_j q_j[2z_j^2 - x_j^2 - y_j^2]$$
$$= \sum_j q_j[3z_j^2 - (x_j^2 + y_j^2 + z_j^2)]$$

La ecuación (16–38) se obtiene haciendo que la suma pase a una integral y expresando q_j en unidades de cargas de protón.

www.FreeLibros.me

deben desintegrarse por medio de la emisión de rayos gamma (o la conversión interna), incluso si la vida media para la desintegración es extremadamente grande.

Aunque es toda una tarea, que evitaremos, incluso el escribir expresiones para elementos de matriz de momentos eléctricos y magnéticos superiores, la dificultad real para evaluar estos elementos de matriz se debe a la falta de informes relativos a las funciones propias nucleares que contienen. Esta es la misma dificultad que se presenta para evaluar los elementos de matriz para transiciones de desintegración beta. No obstante, si se da por sentado algún modelo nuclear, pueden encontrarse las funciones propias para este modelo, evaluarse los elementos de matriz y obtenerse predicciones para la rapidez de transición de desintegración gamma para la emisión espontánea. Por supuesto, la exactitud de estas predicciones sólo será tan buena como lo sea la exactitud del modelo. Utilizando el modelo de capas, con un núcleo de radio R, Blatt y Weisskopf obtuvieron las expresiones siguientes para valores aproximados de la rapidez de transición S para emisión espontánea en transiciones eléctricas y magnéticas.

Para transiciones eléctricas:

$$S \simeq S_0 \frac{4.4(L+1)}{L[1\cdot 3\cdot 5\cdots(2L+1)]^2}\left(\frac{3}{L+3}\right)^2\left(\frac{h\nu}{E_0}\right)^{2L+1}\left(\frac{R}{R_0}\right)^{2L} \tag{16–82}$$

Para transiciones magnéticas:

$$S \simeq S_0 \frac{1.9(L+1)}{L[1\cdot 3\cdot 5\cdots(2L+1)]^2}\left(\frac{3}{L+3}\right)^2\left(\frac{h\nu}{E_0}\right)^{2L+1}\left(\frac{R}{R_0}\right)^{2L-2} \tag{16–82'}$$

en donde $L = 1$ para transiciones dipolares, $L = 2$, para transiciones cuadripolares, $L = 3$ para transiciones octupolares, etc., y donde:

$$S_0 = 10^{21}\ \text{seg}^{-1}$$
$$R_0 = 10^{-13}\ \text{cm}$$
$$E_0 = 197\ \text{Mev}$$

siendo E_0 la energía de un rayo gamma para el que $2\pi R_0/\lambda = 1$. En la tabla 16–3 se dan valores de $\tau = 1/S$, en segundos, calculados a partir de estas ecuaciones para varios valores de $h\nu$, y para $R = 7 \times 10^{-13}$ cm correspondiente a $R = 1.2A^{1/3} \times 10^{-13}$ cm con $A = 200$. Si un estado puede sólo decaer mediante la transición gamma indicada, su vida media es igual a esta τ. Observe que las magnitudes relativas de S para transiciones eléctricas y magnéticas, con cualquier valor común de L, así como las magnitudes relativas de S para transiciones eléctricas con diversos valores de L, y las magnitudes relativas de S para transiciones magnéticas con varios valores de L, concuerdan con las implicaciones del párrafo anterior. Observe también que para cada valor de L, la dependencia que tiene S de la energía $h\nu$ del rayo gamma emitido, está de acuerdo con las implicaciones de este párrafo, puesto que $\lambda = c/\nu$. Hemos visto

www.FreeLibros.me

antes esta dependencia de la energía, en el caso de las transiciones dipolares eléctricas en átomos (el factor ν^3 en la ecuación 13–99).

TABLA 16–3
Los recíprocos de la rapidez de transición del modelo de capas para la desintegración gamma

Transición	L	10 Mev	1 Mev	0.1 Mev	0.01 Mev
Dipolar Elec.	1	4×10^{-19}	6×10^{-16}	4×10^{-13}	4×10^{-10}
Dipolar Mag.	1	4×10^{-17}	6×10^{-14}	4×10^{-11}	4×10^{-8}
Cuadrupolar Elec.	2	1×10^{-16}	1×10^{-11}	1×10^{-6}	2×10^{-2}
Cuadrupolar Mag.	2	1×10^{-14}	1×10^{-9}	1×10^{-4}	2×10^{0}
Octupolar Elec.	3	1×10^{-13}	1×10^{-6}	1×10^{1}	1×10^{8}
Octupolar Mag.	3	1×10^{-11}	1×10^{-4}	1×10^{3}	1×10^{10}
Hexapolar Elec.	4	1×10^{-10}	1×10^{-1}	1×10^{8}	1×10^{17}
Hexapolar Mag.	4	1×10^{-8}	1×10^{1}	1×10^{10}	1×10^{19}

Puesto que la transición dipolar eléctrica tiene la rapidez de transición más elevado para un valor dado de $h\nu$, se plantea inmediatamente la pregunta: ¿por qué no todas las desintegraciones de rayos gamma proceden por medio de una transición dipolar eléctrica? La respuesta es que en una desintegración gamma entre estados iniciales y finales de números cuánticos dados de spin i_i e i_f, y paridades dadas, sólo ciertos tipos de transiciones son permisibles de acuerdo con *las reglas de selección.*

Para transiciones eléctricas:

$$|i_i - i_f| \equiv \Delta i \leqslant L \leqslant i_i + i_f \quad \text{(pero no } i_i = 0 \rightarrow i_f = 0) \qquad (16\text{–}83)$$

La paridad nuclear debe cambiar si L es impar y no cambiará si L es par.

Para transiciones magnéticas:

$$|i_i - i_f| \equiv \Delta i \leqslant L \leqslant i_i + i_f \quad \text{(pero no } i_i = 0 \rightarrow i_f = 0) \qquad (16\text{–}83')$$

La paridad nuclear debe cambiar si L es par, y no cambiará si L es impar.

La desintegración gamma se llevará a cabo siempre por medio de la transición permitida que tenga la mayor rapidez de transición. *Debido a la fuerte dependencia que tiene S de L, esto significa una transición con* $L = \Delta i$. Si este valor de L es impar, será una transición eléctrica, si el estado inicial y el final son de paridad opuesta y una transición magnética si estos estados son de la misma paridad. Si este valor de L es par, será una transición eléctrica, si esos estados son de la misma paridad, y magnética, si son de paridades opuestas.

Como es el caso siempre, las reglas de selección para las diversas transiciones proceden de la forma de los elementos de matriz de los potenciales de interacción que inducen dichas transiciones. La parte de las reglas que rela-

www.FreeLibros.me

ciona los valores posibles de L con los de i_i e i_f, puede comprenderse con mayor facilidad, si tomamos en consideración que todos esos elementos de matriz deben ser tales que conserven un impulso angular en la transición y que los rayos gamma, por consiguiente, deben llevar impulso angular, así como también energía. En estudios avanzados de este tema se ha demostrado que, en las transiciones eléctricas y magnéticas asociadas con un cierto valor de L, el número cuántico que especifica la magnitud del momento angular portado por el rayo gamma es L y, asimismo, que un rayo gamma no puede llevar un impulso angular cero. Dando por sentadas estas afirmaciones, y escribiendo la primera parte de las reglas de selección como

$$L = |i_i - i_f|, |i_i - i_f| + 1, \ldots, i_i + i_f \qquad \text{(pero no } i_i = i_f = 0)$$

vemos, mediante la comparación con la expresión (13–40), que esta parte representa simplemente los requisitos de conservación del impulso angular.

Para comprender la segunda parte de las reglas de selección, debemos escribir realmente los elementos de matriz para algunos potenciales de interacción. Hacemos esto para los casos más simples, los elementos de matriz del potencial de interacción dipolar eléctrica y magnética, pasando por alto el movimiento del CM del núcleo. Estos son, respectivamente:

$$\mathbf{E} \cdot \int \psi_f^* \sum_j a_j \mathbf{r}_j \psi_i \, d\tau \tag{16–84}$$

$$\mathbf{H} \cdot \int \psi_f^* \sum_j (b_j \mathbf{L}_j + c_j \mathbf{S}_j) \psi_i \, d\tau \tag{16–84'}$$

El parámetro a_j, que es $+e$, para protones, y cero para neutrones, relaciona las posiciones $\mathbf{r}_j$ de los nucleones con sus momentos dipolares eléctricos; los parámetros b_j y c_j, que son los factores g orbital y de spin para protones y neutrones, relacionan los impulsos angulares orbital y de spin $\mathbf{L}_j$ y $\mathbf{S}_j$ de los nucleones con sus momentos dipolares magnéticos. Las sumas, tomadas sobre todos los nucleones de los núcleos, dan los momentos dipolares magnético y eléctrico nucleares totales.* Los elementos de matriz de estos potenciales de interacción dipolar, contienen inicialmente dentro de los signos de las integrales, el producto escalar de los momentos con los campos eléctrico y magnético $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$. No obstante, ambos campos tienen una dependencia espacial despreciable sobre el núcleo, en lo que concierne a los momentos dipolares, y pueden factorizarse como factores. Ahora bien, como mencionamos en la sección anterior, $\mathbf{r}_j$ es un vector polar y $\mathbf{L}_j$ y $\mathbf{S}_j$ son vectores axiles. Si examinamos las leyes de Coulomb y Ampere, el lector podrá verificar inmediatamente que $\mathbf{E}$ es un vector polar y $\mathbf{H}$, un vector axil. Así, el elemento de matriz del potencial de interacción dipolar eléctrica es un producto escalar de dos vectores polares, el elemento de matriz del potencial de interacción dipolar magnética es un producto de punto de dos vectores axiles y podemos ver que ambos son escalares, de acuerdo con lo dicho en la sección anterior. Vemos también que la expresión (16–84) se anula en forma idénticamente, a

* El efecto del movimiento del CM es aumentar la contribución de los neutrones a estos elementos de matriz.

www.FreeLibros.me

menos que ψ_i y ψ_f sean de paridad opuesta, debido a que el vector polar $a_j\mathbf{r}_j$ es de paridad impar y, si el integrando completo es de paridad impar, la contribución a la integral de cada punto (x, y, z) se cancelará debido a la contribución del punto $(-x, -y, -z)$. Vemos, además, que la expresión (16–84′) se anula idénticamente, a menos que ψ_i y ψ_f sean de la misma paridad, ya que el vector axil $b_j\mathbf{L}_j + c_j\mathbf{S}_j$ es de paridad par. Estas dos conclusiones van de acuerdo con la segunda parte de las reglas de selección para $L = 1$. Supongamos ahora que evaluamos el producto escalar en el elemento de matriz del potencial de interacción dipolar eléctrica (16–84). Esto da la suma de una integral que contiene x_j, en el integrando, una integral que contiene y_j en el integrando, y otra que contiene en el integrando z_j.* Como sabemos, todos los términos x_j, y_j, z_j son de paridad impar. El elemento de matriz del potencial de interacción cuadripolar eléctrica consiste de un conjunto similar de integrales, cada una de las cuales contiene un término como x_j^2, x_jy_j, y_j^2, etc., en el integrando.** Puesto que cada uno de estos términos es de paridad par, se sigue que todas las integrales se anulan idénticamente, a menos que ψ_i y ψ_f sean de la misma paridad. Esto va de acuerdo con la regla de selección citada en la expresión (16–83) para $L = 2$. Para $L = 3$, las integrales contienen términos de paridad impar, tales como x_j^3, $x_jy_jz_j$, etc., y esto conduce a las reglas de selección citadas en la expresión (16–83) para $L = 3$. Suceden cosas similares en las integrales que contienen elementos de matriz para transición magnética y conducen a las reglas de selección mencionadas en la ecuación (16–83′) para los valores más elevados de L.

En muchas transiciones de desintegración gamma, sobre todo aquellas en las que L es grande y $h\nu$ pequeño, varios grupos de electrones monoenergéticos se emiten junto con los rayos gamma. Se ha determinado empíricamente que las energías E de los grupos están relacionadas con la energía $h\nu$ de los rayos gamma, mediante la ecuación

$$E = h\nu - W \tag{16–85}$$

en donde el valor de W para el grupo más importante, es igual a la energía de amarre de un electrón de la capa K del átomo en desintegración gamma, y los valores de W para los otros grupos son iguales a las energías de amarre de los electrones en las capas L, M, N, etc. Esto hace que resulte evidente que los diversos grupos de electrones se emiten desde varias capas del átomo, de tal modo que la energía de uno de esos electrones, al abandonar el átomo, es igual a la energía de los rayos gamma menos su energía de amarre. La similitud entre la expresión (16–85) y la ecuación del efecto fotoeléctrico (3–8), sugirió a sus descubridores, Ellis y Meitner (1921), que los electrones se emitan por medio de un proceso de *conversión interna*, en el que un rayo gamma emitido entrega toda su energía a un electrón atómico, mediante el efecto fotoeléctrico, antes de abandonar el átomo.

* En esta forma, el elemento de matriz del potencial de interacción (16–84), veces su conjugado complejo, se puede identificar fácilmente con la expresión (13–77), que derivamos para la velocidad de transición del dipolo eléctrico de los átomos.

** Vea la nota al pie de la página 632.

www.FreeLibros.me

No obstante, los cálculos de Taylor y Mott (1933) demuestran que la probabilidad para la conversión interna por el efecto fotoeléctrico es muy pequeña, en comparación a la probabilidad para conversión interna mediante la transferencia directa de energía del núcleo al electrón, a través de la interacción de Coulomb entre los dos. En este proceso, el núcleo se desexcita y el electrón es emitido. Excepto por las diferencias en el potencial de interacción y en las funciones propias inicial y final para el sistema, los cálculos son muy similares a los involucrados en la teoría de desintegración beta. En años recientes, Rose utilizó este cuadro de transferencia directa de energía para hacer varios cálculos de la razón de la probabilidad para emitir un electrón desde una capa dada a la probabilidad para la emisión de un rayo gamma. Esta relación se llama *coeficiente de conversión interna*, α. Los cálculos de α deben ser muy exactos, debido a que los factores que incluyen a las funciones propias nucleares inicial y final se cancelan entre sí, dejando sólo factores que involucran el potencial de interacción de Coulomb, bien conocido, y las igualmente bien conocidas funciones propias para el electron ligado inicial y el electrón libre final. La figura 16–44 muestra α_K, el valor de α para la emisión de un electrón de la capa K, calculado para el átomo ^{40}Zr. Debido a que la probabilidad de conversión interna aumenta, conforme lo hace la función propia del electrón ligado en el núcleo, α_K se hace rápidamente mayor, a medida que Z aumenta. Por la misma razón, para valores dados de Z y $h\nu$, α_K es habitualmente mayor que α_L, ó α_M, ó α_N, etc. Además, para valores dados de Z y $h\nu$, la cantidad

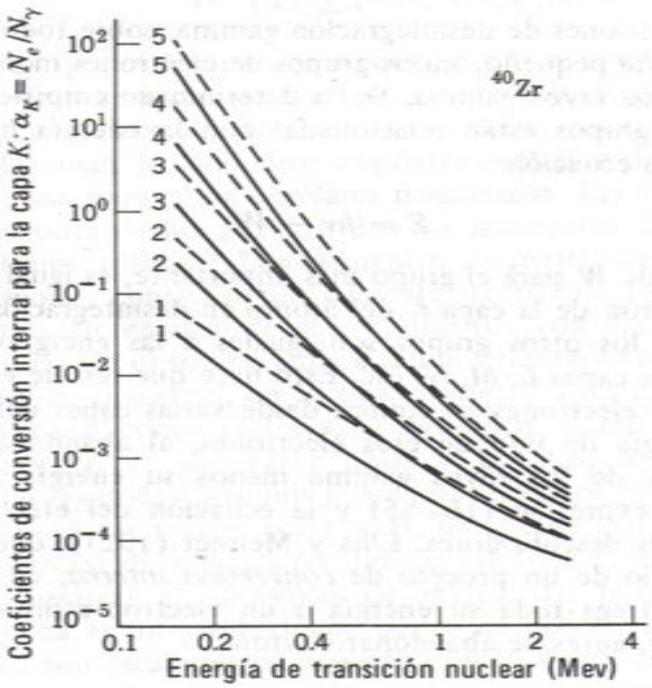

Figura 16-44. Coeficientes de conversión interna de la capa K. Las curvas continuas son transiciones eléctricas; las curvas en raya, transiciones magnéticas. Tomado de R. D. Evans, *The Atomic Nucleus*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

www.FreeLibros.me

α_K/α_L depende de manera muy sensible del carácter de la transición gamma, es decir, del valor de L y de si la transición es eléctrica o magnética. En esa forma, las medidas exactas de α_K/α_L, que son relativamente fáciles de tomar, proporcionan un método muy bueno de determinación del carácter de una transición gamma y, por consiguiente, los spins y las paridades relativas de los estados nucleares involucrados en la transición.

La conversión interna no compite con la emisión de rayos gamma en el sentido de que un proceso inhibe al otro. Los procesos son independientes y las probabilidades para ambos son aditivas. Así, la rapidez total S_t para las transiciones entre los estados nucleares inicial y final, es la suma de la rapidez de transición S_γ para la emisión de rayos gamma, más la rapidez de transición S_{ic} para la conversión interna. Esto es,

$$S_t = S_\gamma + S_{ic} \tag{16–86}$$

Esto puede escribirse en términos de los coeficientes de conversión interna, puesto que

$$S_{ic} = (\alpha_K + \alpha_L + \alpha_M + \cdots)S_\gamma \equiv \alpha_t S_\gamma$$

en donde α_t es el coeficiente total de conversión interna. Por tanto,

$$S_t = S_\gamma(1 + \alpha_t)$$

Si el estado inicial puede decaer sólo a un estado final simple, como sucede habitualmente para las transiciones isoméricas, la ecuación (13–118) demuestra que el tiempo de vida τ del estado inicial es

$$\tau = \frac{1}{S_t} = \frac{1}{S_\gamma(1 + \alpha_t)} \tag{16–87}$$

puesto que α_t se puede calcular con exactitud, los valores experimentales de τ pueden compararse con los predichos por la S_γ de las expresiones (16–82) y (16–82′). La figura 16–45 muestra una comparación similar para un grupo de transiciones isoméricas que se han identificado como magnéticas de orden dieciséis ($\Delta i = 4$, cambio de paridad). Los puntos son experimentales y la curva es teórica. Para estas transiciones, vemos que las predicciones de las expresiones (16–82) y (16–82′), que se basan en el modelo de capas, son razonablemente exactas; pero la inspección de la figura 16–23 demostrará que en el modelo de capas todos los $\Delta i = 4$, y las transiciones de cambio de paridad se encuentran entre estados muy cercanos a los llenos y con números mágicos,* y es aquí precisamente donde el modelo debe ser exacto. Para transiciones de carácter diferente, las predicciones del modelo de capas no son tan exactas.

Sin embargo, el modelo de capas no explica una característica sorprendente de las transiciones gamma para estados nucleares de energía de excitación de

* La paridad de un estado del modelo de capa es par, si l es par (vea la ecuación 13–112). Un ejemplo de una transición con cambio de paridad y con $\Delta i = 4$, sería la transición entre $5g_{9/2}$ y $3p_{1/2}$.

www.FreeLibros.me

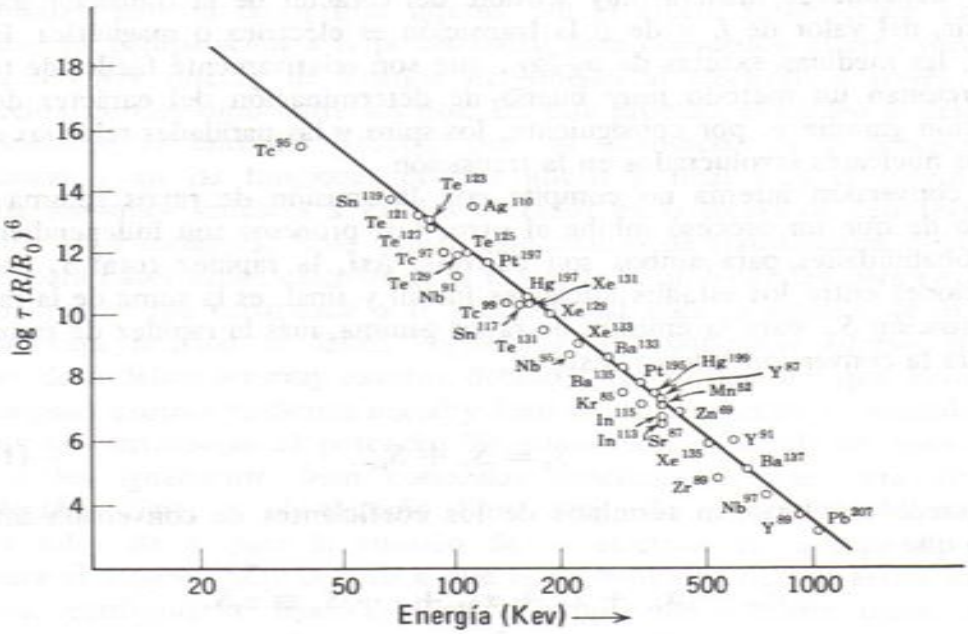

Figura 16-45. Vidas medias para un grupo de transiciones magnéticas de orden dieciséis. Tomado de M. Goldhaber y A. Sunyar, *Phys. Rev.*, 83, 906 (1951).

varios Mev o menos. En las transiciones a partir de estos estados, que son los excitados por la desintegración beta, las transiciones dipolares eléctricas no se observan casi nunca. Las reglas de selección muestran que las transiciones dipolares eléctricas requieren un cambio de paridad con $\Delta i = 1$. Sin embargo, la figura 16–23 muestra que hay una diferencia de energía particularmente grande entre cualesquiera dos estados para los que las transiciones satisfacen esta condición.

Esta energía es casi siempre mayor que varios Mev y, por esto, es energéticamente imposible que un estado que pueda decaer por medio de una transición dipolar eléctrica se excite por desintegración beta. Sin embargo, cuando se encuentra suficiente energía de excitación disponible, se descubren transiciones dipolares eléctricas y tienen índices de transición que no van en desacuerdo con la teoría.

13. Propiedades de los estados excitados

Además de la información relativa a los estados excitados de los núcleos, obtenida a partir del estudio de la conversión interna, la emisión de rayos gamma y las desintegraciones alfa y beta de los estados excitados, se obtienen muchos datos a partir del estudio de las reacciones nucleares. Tomemos en consideración el caso general (16–16), que se escribe

$$a + A \rightarrow B + b$$

www.FreeLibros.me

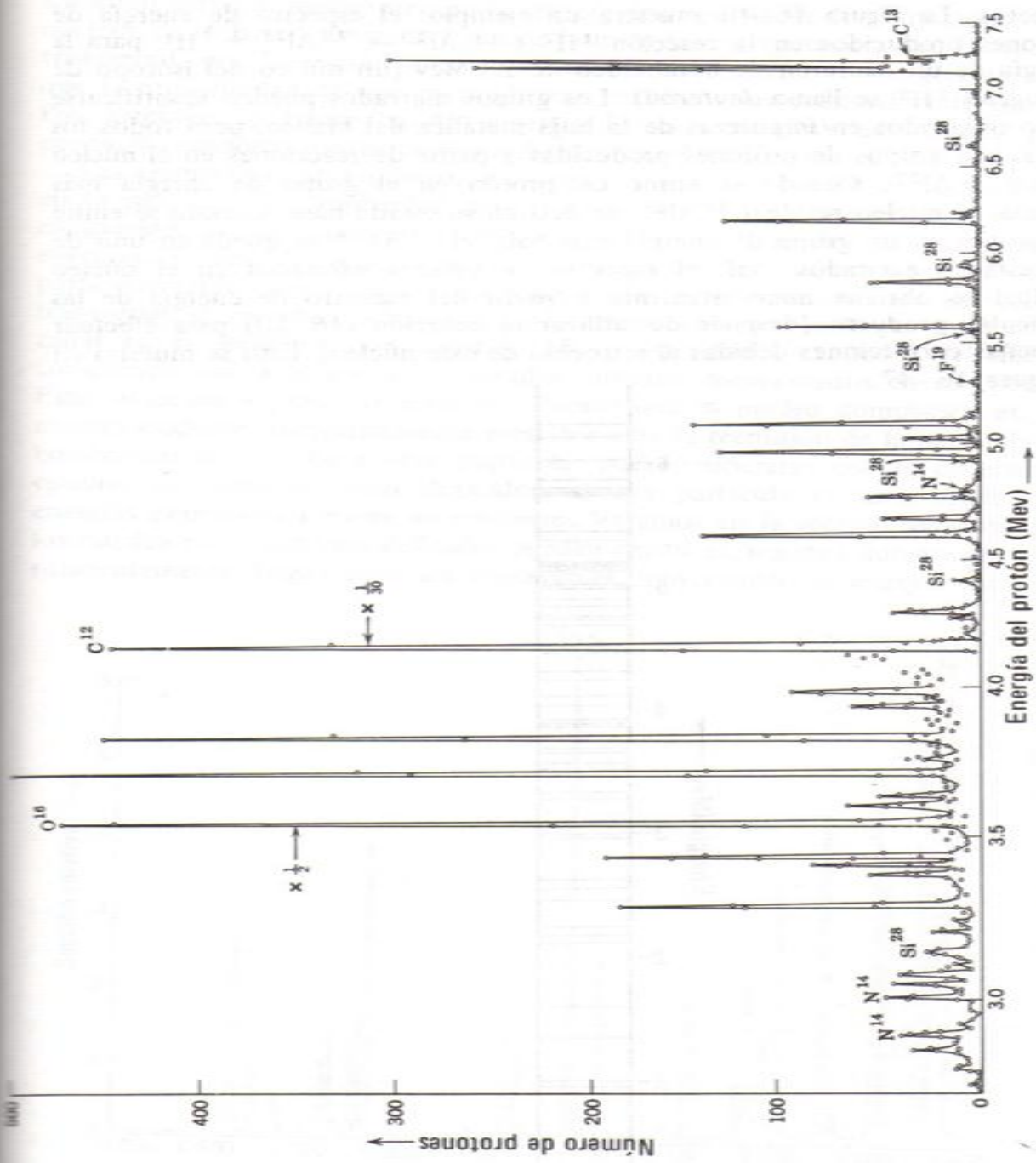

Figura 16-46. Espectro de energías de protones emitidos en el bombardeo de aluminio por deuterones de 2, 1 Mev. Tomado por H. A. Enge, W. W. Buechner y A. Sperduto, *Phys. Rev.*, 88, 961 (1952).

www.FreeLibros.me

Si se mantiene constante la energía de las partículas de bombardeo, *a*, y se mide la distribución de la energía de las partículas producto, *b*, se descubre, por lo común, que esta distribución de energía consiste de varios grupos discretos. La figura 16–46 muestra un ejemplo: el espectro de energía de protones producidos en la reacción $^{1}H^{2} + {}^{13}Al^{27} \rightarrow {}^{13}Al^{28} + {}^{1}H^{1}$ para la energía de un deuterón de bombardeo de 2.1 Mev (un núcleo del isótopo de hidrógeno $^{1}H^{2}$ se llama *deuterón*). Los grupos marcados pueden identificarse como originados en impurezas de la hoja metálica del blanco; pero todos los demás son grupos de protones producidas a partir de reacciones en el núcleo blanco $^{13}Al^{27}$. Cuando se emite un protón en el grupo de energía más elevada, el núcleo residual $^{13}Al^{28}$ se deja en su estado base. Cuando se emite un protón en un grupo de energía más baja, el $^{13}Al^{28}$ se queda en uno de sus estados excitados. Así, el espectro de estados excitados en el núcleo residual se obtiene inmediatamente a partir del espectro de energía de las partículas producto [después de utilizar la ecuación (16–20) para efectuar pequeñas correcciones debidas al retroceso de este núcleo]. Esto se muestra en la figura 16–47.

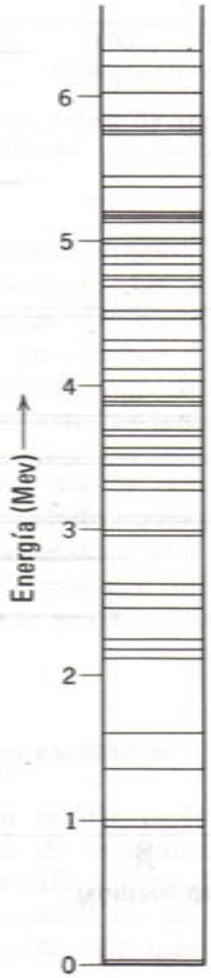

Figura 16-47. Niveles de energía del núcleo $^{13}Al^{28}$. Tomado de H. A. Enge, W. W. Buechner y A. Sperduto, *Phys. Rev.*, 88, 961 (1952).

www.FreeLibros.me

Pueden localizarse también estados excitados, midiendo la sección transversal para las reacciones entre una partícula de bombardeo y un núcleo blanco, haciendo variar al mismo tiempo la energía de la partícula de bombardeo. Con núcleos de A baja y energías bajas de bombardeo, se encuentra que la sección transversal, por lo común, tiene *resonancias*, o bien, ciertas energías para las que la probabilidad de que se produzcan reacciones es desusualmente grande. Por ejemplo, la figura 16–48 muestra la sección transversal relativa para producir reacciones mediante el bombardeo de $^{13}Al^{27}$ con $^{1}H^{1}$.

Las resonancias se producen a energías que excitan al sistema consistente en la partícula de bombardeo más el núcleo de blanco, que se llama *núcleo compuesto*, a uno de sus estados excitados. Esto se debe a que, a esas energías, la función propia para la partícula de bombardeo tiene un valor particularmente grande en la región del núcleo y, por consiguiente, su sección transversal se incrementa mucho. Estas resonancias son análogas a las analizadas en la sección 6 del capítulo 15, y los estados excitados del núcleo compuesto son análogos a los estados virtuales mencionados en ese punto. Esta situación es muy interesante. Puesto que el núcleo compuesto es, de manera evidente, energéticamente inestable ante la reemisión de la partícula de bombardeo o de alguna otra partícula, podría esperarse que se observarán estados excitados no bien definidos, si una partícula no está ligada, sus energías permitidas forman un continuo. Veremos en la sección siguiente que los estados excitados bien definidos pueden existir en realidad durante tiempos suficientemente largos para ser observables, aun cuando la energía total de

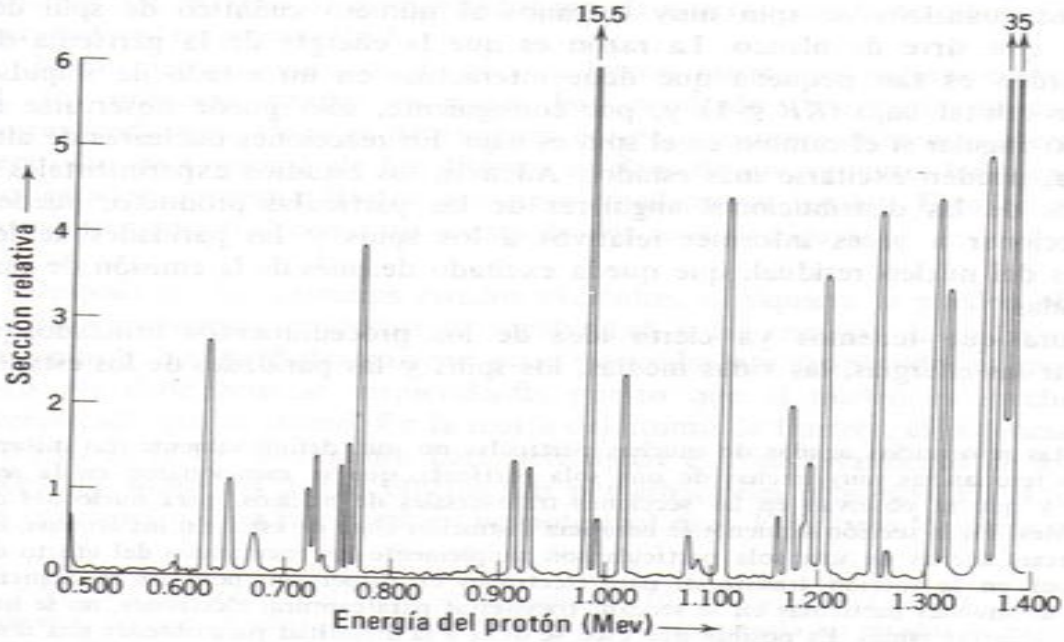

Figura 16-48. Resonancias en la sección transversal para producir reacciones mediante el bombardeo del aluminio con protones. Tomado de K. J. Brostrom, T. Huus y R. Tangen, *Phys. Rev.*, 71, 661 (1947).

www.FreeLibros.me

excitación sea suficientemente grande para liberar una partícula, si se concentra toda ella en dicha partícula, debido a que la energía, por lo común, se divide entre muchas partículas del núcleo compuesto y, asimismo, porque la reflexión en la superficie nuclear inhibe la emisión de la partícula.*

Los datos de la figura 16–48 localizan estados del núcleo compuesto $^{14}Si^{28}$ en una gama de energías de excitación que se inicia en 0.5 Mev por encima de la energía de amarre de 11.59 Mev de un protón a dicho núcleo. No pueden utilizarse protones de energía más baja, porque tienen una probabilidad despreciable de atravesar la barrera de Coulomb del núcleo blanco. Sin embargo, en reacciones inducidas por estados de neutrones del núcleo compuesto, pueden localizarse en todas partes, hasta energías de excitación iguales a la energía de amarre del neutrón a ese núcleo, que, por lo común, es de 6 a 8 Mev.

Midiendo la anchura Γ de las resonancias observadas en estos experimentos, las vidas medias de los estados pueden obtenerse a partir de la relación

$$\tau = \hbar/\Gamma \tag{16–88}$$

Esta relación es la misma que la (13–125), que se aplica a las anchuras y las vidas medias de estados excitados por la absorción resonante de cuantos (incluyendo rayos gamma). Su aplicabilidad a estados excitados mediante la absorción resonante de partículas, ha sido justificada por Breit y Wigner. Esto se verá en la sección siguiente.

Para experimentos de protón a neutrón, utilizando energías de bombardeo menores que varios Mev, sólo se excitarán estados del núcleo compuesto con números cuánticos de spin muy cercanos al número cuántico de spin del núcleo que sirve de blanco. La razón es que la energía de la partícula de bombardeo es tan pequeña que debe interactuar en un estado de impulso angular orbital bajo ($KR \lesssim 1$) y, por consiguiente, sólo puede observarse el impulso angular si el cambio en el spin es bajo. En reacciones nucleares de alta energía, pueden excitarse más estados. Además, los estudios experimentales y teóricos de las distribuciones angulares de las partículas producto, pueden proporcionar a veces informes relativos a los spins y las paridades de los estados del núcleo residual, que queda excitado después de la emisión de esas partículas.

Ahora que tenemos ya cierta idea de los procedimientos utilizados al estudiar las energías, las vidas medias, los spins y las paridades de los estados

* Estas resonancias agudas de muchas partículas no son, definitivamente, las mismas que las resonancias muy anchas de una sola partícula, que se mencionaron en la sección 3 y que se observan en las secciones transversales de núcleos, para nucleones de varios Mev. En la sección siguiente se hará una distinción clara de esto. En los átomos, las resonancias anchas de una sola partícula son simplemente las resonancias del efecto de Ramsauer en la sección transversal para electrones en dispersión; pero las resonancias agudas de muchas partículas en la sección transversal para capturar electrones, no se han podido observar jamás. Es posible que esto se deba a la dificultad para obtener una resolución adecuada de la energía electrónica ($\sim 10^{-6}$ ev?). No obstante, es posible que las resonancias agudas de muchas partículas existan a causa del potencial de *corte* porque la interacción de un átomo neutral y un electrón libre es cualitativamente similar a la del caso nuclear, en que la reflexión desde la "superficie" debe inhibir la emisión electrónica.

www.FreeLibros.me

excitados, vamos a analizar los resultados de estos estudios. En pocas palabras, podemos decir que parece haber poco orden en esos resultados. O sea, que en los estados excitados de los núcleos pueden encontrarse pocas regularidades, que son tan características de los estados excitados de los átomos. Hay sólo tres excepciones bien establecidas:

1. En los primeros estados excitados de los núcleos, sobre todo los que tienen valores de N o Z cercanos a los números mágicos, se encuentran con frecuencia ciertas características del modelo de capas. Un ejemplo, que vimos en la sección anterior, es la ausencia de transiciones dipolares eléctricas entre esos estados.

2. En los primeros estados excitados de núcleos de valores N y Z pares, sobre todo los que tienen N y Z alejados de los números mágicos, pueden observarse ciertas características del movimiento de rotación, predichas por el modelo colectivo. Para un cuerpo rígido que gira en torno a un punto en el centro de su eje de simetría, los valores propios son:

$$E = \frac{\hbar^2}{2I} i(i+1), \qquad i = 0, 2, 4, 6, \ldots \tag{16-89}$$

en donde I es el momento de inercia en torno al eje de rotación y las paridades de todas las funciones propias son pares.* Todos los núcleos de N y Z pares tienen un estado base de paridad par con $i = 0$. En muchos de ellos, el primer estado excitado tiene $i = 2$, paridad par, y el segundo $i = 4$, paridad par. En algunos casos, el tercer estado excitado tiene $i = 6$, paridad par. Además, las energías de estos estados van de acuerdo con la ecuación (16–89) para valores razonables de I.

3. En ciertos conjuntos de núcleos ligeros que tienen valores comunes de A, los primeros estados excitados han resultado tener spins y paridades correspondientes. Después de efectuar correcciones para diferentes energías de repulsión de Coulomb de los diversos núcleos de un conjunto, las energías de los estados correspondientes son aproximadamente iguales. Esto es particularmente cierto si el conjunto consta de dos núcleos espejo.

Después de los primeros estados excitados, ni siquiera se pueden observar ya estos principios modestos de regularidad, y las energías, las vidas medias, los spins y las paridades parecen estar esencialmente distribuidos al azar; pero esto no debe resultar sorprendente, puesto que el núcleo es mucho más complicado que el átomo. En la teoría del átomo de Hartree, el potencial neto $V(r)$ es el factor dominante para determinar el comportamiento de los electrones, y todos los demás efectos son perturbaciones pequeñas. En el modelo de capas del núcleo hay también un potencial neto $V(r)$; pero los otros efectos

* Vea los resultados del ejercicio 6, capítulo 10. Los estados $i = 1, 3, 5, \ldots$ están ausentes, porque en ellos, la paridad es non, mientras que sólo los estados de paridad par son posibles, debido a que el sistema simétrico al que se aplica la ecuación (16–89), se transforma en sí mismo, bajo la operación de paridad, es decir, el sistema es completamente simétrico con respecto a la reflexión en el origen y, por lo tanto, se debe describir mediante funciones propias de paridad par.

www.FreeLibros.me

no son perturbaciones pequeñas. Además, puesto que se trata solamente de un modelo, en lugar de una teoría, hay efectos adicionales (los efectos colectivos y, probablemente, otros muchos) que el modelo de capas no toma en consideración y, desde luego, esos efectos no son tampoco perturbaciones pequeñas. Aparentemente, en un núcleo real, hay numerosos efectos diferentes de importancia comparable que rigen las propiedades de los estados excitados y, como resultado, no es posible dar una descripción de las propiedades *individuales* de cada estado excitado, excepto incluyéndolos en una tabla.

Sin embargo, es posible dar una descripción simple de ciertas propiedades *promedio* de los estados excitados. Con respecto a sus energías, esto se hace especificando el *espaciamiento promedio de energía D* entre estados adyacentes. En la tabla 16–4 se dan varios valores de D. Debido a las grandes fluctuaciones de un caso a otro y, asimismo, porque existen incertidumbres considerables, estos espaciamientos promedio deben tomarse *cum grano salis*. No obstante, indican las tendencias generales, que son fáciles de comprender.

En el modelo de capas, a energías de excitación muy bajas, sólo uno de los nucleones lleva la energía total de excitación del núcleo y, así, el espaciamiento de los estados excitados es el espaciamiento relativamente grande de los estados bajos del modelo de capa. En el modelo colectivo, los estados excitados bajos son principalmente de rotación y su espaciamiento es también relativamente grande. Con energías elevadas de excitación, no es adecuado ningún modelo conocido y puede considerarse quizá mejor el núcleo como un sistema complicado de muchas partículas, todas las cuales pueden participar de diversas formas en la excitación del sistema. Puesto que hay un número importante de divisiones de energía de excitación entre las muchas partículas que conducen a aproximadamente la misma energía total de excitación, resulta evidente que el espaciamiento entre los estados excitados más altos del sistema será pequeño. Resulta también claro que este espaciamiento disminuirá al aumentar la energía total de excitación y al incrementarse A.

TABLA 16–4

Espaciamientos promedio entre estados excitados de los núcleos

Energía de excitación E	$A \sim 20$	$A \sim 200$
~0 Mev	$\sim 10^6$ ev	$\sim 10^5$ ev
~6 a 8 Mev	$\sim 10^3$ ev	$\sim 10^0$ ev
~16 Mev	$\sim 10^2$ ev	

Si utilizamos el modelo de gas de Fermi para núcleos muy excitados, podemos obtener una descripción *aproximada* de los espaciamientos promedio que se observan. Ciertos argumentos simples de la termodinámica, comenzando con la relación

$$E = a(kT)^2 \tag{16–90}$$

www.FreeLibros.me

entre la energía total de excitación E de un gas de Fermi y su temperatura T, conduce a la expresión siguiente para la *densidad de estados excitados*, $\rho \equiv 1/D$:

$$\rho = \rho_0 e^{2\sqrt{aE}} \tag{16–91}$$

La cantidad $a = \pi^2 A/4E_f$, en donde A es el número de partículas de Fermi en el sistema y E_f su energía de Fermi (12–38). Si nos ocupamos por separado del gas de neutrones es el gas de protones, y evaluamos A y E_f en términos de N, Z, y el volumen nuclear como en la ecuación (16–35), encontramos que

$$a \simeq A/10 \tag{16–91'}$$

en donde a se mide en Mev^{-1}.

Las vidas medias de los estados excitados se expresan, por lo común, en términos de sus anchuras Γ. Como hemos indicado ya, la relación (16–88) es válida para todos los estados excitados. Así, cualquier estado excitado con una vida media τ tiene una anchura Γ, en donde

$$\tau = \hbar/\Gamma \tag{16–92}$$

Hemos visto que para energías de excitación de hasta varios Mev, los estados excitados pueden desintegrarse solamente mediante la emisión de rayos gamma y la conversión interna y que las vidas medias van de aproximadamente 10^{-15} seg hasta 10^8 seg. Puesto que $\hbar \sim 10^{-15}$ ev-seg, esto significa que Γ va de cerca de $\Gamma \sim 10^{-1}$ ev a $\Gamma \sim 10^{-23}$ ev. Para energías de excitación un poco por encima de esta gama; pero menores que la energía de amarre de un nucleón, la evidencia indica que Γ no depende mucho de E o A. Varía de $\Gamma \sim 1$ ev cerca de la energía de amarre del neutrón en los núcleos con $A \sim 20$, a $\Gamma \sim 10^{-1}$ ev cerca de la energía de amarre del neutrón en los núcleos con $A \sim 200$. Esto se produce debido a que en esta gama de energías hay muchísimos estados de baja energía a los que puede decaer el estado excitado, así, habrá siempre estados disponibles, cuyos spins y cuyas paridades sean tales que permitan el decaimiento del estado excitado mediante transiciones dipolares eléctricas con vidas medias del orden de 10^{-15} seg.

Cuando la energía de excitación pasa por encima de la de amarre del último nucleón en el núcleo, típicamente, 6 a 8 Mev, se hace energéticamente posible el decaimiento, mediante la emisión de un nucleón. En algunos núcleos, la emisión de protón se hace energéticamente posible antes, y en otros la del neutrón; pero, en general, excepto para los que tienen valores muy pequeños de Z, la barrera de Coulomb inhibe efectivamente la emisión de protón, hasta que la energía de excitación es muy alta. Cuando la emisión de nucleón es energéticamente posible, la rapidez total para transiciones del estado excitado, será mayor que el debido a transiciones que incluyen la emisión de rayos gamma y la conversión interna sola. Esto disminuye la vida media e incrementa la anchura. En efecto, puesto que las anchuras son inversamente proporcionales a las vidas medias y éstas son inversamente proporcionales a la rapidez de transición, las anchuras son proporcionales a la rapidez de transición y podemos escribir

$$\Gamma = \Gamma_\gamma + \Gamma_n \tag{16–93}$$

www.FreeLibros.me

debido a que la rapidez de transición es aditiva. En esta expresión, Γ_γ significa la anchura debida a todas las transiciones posibles de rayos gamma y la conversión interna, y Γ_n significa la anchura debida a la emisión de neutrón (o la emisión de nucleón, si la emisión de protón es importante).

Es fácil ver cómo debe ser la forma general de la dependencia de la energía que tiene la anchura del neutrón Γ_n. Supongamos que se utiliza la Regla de Oro Núm. 2 para calcular la rapidez para transiciones de un estado inicial que consiste del núcleo en un estado excitado de energía E a un estado final consistente del núcleo en su estado base más un nucleón que sale con una energía cinética $(E - E_b)$, en donde E_b es su energía de amarre. El elemento de matriz para la transición será una función de E, que varía lentamente y la dependencia de la energía que tiene la rapidez de transición aparecerá principalmente a través de la densidad de estados para el núcleo. A partir de la ecuación (10–37), vemos que esta densidad de estados es proporcional a $(E - E_b)^{1/2}$. Por consiguiente, podemos esperar,

$$\Gamma_n \propto (E - E_b)^{1/2} \tag{16–94}$$

al menos para una gama restringida de energías. Esta es la dependencia de la energía mostrada por los resultados promedio de las medidas. Cuando $\Gamma_n \gg \Gamma_\gamma$, $\Gamma \simeq \Gamma_n$, y estas medidas incluyen, simplemente, la determinación de las anchuras y las resonancias en datos tales como los que se dan en la figura 16–48. Puesto que Γ_γ es proporcional a una constante, mientras que $\Gamma_n \propto (E - E_b)^{1/2}$, Γ_n será siempre mayor en comparación a Γ_γ cuando $(E - E_b)$ se hace mayor que cierto valor. Para núcleos con $A \sim 20$, esto ocurre para $(E - E_b) \sim 1$ ev, y para este valor $\Gamma_n = \Gamma_\gamma \sim 1$ ev. Para núcleos con $A \sim 200$, $\Gamma_n = \Gamma_\gamma \sim 10^{-1}$ ev a $(E - E_b) \sim 10^3$ ev.

Cuando $(E - E_b)$ no es demasiado grande, existe una relación empírica interesante entre las anchuras promedio del neutrón Γ_n de los estados excitados de un núcleo y los espaciamientos promedio D entre esos estados. Esto es:

$$\Gamma_n \simeq CK_2D \tag{16–95}$$

en donde,

$$K_2 = p_2/\hbar = \sqrt{2M(E - E_b)}/\hbar$$

La cantidad p_2 es el impulso del nucleón emitido y M es su masa. Para casi todos los núcleos, la constante C está dentro de un factor de 5 de

$$C = 0.5 \times 10^{-13}\ \text{cm} \tag{16–95'}$$

aunque los valores de Γ_n varían en muchos órdenes de magnitud.

A partir de las ecuaciones (16–95) o de las (16–91) y (16–94), vemos que Γ_n/D aumenta al hacerlo la energía de excitación. En el punto en que $\Gamma_n/D = 1$, los estados excitados comienzan a traslaparse y forman un *continuo*. Como indicación de la tendencia general, puede decirse que para núcleos con $A \sim 20$, el continuo comienza en $(E - E_b) \sim 10$ Mev, y para los núcleos con $A \sim 200$, se inicia en $(E - E_b) \sim 10^{-1}$ Mev.

www.FreeLibros.me

14. Reacciones nucleares

Las reacciones nucleares proporcionan mucha información útil con respecto a las propiedades de los estados excitados. A su vez, las propiedades de los estados excitados proporcionan la clave para comprender las reacciones nucleares. En esta sección, vamos a utilizar este punto de vista para dar una versión simplificada de la descripción teórica actual de las reacciones nucleares. Esta descripción se debe a Bohr (1936), Breit y Wigner (1936), Weisskopf (ca. 1950), Butler (ca. 1953) y muchos otros.

Antes del descubrimiento (1936) de resonancias muy agudas en las secciones para reacciones inducidas mediante neutrones de baja energía, se había supuesto que las reacciones nucleares involucraban una transición directa de un estado inicial consistente de la partícula de bombardeo y el núcleo de blanco, a otro estado final, consistente de la partícula producto y el núcleo residual. Sin embargo, el descubrimiento de resonancias reemplazó esta teoría de *interacción directa* con la teoría del *núcleo compuesto*. Bohr propuso esta última teoría, debido a que comprendió que en las reacciones que muestran resonancias, debe haber un estado intermedio de vida relativamente larga, al que llamó núcleo compuesto. Este estado es necesario, debido a que esas reacciones son, esencialmente, medidas de la energía incidente de neutrón puesto que las secciones son funciones que varían muy rápidamente con la energía. Por consiguiente, el principio de incertidumbre exige que la duración de esas medidas sea, al menos, de $\tau = \hbar/\Gamma$, en donde las anchuras de resonancia Γ son sus resoluciones de energía. La teoría del núcleo compuesto tuvo muy buenos resultados y durante muchos años se pensó que podía explicar todas las reacciones nucleares; no obstante, en época reciente, se ha descubierto que algunas reacciones pueden explicarse en realidad, con mayor facilidad, sobre la base de una teoría de interacción directa.

Vamos a describir primeramente la teoría del núcleo compuesto. Es evidente establecer una distinción entre dos casos: *a*) $(E - E_b)$ es suficientemente pequeño para que el núcleo compuesto esté excitado en una región en la que sus estados están bien separados, puesto que $\Gamma_n/D \ll 1$; *b*), $(E - E_b)$ es suficientemente grande para que el núcleo compuesto se excite en una región en la que sus estados se traslapen fuertemente, puesto que $\Gamma_n/D \gg 1$. No obstante, en ambos casos, la etapa inicial en la reacción nuclear es esencialmente la misma. Esta es la etapa descrita por el modelo óptico. Tomemos en consideración un haz de partículas que bombardea un blanco de núcleos. De acuerdo con el modelo óptico, una partícula que golpea un núcleo se dispersará fuera del haz incidente o será retirada de este último, mediante la absorción. Si se absorbe, iniciará una reacción nuclear; pero el modelo óptico no puede indicarnos nada sobre los detalles de la reacción, puesto que sólo describe a la partícula que se mueve a través del núcleo de absorbente en un estado de una partícula del potencial complejo que representa la interacción inicial entre la partícula y el núcleo. Debido a que el potencial es bastante absorbente para todos los valores positivos de $(E - E_b)$,* este estado de una

* En este caso, usamos $(E - E_b)$ para la energía cinética externa del nucleón que bombardea, y es igual a E de la figura 16–10.

www.FreeLibros.me

partícula tendrá una vida media muy corta o una anchura muy grande. En efecto, puesto que se deduce inmediatamente de la expresión (15–106) que, si la parte imaginaria del potencial complejo tiene un valor constante $-W$, la anchura del estado de una partícula es $\Gamma = 2W$, y puesto que la figura 16–10 muestra que $2W \sim 10$ Mev para el caso típico $(E - E_b) \sim 10$ Mev, la vida media del estado de una partícula es, normalmente, $\tau = \hbar/\Gamma \sim 10^{-15}$ ev-seg/ 10^7 ev $= 10^{-22}$ seg.

El estado de una partícula, que tiene una vida media muy corta, decae rápidamente en estados de muchas partículas, de vidas medias más largas que corresponden, dentro de los límites del principio de incertidumbre, a la misma energía total de excitación del sistema, consistente de la partícula de bombardeo más el núcleo blanco. Este es el sistema que denominaremos núcleo compuesto, y los estados de partículas múltiples son precisamente los estados altamente excitados de que nos ocupamos en la sección anterior. Estos estados de muchas partículas son, desde luego, diferentes del estado de una partícula. Una de las diferencias es que en los casos que analizamos, la anchura del estado de una partícula se mide en Mev, mientras que las anchuras de los estados de muchas partículas se miden en ev. Otra es que el estado de una partícula y los estados de muchas partículas no describen la misma situación física, aun cuando corresponden a la misma energía total de excitación. En el estado de partícula simple, toda la energía de excitación la lleva una partícula; pero en cualquiera de los estados de muchas partículas se distribuye sobre un gran número de partículas. La excitación de los estados de muchas partículas por el de una partícula, tiene lugar por medio de un proceso en el que la energía se transfiere de una a otra, en colisiones múltiples de la partícula de bombardeo con partículas del núcleo.*

Por supuesto, los estados de muchas partículas del núcleo compuesto decaerán finalmente con vidas medias promedio $\tau = \hbar/\Gamma \sim 10^{-16}$ seg, en donde tomamos $\Gamma \sim 10$ ev como la anchura típica de los estados de muchas partículas. Sabemos que, en general, este decaimiento debe realizarse mediante la emisión de nucleón, puesto que, excepto para valores pequeños de $(E - E_b)$, $\Gamma_n \gg \Gamma_\gamma$ para estados de muchas partículas. Sin embargo, quizá no resulte claro cómo se produce esto. El punto es que en los estados de muchas partículas, la energía total de excitación E se distribuye entre muchos nucleones y, para que cualquier nucleón escape del núcleo, debe tener una energía de excitación al menos igual a su energía de amarre E_b. Así, una gran fracción de la energía de excitación debe concentrarse en alguna forma en un solo nucleón, para que éste escape. Podemos obtener cierta idea del modo en que se produce esto y del proceso en el que se excitan inicialmente los estados de muchas partículas, por medio del argumento siguiente.

Sea Ψ la función de onda para el núcleo compuesto y ψ_k las funciones propias para los estados de muchas partículas que se excitan en ese núcleo. Supongamos que el espaciamiento entre todos los valores propios adyacentes E_k de estos estados de muchas partículas es una constante igual a su espacia-

* Esto da origen a una relación simple entre las resonancias agudas de muchas partículas y las anchas de una sola partícula, siendo estas últimas las que definen la *intensidad* promedio Γ_n/D, de las resonancias de muchas partículas.

www.FreeLibros.me

miento promedio D, de modo que $E_k = E_0 + kD$, en donde E_0 es una constante y $k = 1, 2, 3, \ldots$. Entonces las funciones de onda Ψ_k para los estados de muchas partículas son $\Psi_k = \psi_k e^{-iE_k t/\hbar} = \psi_k e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-ikDt/\hbar}$ Escribamos a continuación Ψ como combinación lineal de Ψ_k. Esto es,

$$\Psi = \sum_k a_k \Psi_k = e^{-iE_0 t/\hbar} \sum_k a_k \psi_k e^{-ikDt/\hbar} \tag{16–96}$$

en donde, la suma total se toma sobre los estados de muchas partículas que se excitan. En esta expresión $t = 0$ es el tiempo en el que se excitan inicialmente y $a_k = A_k e^{-i\phi_k}$, en donde las cantidades reales A_k son sus amplitudes y las constantes reales ϕ_k son factores de fase que permiten que la t en todas las Ψ_k tenga el mismo cero. Observe ahora, que la suma parece ser una función perfectamente periódica de t, con período de repetición

$$T = 2\pi\hbar/D \tag{16–97}$$

A $t = 0$, Ψ describe realmente un estado de una partícula puesto que en ese tiempo, el núcleo compuesto se está formando y toda la energía de excitación se la lleva la partícula de bombardeo. Si la suma es perfectamente periódica, con el período T, entonces Ψ describirá nuevamente el estado de una partícula a $t = T$ (y también $2T$, $3T$, etc.). En efecto, describirá exactamente al mismo estado de una partícula que se formó inicialmente y toda la energía total de excitación se concentrará en dicha partícula sola. A continuación, esta partícula escapará del núcleo, a condición de que no sea reflejada por el cambio de potencial en la superficie de dicho núcleo.

Consideremos el caso *a*), en el que la cantidad $(E - E_b)$ es pequeña. En este caso, la reflexión en la superficie nuclear es muy importante. Para un protón, la barrera de Coulomb hace que sea despreciable la probabilidad de escape. Para un neutrón, la probabilidad de escape, P, puede estimarse a partir de la ecuación (8–46) y es:

$$P = 4K_1K_2/(K_1 + K_2)^2 \tag{16–98}$$

en donde,

$$K_1 = p_1/\hbar \simeq \sqrt{2MV_0}/\hbar$$

y

$$K_2 = p_2/\hbar = \sqrt{2M(E - E_b)}/\hbar$$

La cantidad p_1 es el impulso del neutrón de masa M cuando se encuentra dentro del núcleo. Equipararemos esto con el impulso que tendría, aproximadamente, al moverse en un potencial de modelo óptico con una parte real de profundidad V_0. La cantidad p_2 es el impulso del neutrón después de escapar y está relacionado con la energía cinética externa $(E - E_b)$. La ecuación (16–98) se basa en la aproximación de que el potencial en la superficie del núcleo cambia rápidamente en una distancia del orden de una longitud de onda de De Broglie. Esta aproximación no es mala para valores pequeños de

www.FreeLibros.me

$(E - E_b)$. Además, con valores pequeños de $(E - E_b)$, $K_1 \gg K_2$ y, por lo tanto,

$$P \simeq 4K_1K_2/K_1^2 = 4K_2/K_1 \tag{16–99}$$

Ahora bien, la probabilidad por segundo de que un neutrón sea emitido del núcleo es igual a T^{-1}, el número de veces por segundo que Ψ repite su forma original de una partícula, multiplicado por la probabilidad P de que cualquiera de esas veces, el neutrón escape. Así pues, la vida media para la emisión de neutrón es:

$$\tau = 1/T^{-1}P = T/P \tag{16–100}$$

y la anchura del neutrón Γ_n es $\Gamma_n = \hbar/\tau = \hbar P/T$. A partir de las expresiones (16–97) y (16–99), esto es

$$\Gamma_n = \frac{\hbar 4K_2}{K_1}\frac{D}{2\pi\hbar} = \frac{2K_2D}{\pi K_1}$$

o bien,

$$\Gamma_n = \frac{2\hbar}{\pi\sqrt{2MV_0}}K_2D \tag{16–101}$$

en donde

$$K_2 = \sqrt{2M(E - E_b)}/\hbar$$

Tomando el valor $V_0 = 50$ Mev, indicado por el modelo óptico, el coeficiente $2\hbar/\pi\sqrt{2MV_0} = 0.39 \times 10^{-13}$ cm, y vemos que la ecuación (16–101) concuerda perfectamente con la (16–95). Nótese de la ecuación (16–100), que la vida media τ, de los estados de muchas partículas es mucho más largo que el período de repetición T, cuando $(E - E_b)$ es pequeño, simplemente debido a que la probabilidad de escape P es pequeña, la función de onda Ψ para el núcleo compuesto repite muchas veces su forma original de una partícula, antes de que la partícula sea emitida.

Esto no es válido para el caso b), en el que $(E - E_b)$ es grande, debido a que en estas circunstancias, la probabilidad de escape es $P \simeq 1$. Para manejar este caso, debemos corregir un punto débil del argumento. Las cantidades A_k, que son las amplitudes de las a_k en la ecuación (16–96), no son constantes; pero, en promedio, disminuyen en el tiempo, de acuerdo con la ley,*

$$A_k(t) = A_k(0)e^{-t/2\tau_k} \tag{16–102}$$

en donde $\tau_k = \hbar/\Gamma_k$ es la vida media del estado de muchas partículas de anchura Γ_k. Esto puede pasarse por alto, con el fin de evaluar el período de

* Puesto que la probabilidad de encontrar el núcleo en el estado de muchas partículas k es $a_k^* a_k = A_k^2(t)$, la ecuación (16–102) es, sencillamente, la ley de desintegración exponencial común.

www.FreeLibros.me

repetición T en el caso a), puesto que todos los $\tau_k \gg T$ y $A_k(t)$ son aproximadamente constantes, en cualquier período de repetición. Sin embargo, no puede pasarse por alto en el caso b), puesto que no se obtiene la condición $\tau_k \gg T$. Ahora bien, si todos los valores de τ_k tienen exactamente el mismo valor de τ, y todos los $A_k(t)$ tienen la misma dependencia, $e^{-t/2\tau}$ en t, este término se factorizará de la suma (16–96) y aparecerá fuera de la suma como término que describe la desintegración del núcleo compuesto. Esto conduce a que la suma sea una función perfectamente periódica de t. Sin embargo, no todos los τ_k tienen exactamente los mismos valores. En lugar de ello, tienen muchos valores diferentes y, así, la suma no es una función perfectamente periódica de t. Aun así, será una función aproximadamente periódica, si la gama de valores de τ_k no es demasiado grande. Entonces, la función de onda Ψ para el núcleo compuesto, dentro de cierto tiempo, debería regresar a una forma que tenga aproximadamente un carácter de una partícula y la partícula se emitirá en la primera ocasión en la que esto suceda. Sin embargo, la función de onda particular de una partícula, a la que regresa Ψ no tendrá necesariamente una conexión con la forma exacta de la función de onda inicial de una partícula. Esto será cierto, con seguridad, *si* un número elevado de estados que se traslapan se excitan en el núcleo compuesto y *si* la anchura de cada uno de esos estados no está correlacionada de manera importante con las anchuras de los otros. En estas circunstancias, *la desintegración del núcleo compuesto será independiente de los detalles exactos de su formación.*

Este resultado fundamental de la teoría del núcleo compuesto es válido también para el caso a). Puede considerarse esto como una consecuencia del hecho de que los valores de $A_k(t)$ cambian en realidad, de manera ligera, durante un período de repetición, de modo que Ψ se desvía ligeramente de una función periódica perfecta de t. Así, Ψ vuelve repetidamente a ser una función de onda de una partícula ligeramente diferente de la función de onda de una partícula anterior y, en el gran número de ciclos que tienen lugar antes de que la partícula sea emitida finalmente, Ψ pierde toda memoria de los detalles exactos de la función de onda de una partícula inicial. En ambos casos, este resultado se ve reforzado por las desviaciones de la suposición de que los valores propios E_k de los estados de muchas partículas están espaciados regularmente. No obstante, sean cuales sean las circunstancias, la desintegración del núcleo compuesto debe ser independiente de los detalles exactos de su formación para el caso a). La razón es que la conservación de la energía dentro de los límites del principio de incertidumbre exige que sólo se exciten estados de muchas partículas de energía de excitación dentro de un intervalo de longitud $2\Gamma_n$ centrado en la energía E, en el tiempo $t \sim \tau = \hbar/\Gamma_n$, cuando el núcleo compuesto ha existido durante suficiente tiempo para desintegrarse.* Para el caso a), $\Gamma_n/D \ll 1$, de modo que sólo puede haber un estado de partículas múltiples dentro de estos límites. Por lo tanto, en el caso a), el decaimiento del núcleo compuesto *debe depender necesariamente* sólo de las

* Por supuesto, en tiempos anteriores, se pueden excitar estados de muchas partículas cuyas energías de excitación caen dentro de límites más amplios, como hemos supuesto. Por ejemplo, cuando sólo han transcurrido 10^{-22} seg (la duración de vida del estado inicial de una sola partícula), se pueden excitar estados de muchas partículas en una gama de ~10 Mev. Vea la sección 5 del capítulo 9.

www.FreeLibros.me

propiedades de este estado de muchas partículas y no puede depender de los detalles relativos al modo en que se excitó.

Después de esta descripción bastante esotérica de las reacciones de núcleo compuesto, sería conveniente hacer una recapitulación en el tipo de lenguaje utilizado en los documentos originales de Bohr. Cuando una partícula entra en un núcleo, choca con las partículas de éste y les cede a éstas, rápidamente, su energía cinética y de amarre. En esa forma, la partícula de bombardeo es capturada y se forma un núcleo compuesto excitado, en un estado, en cierto modo reminiscente de un líquido en ebullición, en el que la energía de excitación se distribuye al azar entre todas sus partículas. A continuación, cada partícula tiene una energía de excitación considerablemente menor que su energía de amarre. Ocasionalmente, ciertas fluctuaciones estadísticas provocan la concentración de suficiente energía en una partícula para hacer energéticamente posible su escape. Si las circunstancias son tales que la reflexión sobre la superficie nuclear es importante, esto deberá ocurrir numerosas veces, antes de que una partícula sea finalmente emitida. Sin embargo, sean cuales sean las circunstancias, el núcleo compuesto tiene una vida media relativamente larga, y durante ésta, olvida todo con respecto a cómo se formó originalmente (excepto que debe recordar la necesidad de conservar energía, impulso angular, etc.). Así, el proceso de desintegración final es independiente de los detalles exactos del proceso de formación. Esto significa, por ejemplo, que la razón de la probabilidad de que un núcleo compuesto decaiga mediante la emisión de un nucleón a la probabilidad de que decaiga mediante la emisión de rayos gamma y conversión interna, es igual a la razón Γ_n/Γ_γ (puesto que la rapidez de transición son proporcionales a la anchura, en donde Γ_n y Γ_γ se evalúan para el estado o los estados excitados en el núcleo compuesto y donde esto es en realidad independiente de exactamente cómo se excitaron dichos estados. Si en cierta reacción se forma un núcleo compuesto particular con cierta energía de excitación y en otra reacción distinta (diferente partícula de bombardeo y núcleo de blanco distinto) se forma el mismo núcleo compuesto, con la misma energía de excitación, ambos núcleos compuestos deberán decaer en la misma forma. Para valores pequeños de $(E - E_b)$, Γ_γ puede ser comparable a Γ_n, y, puede haber una probabilidad apreciable de que el núcleo compuesto decaiga por medio de la emisión de rayos gamma y la conversión interna, para formar un núcleo completamente estable. A valores más elevados de $(E - E_b)$, $\Gamma_n \gg \Gamma_\gamma$, y el núcleo compuesto decaiga siempre mediante la emisión de partículas. Si existe suficiente energía de excitación, el núcleo compuesto puede desintegrarse ya sea mediante la emisión de un neutrón o por la emisión de un protón. Cuando las energías de excitación son muy elevadas, pueden emitirse más de una partícula.

La figura 16–49 muestra las secciones medidas para el conjunto de reacciones

$$
\begin{aligned}
{}^{30}\mathrm{Zn}^{63} &+ {}^{0}n^{1} \\
{}^{1}\mathrm{H}^{1} + {}^{29}\mathrm{Cu}^{63} \rightarrow {}^{30}\mathrm{Zn}^{62} &+ {}^{0}n^{1} + {}^{0}n^{1} \\
{}^{29}\mathrm{Cu}^{62} &+ {}^{0}n^{1} + {}^{1}\mathrm{H}^{1}
\end{aligned}
$$

www.FreeLibros.me

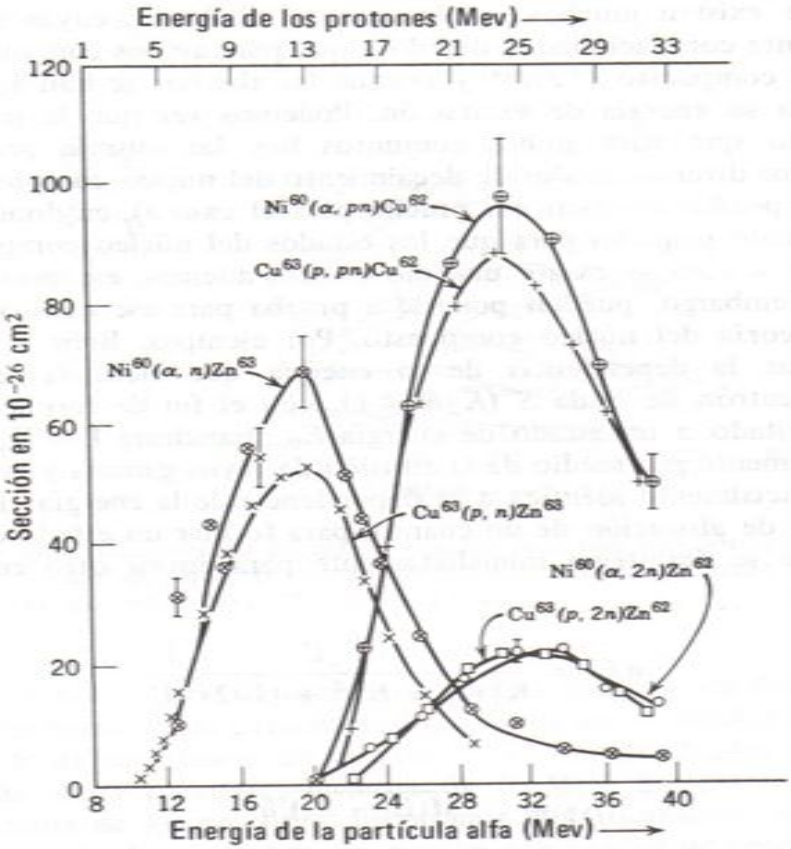

Figura 16-49. Secciones para un conjunto de reacciones que ponen a prueba las predicciones de la teoría del núcleo compuesto. Tomado de S. N. Ghoshal, *Phys. Rev.*, 80, 939 (1950).

y, asimismo, para el conjunto,

$$
\begin{aligned}
{}^{2}He^{4} + {}^{28}Ni^{60} &\rightarrow {}^{30}Zn^{63} + {}^{0}n^{1} \\
& {}^{30}Zn^{62} + {}^{0}n^{1} + {}^{0}n^{1} \\
& {}^{29}Cu^{62} + {}^{0}n^{1} + {}^{1}H^{1}
\end{aligned}
$$

con energías de bombardeo muy elevadas. La abscisa es la energía cinética del protón de bombardeo para el primer conjunto de reacciones, y la energía cinética de la partícula alfa de bombardeo en el segundo conjunto de reacciones; el desplazamiento relativo de las dos abscisas es igual a la diferencia en los valores de E_b para las dos partículas de bombardeo. La ordenada es la sección para las diversas reacciones y cada una de éstas se identifica de acuerdo con una notación común. Esta figura proporciona una prueba de la predicción de que el decaimiento, de un núcleo compuesto es independiente de su formación, en el caso *b*), en donde $(E - E_b)$ es suficientemente grande para que el núcleo compuesto se excite en una región en la que puede

www.FreeLibros.me

suponerse que existen muchos estados que se traslapan, cuyas anchuras no están firmemente correlacionadas, debido a que para ambos conjuntos existe el mismo núcleo compuesto $^{30}Zn^{64}$ y porque las abscisas se han ajustado para corresponder a su energía de excitación. Podemos ver que la predicción se verifica, puesto que para ambos conjuntos hay las mismas probabilidades relativas para los diversos modos de decaimiento del núcleo compuesto.

No ha sido posible efectuar esa prueba para el caso *a*), en donde $(E - E_b)$ es suficientemente pequeño para que los estados del núcleo compuesto estén bien separados y sólo se excite un solo estado; además, esa prueba es poco necesaria. Sin embargo, pueden ponerse a prueba para ese caso otras predicciones de la teoría del núcleo compuesto. Por ejemplo, Breit y Wigner han demostrado que la dependencia de la energía que tiene la sección para absorber un neutrón de onda S $(K_2R \ll 1)$, con el fin de formar un núcleo compuesto excitado a un estado de energía E_0 y anchura $\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_\gamma$, que decae posteriormente por medio de la emisión de rayos gamma y la conversión interna, es esencialmente idéntica a la dependencia de la energía (13–124) de la probabilidad de absorción de un cuanto, para formar un estado excitado de un átomo, que se desintegra inmediatamente para emitir otro cuanto. Descubrieron que:

$$\sigma(E) = \frac{\pi}{K_2^2} \frac{\Gamma_n \Gamma}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \tag{16–103}$$

en donde

$$K_2 = \sqrt{2M(E - E_b)}/\hbar$$

El término π/K_2^2 es la sección máxima posible para absorber un neutrón de onda S (vea la ecuación (15–98) con $\eta_0 = 0$, $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = \cdots = 1$). El término $\Gamma_n\Gamma/[(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2]$ le da su forma a la resonancia; contiene un factor Γ_n que, puesto que es proporcional a la probabilidad de emisión de un neutrón, debe serlo también a la probabilidad de absorberlo [vea la ecuación (13–84) y el análisis asociado de la reversibilidad microscópica] y, asimismo, contiene un factor Γ que procede de la normalización. El término Γ_γ/Γ es la razón de la probabilidad de que el núcleo compuesto excitado decaiga mediante la emisión de rayos gamma y la conversión interna a la probabilidad de que decaiga, por medio de cualquier otro proceso. La dependencia de la energía de (16–103) se ha verificado con exactitud en muchos experimentos diferentes. Si damos por sentada su validez, podemos utilizarla para obtener valores de Γ, Γ_n y Γ_γ a partir de medidas de $\sigma(E)$. Breit y Wigner descubrieron también que la ecuación (16–88), que es idéntica a la (13–125), se aplica a la absorción resonante de partículas en cualquier situación cubierta por el caso *a*).

Aunque las predicciones de la teoría del núcleo compuesto parecen verificarse para las reacciones que tienen lugar por medio de un proceso de núcleo compuesto, se ha descubierto, en los últimos años, que hay ciertas situaciones en las que las reacciones se producen por medio de procesos de interacción directa. La figura 16–50 presenta algunos datos que muestran una de esas

www.FreeLibros.me

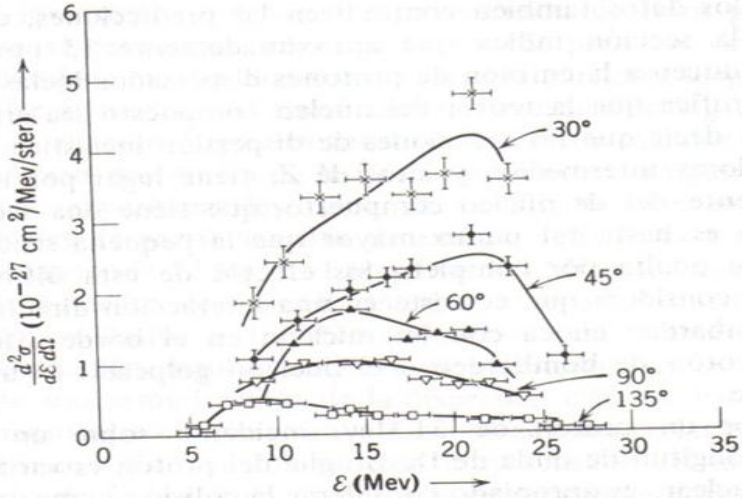

Figura 16-50. Distribuciones de energía y angular para una reacción que tiene lugar por medio de un proceso de interacción directa. Tomado de R. M. Eisberg G. Igo., *Phys. Rev.*, 93, 1039 (1954).

situaciones. Estas son distribuciones de energía de protones dispersados inelásticamente (dispersión con pérdida de energía) en cinco ángulos diferentes en el sistema LAB de un blanco de núcleos ^{50}Sn, bombardeados por un haz de protones de energía cinética externa de 31 Mev. La abscisa es la energía cinética externa de los protones dispersados inelásticamente, y la ordenada es la sección para la dispersión de un protón por unidad de energía y de ángulo sólido. Así, los datos dan también la distribución angular de los protones dispersados inelásticamente. Observe que en el rango de energías entre 10 y 20 Mev, la sección no depende mucho de la energía; pero que aumenta con rapidez al disminuir el ángulo. En ambos puntos esto es exactamente lo opuesto de lo que pudiera esperarse a partir de la teoría del núcleo compuesto, que predice que en el núcleo compuesto de larga duración, se perderán esencialmente todos los sentidos de dirección y que la distribución angular de los protones emitidos finalmente, debe ser isotrópica. Predice también que los protones se escapan por encima de 10 Mev de la barrera de Coulomb del núcleo compuesto de $Z = 51$, con una distribución de energía del tipo de Maxwell, muy dependiente de la energía, $N(\epsilon) \propto \epsilon e^{-\epsilon/kT}$, en donde ϵ es su energía cinética externa y kT se obtiene a partir de la ecuación (16–90) con $E = (31 + E_b)$ Mev $= 38$ Mev. Esto es, que la teoría predice $N(\epsilon) \sim 0$, $\epsilon < 10$ Mev, y $N(\epsilon) \propto \epsilon e^{-\epsilon/1.7\ \text{Mev}}$, 10 Mev $< \epsilon <$ 31 Mev. Para los neutrones, no hay barrera de Coulomb, y su distribución predicha de energía es $N(\epsilon) \propto \epsilon e^{-\epsilon/1.7\ \text{Mev}}$ sobre todo el rango de ϵ. En la teoría del núcleo compuesto, casi todos los nucleones emitidos serán neutrones, puesto que sólo unos pocos protones en la cola de la distribución de Maxwell con $\epsilon > 10$ Mev podrían escapar y es de esperarse que considerablemente menos del 1 por ciento de las reacciones inducidas por protones incidentes de 31 Mev, conduciría a la emisión de protones dispersados inelásticamente. Sin embargo, también en este

www.FreeLibros.me

tercer punto, los datos también contradicen las predicciones, debido a que la magnitud de la sección indica que aproximadamente 15 por ciento de las reacciones conducen a la emisión de protones dispersados inelásticamente.

Esto no significa que la teoría del núcleo compuesto sea errónea. En lugar de ello, quiere decir que las reacciones de dispersión inelástica de protones en núcleos de valores intermedios y altos de Z, tiene lugar por medio de algún proceso, diferente del de núcleo compuesto, que tiene una sección para esas reacciones que es hasta tal punto mayor que la pequeña sección del núcleo compuesto que oculta por completo los efectos de esta última. El proceso involucrado se considera que consiste en una interacción directa, en la que un protón de bombardeo choca con un nucleón en el borde difuso del núcleo blanco y el protón de bombardeo o el nucleón golpeado (o ambos) escapan inmediatamente.

Consideremos un protón de 31 Mev, incidente sobre un núcleo ^{50}Sn. Puesto que la longitud de onda de De Broglie del protón es varias veces menor que el radio nuclear, es apropiado considerar la colisión como suficientemente localizada para que pueda establecerse una distinción entre las colisiones directas y los choques con el borde difuso. Ahora, el modelo óptico muestra que las longitudes de atenuación en la materia nuclear, a 31 Mev, son también varias veces menores que el radio nuclear. Así, en cualquier colisión directa con el núcleo, el protón de bombardeo chocará pronto con los nucleones del núcleo que, a su vez, entrarán en colisión con otros nucleones y, en esa forma, la energía cinética del nucleón de bombardeo será compartida rápidamente con todos los nucleones del núcleo. Esta es la primera etapa en el proceso de núcleo compuesto que, finalmente, conducirá a la emisión de neutrones de baja energía. Sin embargo, en una colisión con el borde difuso del núcleo, el protón de bombardeo podría chocar con un nucleón, de tal manera que él mismo o el nucleón golpeado (o ambos), escaparán inmediatamente, llevándose una gran fracción de la energía cinética. Como el modelo óptico muestra que el espesor del borde difuso en el núcleo ^{50}Sn es de, aproximadamente, el 10 por ciento de su radio, su área proyectada es de cerca del 20 por ciento del área proyectada del núcleo completo. Esto indica que la sección para este proceso de interacción directa podría ser del orden de magnitud observado experimentalmente. Las otras características de este proceso son tales que podrían estar también de acuerdo con los experimentos. El proceso puede conducir a una distribución de energía, que varía lentamente, de protones de alta energía dispersados de manera inelástica, de alta energía, y a una distribución angular de esas partículas que aumentaría con rapidez al disminuir el ángulo (si no fuera por el impulso inicial del nucleón golpeado y la refracción en el potencial nuclear, la conservación del impulso y la energía exigiría que la distribución angular se concentrara enteramente en los 90° directos del sistema LAB).

Numerosos semicuánticos, basados en este proceso de interacción directa, han demostrado que es capaz de un ajuste muy adecuado de la reacción de dispersión inelástica de protones de 31 Mev, y de muchas reacciones similares. Butler (ca. 1953) y otros, han efectuado cálculos completos de mecánica cuántica para este proceso, para reacciones en que es posible medir la distribución angular de un solo grupo de protones dispersados inelásticamente, que

www.FreeLibros.me

dejan al núcleo residual en un estado excitado particular bajo. Los cálculos son básicamente los mismos que los de aproximación de Born para la dispersión elástica, que se estudiaron en el capítulo 15; pero los detalles son un poco más complicados, mucho más complejos si la partícula dispersada imparte impulso angular al núcleo, así como también energía. En lugar de darlos en la forma de una ecuación larga, los resultados de esos cálculos para un caso particular se muestran por medio de la línea continua en la figura 16–51. Los puntos son datos experimentales. Esta es la distribución angular para la dispersión no elástica de partículas alfa, de energía cinética externa de 31 Mev, a partir de un blanco de $^{12}Mg^{24}$. Las partículas alfa medidas son el grupo dispersado inelásticamente de más alta energía, y dejan al núcleo residual en su primer estado excitado, a 1.37 Mev. Observe que, además del aumento general en la distribución angular, al disminuir el ángulo, hay oscilaciones muy pronunciadas que son reminiscentes de la dispersión elástica. Esto es típico de lo que puede encontrarse en estos casos. Las ubicaciones de las oscilaciones en los resultados teóricos resultan una función muy sensible del impulso angular orbital transferido de la partícula dispersada inelásticamente al núcleo y, así, proporciona un instrumento poderoso para estudiar los spins y las paridades de los estados excitados de los núcleos involucrados.

Puede haber procesos de interacción directa, aparte de los que implican colisiones entre nucleones en el borde del núcleo. En efecto, evidencias recientes indican que, en algunos casos, las partículas dispersadas inelásticamente, de la energía más alta, proceden de un proceso en el que la partícula incidente choca con el borde del núcleo; pero, en lugar de interaccionar con un solo nucleón, lo hace coherentemente con todo el núcleo y lo deja en uno

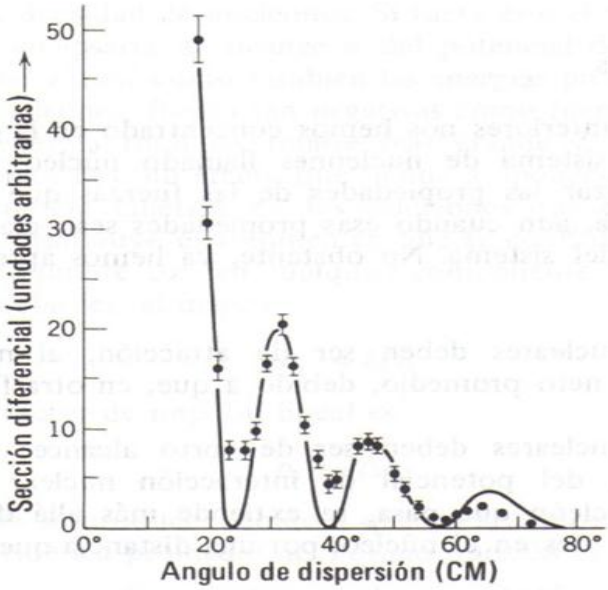

Figura 16-51. Distribuciones angulares experimentales y teóricas para una interacción directa que deja al núcleo residual en un estado excitado. Tomado de S. T. Butler, *Phys. Rev.*, **106**, 272 (1957).

www.FreeLibros.me

de sus estados de rotación más bajos. La partícula se desprende inmediatamente, después de sufrir sólo una pequeña pérdida de energía y una desviación angular ligera.

Las interacciones directas parecen desempeñar un papel importante en todas las reacciones en las que se emite una partícula producto de energía bastante elevada; esto incluye las reacciones en las que la partícula producto es diferente de la de bombardeo. Como ejemplos importantes tenemos las reacciones en las que un deuterón $^1H^2$ es la partícula de bombardeo y un protón $^1H^1$ o un neutrón $^0n^1$ es la partícula producto. Aparentemente, estas reacciones pasan por un proceso en el que se captura uno de los nucleones del deuterón, mientras que el otro sigue adelante.

Recientemente, se han hecho intentos para utilizar el formalismo de la teoría del núcleo compuesto, para describir interacciones directas. Esto se hace, pasando por alto la condición de que las anchuras de los estados que se traslapan excitados en el sistema intermedio, no están muy correlacionados. Al ajustar estas correlaciones, que por supuesto, es permisible, ya que las anchuras no se pueden medir directamente cuando los estados se traslapan, es posible hacer que el sistema intermedio pueda hacerlo todo, desde decaer inmediatamente en una forma dependiente de su formación (interacción directa) al decaimiento después de mucho tiempo, en una manera independiente de su formación (núcleo compuesto). Con respecto a las interacciones directas, pudiera criticarse este modo extraordinariamente complicado de describir un proceso simple. Sin embargo, tiene la ventaja de proporcionar una sola teoría unificada de todas las reacciones nucleares, incluyendo a las que son procesos de núcleo compuesto; pero están en la gama difícil, que se encuentra entre nuestros casos *a*) y *b*), en donde $\Gamma_n \sim D$.

15. Fuerzas nucleares

En las secciones anteriores nos hemos concentrado en la descripción de las propiedades de un sistema de nucleones llamado núcleo y, en gran parte, hemos evitado analizar las propiedades de las fuerzas que actúan entre los nucleones del sistema, aun cuando esas propiedades sean claramente el origen de las propiedades del sistema. No obstante, ya hemos aprendido algo sobre las fuerzas nucleares.

1. Las fuerzas nucleares deben ser de atracción, al menos en lo que respecta a su efecto neto promedio, debido a que, en otra forma, los núcleos no existirían.

2. Las fuerzas nucleares deben ser de corto alcance, debido a que la distribución espacial del potencial de interacción nuclear ejercido por un núcleo sobre un nucleón que pasa, se extiende más allá de la distribución espacial de los nucleones en el núcleo, por una distancia que es solamente del orden de 10^{-13} cm.

3. Las fuerzas nucleares entre dos neutrones en estados cuánticos particulares, deben ser aproximadamente las mismas que las fuerzas nucleares entre dos protones en los mismos estados cuánticos, sin contar la repulsión de

www.FreeLibros.me

Coulomb de los protones. Esto se sigue del hecho de que las energías de amarre totales del estado base de cada miembro de un conjunto de núcleos espejo son iguales, después de efectuar una corrección para las diferentes energías totales de repulsión de Coulomb de los dos miembros, y del hecho de que para uno de los miembros, el número de interacciones neutrón-neutrón entre nucleones en varios estados cuánticos es igual al número de interacciones protón-protón entre nucleones, en esos estados cuánticos, para el otro miembro y viceversa (vea la figura 16–42). Puesto que el número de interacciones neutrón-protón, en varios estados cuánticos es el mismo para ambos miembros de un conjunto, los núcleos espejo no permiten una comparación entre las interacciones neutrón-protón, neutrón-neutrón o protón-protón.

4. Las fuerzas nucleares no pueden ser de índole tal que exista casi el mismo potencial de interacción puramente de atracción entre todos los pares de nucleones, en todos los estados cuánticos. Esto se desprende del hecho de que la energía total de amarre del estado base ΔE es aproximadamente proporcional a A para todos los núcleos con $A \geqslant 4$, y por el argumento siguiente, debido a Heisenberg (1933). Consideremos un núcleo y enfoquemos la atención sobre un nucleón particular en su interior, digamos el i-ésimo nucleón. A continuación, supongamos que existe un potencial de interacción puramente de atracción, de alcance a, que actúa entre este nucleón y todos los demás nucleones del núcleo. Entonces, la energía potencial promedio $\bar{V}_i$ de este nucleón es proporcional al número de otros nucleones que se hallan dentro de una esfera de radio a, centrada en ese nucleón, y dicha energía será negativa. O sea,

$$\bar{V}_i \propto -\rho \tag{16–104}$$

en donde ρ es la densidad de nucleones. Si fuera éste el único efecto, el radio R del núcleo se colapsaría al alcance a del potencial de interacción, puesto que esto haría que $\bar{V}_i$, así como también las energías potenciales promedio de todos los otros nucleones, fueran tan negativas como fuera posible y, por esto, conduciría a la energía total de amarre más grande y a la disposición más estable; sin embargo, hay un efecto que tiende a oponerse a ese colapso. Es el incremento de energía cinética de los nucleones que exige el principio de incertidumbre, si disminuye el volumen en que se confinan. Para un núcleo de radio R, la incertidumbre Δp_i en cualquier componente del impulso lineal del nucleón i-ésimo, debe ser, al menos

$$\Delta p_i \sim \hbar/R$$

La magnitud del vector de impulso lineal es

$$p_i \sim \Delta p_i$$

y la incertidumbre se produce, debido a que no se conoce su dirección. Por lo tanto, la energía cinética promedio del i-ésimo nucleón es

$$\bar{T}_i \sim p_i^2/2M \propto (\Delta p_i)^2 \propto 1/R^2$$

Sin embargo,

$$\rho \propto 1/R^3$$

www.FreeLibros.me

de modo que*

$$\bar{T}_i \propto +\rho^{2/3} \tag{16–105}$$

A partir de las ecuaciones (16–104) y (16–105), descubrimos que la dependencia sobre ρ de la energía total de amarre de este nucleón es

$$\Delta E_i \equiv -E_i = -(\bar{T}_i + \bar{V}_i) = -\alpha\rho^{2/3} + \beta\rho$$

en donde E_i es la energía negativa total del i-ésimo nucleón y donde α y β son constantes. La energía total de amarre del núcleo es

$$\Delta E = \sum_{i=1}^{A} \Delta E_i = -\gamma\rho^{2/3} + \delta\rho \tag{16–106}$$

en donde γ y δ son otras constantes. Si esta ecuación es válida, el radio nuclear R se colapsará al alcance a del potencial, debido a que conduciría a un valor grande de ρ y haría aumentar al máximo ΔE.** En estas circunstancias, todos los nucleones de los núcleos están dentro del alcance del potencial de interacción de los demás, y la energía potencial promedio del i-ésimo nucleón sería proporcional al número total de nucleones en el núcleo. Esto es,

$$\bar{V}_i \propto -A$$

Puesto que esto mismo es válido para cualquier otro nucleón, la energía potencial total promedio del núcleo es

$$\bar{V} = \sum_{i=1}^{A} \bar{V}_i \propto -A^2 \tag{16–107}$$

Sin embargo, puesto que la energía cinética promedio de cualquiera de los nucleones no depende de A, la energía cinética total promedio es

$$\bar{T} = \sum_{i=1}^{A} \bar{T}_i \propto +A \tag{16–108}$$

Con un núcleo colapsado, $\bar{V}$ es mucho mayor que $\bar{T}$, y esto es particularmente cierto para valores grandes de A. Así,

$$\Delta E = -(\bar{T} + \bar{V}) \simeq -\bar{V} \propto +A^2 \tag{16–109}$$

Podemos ver que la energía total de amarre es proporcional a A^2, a pesar del efecto del principio de incertidumbre, bajo la suposición de que existe el mismo potencial de interacción puramente de atracción para todos los pares de nucleones en un núcleo. Sin embargo, esto no es cierto, como tampoco lo es que todos los núcleos tengan el mismo radio $R = a$. Por consiguiente, la

* Observe que las ecuaciones (12–38) y (12–39) revelan que se obtiene el mismo resultado para un gas de Fermi en el que se vea explícitamente que se ha tomado en cuenta el principio de exclusión.

** El segundo término de la ecuación (16–106) debe ser mayor que el primero, ya que ΔE debe ser positivo. Por lo tanto, ΔE aumenta al incrementarse ρ, puesto que el segundo término varía con mayor rapidez que el primero.

www.FreeLibros.me

suposición es falsa. La realidad debe ser que los potenciales de interacción son diferentes entre pares de nucleones en diferentes estados cuánticos, siendo de repulsión en algunos estados, o que hay cierto tipo de coraza impenetrable de repulsión en los potenciales de interacción o que existe alguna combinación de esos dos efectos. Una de estas alternativas es absolutamente necesaria para mantener a los nucleones bastante separados, para que, en cualquier instante, uno de ellos interaccione solamente con un número *limitado* de los demás nucleones. Entonces, la energía de amarre de cada nucleón será independiente del número total de nucleones en el núcleo y la energía total de amarre del núcleo será proporcional a A, como se observó. Este requisito se describe, diciendo que las fuerzas nucleares deben conducir a la *saturación*.

La mayor parte de la información relativa a las fuerzas nucleares que puede obtenerse mediante el estudio de sistemas tan complejos como un *núcleo saturado* ($A \geqslant 4$) se encuentra contenida en los cuatro puntos que acabamos de ver. Pueden obtenerse informes más detallados por medio del estudio de sistemas más sencillos, en los que los efectos de las fuerzas nucleares pueden analizarse sin las complicaciones que caracterizan a los núcleos saturados. El más simple de ellos es el núcleo de *deuterio*, ${}^1\mathrm{H}^2$, o *deuterón*, en su estado base. Este sistema consiste de un neutrón y un protón ligados mediante el potencial de interacción para la fuerza neutrón-protón. Sus propiedades observadas son:

$$\begin{aligned} M_{{}^1\mathrm{H}^2} &= 2.014732 \text{ uam} \\ \Delta E &= 2.22 \text{ Mev} \\ i &= 1 \\ \mu_{i_z} &= +0.8574\mu_N \\ Q &= +2.74 \times 10^{-27} \text{ cm}^2 \end{aligned} \tag{16–110}$$

El deuterón tiene un pequeño momento cuadripolar Q, que indica que su densidad de probabilidad no es por completo esféricamente simétrica. Esto demuestra inmediatamente que el potencial de interacción neutrón-protón se complica, debido a que el estado base sería un estado* S esféricamente simétrico, si el potencial de interacción pudiera escribirse como $V(r)$, en donde r es la magnitud del vector de un núcleo al otro [hemos visto que esto es cierto en el caso del átomo de H y su potencial de Coulomb $V(r) \propto -1/r$. No es difícil probar esto para cualquier potencial de atracción $V(r)$, demostrando que el valor propio más bajo de la ecuación de Schrödinger (10–27) puede encontrarse siempre para $l = 0$]. Así, el potencial de interacción neutrón-protón no es simplemente de la forma $V(r)$. Una forma compatible con la existencia de un momento cuadripolar es

$$V(x, y, z) = V(r) + V'(r)\{3(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{r})/r^2 - \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2\} \tag{16–111}$$

* Los símbolos y los números cuánticos que representan se toman directamente de la teoría de la estructura electrónica de los átomos, excepto que, a menudo, se usa i en lugar de j, como en el modelo de capas.

www.FreeLibros.me

El primer término es el potencial esféricamente simétrico dominante. El segundo término provoca pequeñas desviaciones de la simetría esférica, debido a que su valor depende de los ángulos entre el vector **r** y los vectores de impulso angular de spin del nucleón $\mathbf{S}_1$ y $\mathbf{S}_2$; la cantidad $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ se resta, de tal modo que el promedio de todo el segundo término, sobre todas las direcciones de **r**, se anule.*

Es una costumbre llamar al segundo término *potencial tensorial.* Esta nomenclatura es poco afortunada, puesto que no se trata de un tensor, sino de un escalar, lo mismo que el primer término. Ninguno de esos dos términos cambia de signo en la operación de paridad, de tal modo que ambos son escalares y $V(-x, -y, -z) = V(x, y, z)$. El pequeño término no esféricamente simétrico mezcla un estado de valor más alto de l con el estado S dominante, para formar el estado fundamental del deuterón. Pero, puesto que $V(-x, -y, -z) = V(x, y, z)$ y el estado fundamental no está degenerado, la función propia para el sistema debe tener una paridad definida (vea la nota al pie de la página 455), y el estado que se mezcla debe tener la misma paridad que el S. Puesto que las paridades de estos estados son pares, si l es par, e impares, si l es impar (vea la ecuación 13–112), este estado puede ser un estado D, un estado G, etc. El estado D es el único de ellos que es posible, debido a que, para todos los demás, l es demasiado grande para llevar al número cuántico de spin $i = 1$. Así, se supone que el estado fundamental es una mezcla de los estados D y S. Para obtener $i = 1$, deben ser los estados $^3S_1$ y $^3D_1$. Los cálculos de las densidades de probabilidad y los valores correspondientes de momento cuadripolares, demuestran que el momento cuadripolar observado se obtiene con la mezcla

$$96\%\ ^3S_1 + 4\%\ ^3D_1 \tag{16–112}$$

en donde estos porcentajes dan la probabilidad de hallar al deuterón en cualquiera de los estados.

Esto se confirma mediante una comparación con el momento magnético observado μ_{i_z}. Si el estado fundamental del deuterón fuera un estado $^3S_1$ puro, entonces,

$$\mu_{i_z} = (\mu_{i_z})_p + (\mu_{i_z})_n \tag{16–113}$$

en donde $(\mu_{i_z})_p$ y $(\mu_{i_z})_n$ son las componentes z de momentos los magnéticos intrínsecos del protón y el neutrón, que proceden de sus spins. No habrá contribución orbital a partir del movimiento del protón cargado, puesto que $l = 0$, y los componentes z de los momentos magnéticos intrínsecos se sumarían puesto que los dos nucleones se encuentran en el estado de triplete, con sus spins "paralelos". Al evaluar $(\mu_{i_z})_p$ y $(\mu_{i_z})_n$ en la ecuación (16–113), se tiene $\mu_{i_z} = +2.7896\mu_N, -1.9103\mu_N = +0.8793\mu_N$, que es 2.6 por ciento ma-

* Este término tiene la misma dependencia direccional que el potencial magnético de interacción de dos momentos magnéticos. No obstante, no debe pensarse que se debe a la interacción magnética entre los momentos magnéticos relacionados con los spins, porque la intensidad de esas interacciones es varios órdenes de magnitud más pequeña que lo que se requiere para explicar el momento cuadripolar.

www.FreeLibros.me

yor que lo observado.* La correspondencia general confirma la conclusión de que el estado base es casi un estado puro $^3S_1$ y la discrepancia confirma la conclusión de que tiene mezclado un poco de algún otro estado. Cuando se calcula el momento magnético para la mezcla (16–113), el acuerdo con el valor observado es mejor que la exactitud de la observación. El hecho de que el potencial de interacción neutrón-protón no es por completo esféricamente simétrico resulta interesante; pero, en una primera aproximación, puede pasarse por alto, a energías bajas, debido a que la asimetría es pequeña. En la mayor parte de nuestros análisis pasaremos por alto este detalle y, por consiguiente, consideraremos que el estado base del deuterón es un estado $^3S_1$ puro.

Consideremos, entonces, el potencial de interacción esféricamente simétrico $V(r)$ y supongamos que tiene la forma de pozo cuadrado de radio R y profundidad V_0, como en la ecuación (16–114) y la figura 16–52.

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < R \\ 0, & r > R \end{cases} \tag{16–114}$$

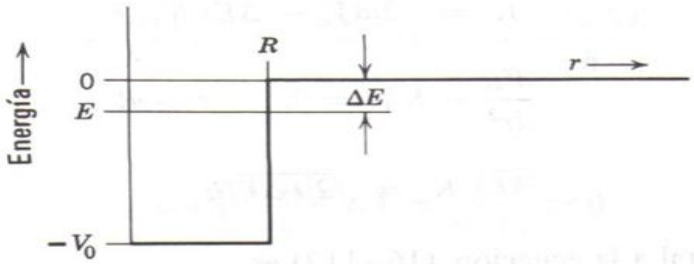

Figura 16-52. Potencial de pozo cuadrado.

Nos gustaría establecer una relación entre R, V_0 y la energía de amarre medida del estado base del deuterón, $\Delta E = 2.22$ Mev. Como pudiera suponerse, resultaría que no podríamos evaluar por separado R y V_0, a partir sólo de la cantidad conocida ΔE, y seguramente no podríamos evaluar tampoco la *forma* del pozo de potencial, sólo a partir de esta cantidad. Por consiguiente, cualquier forma es igualmente apropiada y, para simplificar los cálculos podemos tomar de manera conveniente el pozo cuadrado. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que debemos resolver para este problema es la (10–27) con $l = 0$, puesto que estamos considerando un estado S. Esto es,

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)]R(r) = 0$$

en donde μ es la masa reducida para el sistema de dos nucleones. O sea,

$$\mu = \frac{MM}{M + M} = \frac{M}{2}$$

* Los signos dan las orientaciones relativas del momento magnético, y los vectores del impulso angular de spin.

www.FreeLibros.me

siendo M la masa del nucleón. Es conveniente efectuar la substitución

$$u(r) = rR(r) \tag{16–115}$$

Esto conduce a la ecuación diferencial para $u(r)$,

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)]u(r) = 0 \tag{16–116}$$

que es la (15–76) para $l = 0$. La ecuación (16–116) es idéntica en la forma a la ecuación unidimensional del pozo cuadrado que resolvimos en el capítulo 8, y podríamos adaptar esa solución a nuestros fines presentes, definiendo nuevamente los términos. Sin embargo, resulta igualmente fácil volver a resolverla. Podemos escribir:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + K_{\mathrm{I}}^2 u = 0, \qquad r < R \tag{16–117}$$

en donde

$$K_{\mathrm{I}} = \sqrt{2\mu(V_0 - \Delta E)}/\hbar \tag{16–117'}$$

y

$$\frac{d^2u}{dr^2} - K_{\mathrm{II}}^2 u = 0, \qquad r > R \tag{16–118}$$

en donde

$$K_{\mathrm{II}} = \sqrt{2\mu\,\Delta E}/\hbar \tag{16–118'}$$

La solución general a la ecuación (16–117) es

$$u = A \operatorname{sen} K_{\mathrm{I}} r + B \cos K_{\mathrm{I}} r, \qquad r < R \tag{16–119}$$

Puesto que la función propia $R(r)$ no es divergente, la ecuación (16–115) muestra que $u = 0$ a $r = 0$. Esto necesita que $B = 0$ en la (16–119). Así,

$$u = A \operatorname{sen} K_{\mathrm{I}} r, \qquad r < R \tag{16–120}$$

La solución general a la ecuación (16–118) es

$$u = Ce^{-K_{\mathrm{II}} r} + De^{K_{\mathrm{II}} r}, \qquad r > R \tag{16–121}$$

Para evitar una divergencia cuando $r \to \infty$, debemos hacer $D = 0$. Entonces, la ecuación (16–121) se convierte en la

$$u = Ce^{-K_{\mathrm{II}} r}, \qquad r > R \tag{16–122}$$

Ahora, debemos igualar u y du/dr para las expresiones (16–120) y (16–122) a $r = R$. Esto da

$$A \operatorname{sen} K_{\mathrm{I}} R = Ce^{-K_{\mathrm{II}} R} \tag{16–123}$$

y

$$AK_{\mathrm{I}} \cos K_{\mathrm{I}} R = -CK_{\mathrm{II}} e^{-K_{\mathrm{II}} R} \tag{16–124}$$

www.FreeLibros.me

Si dividimos la ecuación (16–124) por la (16–123), obtendremos:

$$K_{|} \cot K_{|}R = -K_{||} \tag{16–125}$$

o bien,

$$\frac{\sqrt{2\mu(V_0 - \Delta E)}}{\hbar} \cot\left(\frac{\sqrt{2\mu(V_0 - \Delta E)}}{\hbar} R\right) = -\frac{\sqrt{2\mu\,\Delta E}}{\hbar} \tag{16–125'}$$

Esto es esencialmente la expresión (8–82), y puede resolverse por el mismo método gráfico utilizado para esa ecuación. La solución establece sólo una relación entre estos valores de V_0 y R que conducirá al valor observado de ΔE. Sin embargo, pronto veremos que hay pruebas provenientes de experimentos de dispersión que pueden utilizarse para evaluar R, de tal modo que puede determinarse V_0. Se ha descubierto que $V_0 \gg \Delta E$. Puesto que éste es el caso, resulta una buena aproximación despreciar ΔE en el término $(V_0 - \Delta E)$ y escribir la ecuación (16–125′) como:

$$\frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar} \cot\left(\frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar} R\right) \simeq -\frac{\sqrt{2\mu\,\Delta E}}{\hbar}$$

o bien,

$$\cot\left(\frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar} R\right) \simeq \sqrt{\frac{\Delta E}{V_0}} \simeq 0$$

La primera raíz (que corresponde al estado base) es

$$\frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar} R = \frac{\pi}{2}$$

o bien,

$$V_0 R^2 \simeq \pi^2\hbar^2/8\mu = \pi^2\hbar^2/4M \tag{16–126}$$

Si tomamos $R = 2 \times 10^{-13}$ cm, un valor indicado por los experimentos de dispersión, obtenemos $V_0 \simeq 25$ Mev y se confirma lo adecuado de nuestra aproximación.

A partir de esta información relativa al valor V_0R^2 para el potencial de interacción, que se ajusta al estado base del deuterón, no es difícil calcular las ubicaciones de los estados excitados. El cálculo predice que no hay estados excitados ligados, y esto lo verifica el experimento.* La figura 16–53 indica el supuesto potencial de pozo cuadrado $V(r)$ con su único estado ligado y,

* Compare esto con el átomo de H. Este sistema atómico, que es el más sencillo, tiene un número infinito de estados ligados cuyas propiedades proporcionan casi todos los datos que se necesitan para desarrollar la teoría de los sistemas atómicos. Una de las razones por las que el desarrollo de la teoría de los sistemas nucleares es difícil, es que los deuterones revelan muy pocos datos, porque no tienen estados ligados excitados.

www.FreeLibros.me

asimismo, la función propia asociada. No hay estados excitados ligados del sistema neutrón-protón, debido a que el potencial de interacción es sólo apenas suficientemente fuerte para ligar al estado base. Por la misma razón, la función propia del estado base tiene un largo extremo exponencial en la región $r > R$, y existe una probabilidad mayor que el 50 por ciento de que la separación entre los dos nucleones de un deuterón sea mayor que el rango de su potencial de interacción.

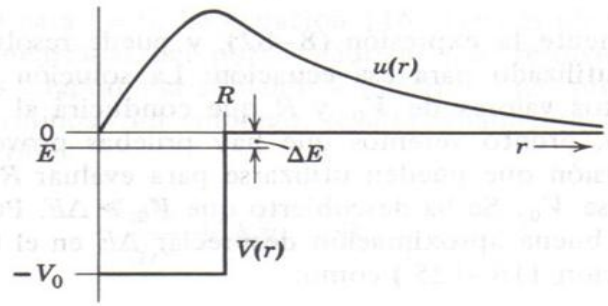

Figura 16-53. El potencial supuesto y la única función propia ligada para el deuterón.

Vamos a pasar, a continuación, del estado ligado ($E < 0$) del sistema neutrón-protón, a los estados no ligados ($E > 0$) del mismo sistema. Se han investigado experimentalmente, midiendo la sección para la dispersión de neutrones a partir de protones, utilizando técnicas similares a las empleadas para la dispersión de nucleones de los núcleos, y se analizan teóricamente por medio de los procedimientos del capítulo 15. Como vimos en las ecuaciones (15–73) y (15–74) de ese capítulo, la sección para la dispersión se especifica por medio de los corrimientos de fase δ_l. Además, la ecuación (15–78) nos demostró que los δ_l tendrán sólo valores apreciables para valores de l hasta $l = l_{\text{máx}}$, en donde,

$$l_{\text{máx}} \simeq KR = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar} R \tag{16–127}$$

Tomando el radio del potencial de interacción como $R \simeq 2 \times 10^{-13}$ cm, y si se evalúa la energía total E que da $l_{\text{máx}} = 1$, encontramos $E \simeq 10$ Mev. Así, a energías pequeñas comparadas a este valor, sólo δ_0 deberá tener un valor apreciable y se observará la dispersión isotrópica de onda S.* Puesto que se encuentran distribuciones angulares isotrópicas hasta energías de aproximadamente 5 Mev, resulta bastante seguro estudiar la dispersión en este rango de energías, utilizando las ecuaciones (15–80) y (15–81) que se aplican a la dispersión de ondas S. La última de esas ecuaciones puede escribirse:

$$\sigma = \frac{4\pi \operatorname{sen}^2 \delta_0}{K^2} \tag{16–128}$$

* Debe entenderse que en esta sección, todos los postulados se refieren al sistema CM, y que todas las energías se miden en dicho sistema. La relación entre la energía CM E y la energía LAB es $E = \frac{1}{2} E_{\text{LAB}}$.

www.FreeLibros.me

en donde

$$K = \sqrt{2\mu E}/\hbar \qquad (16\text{–}128')$$

Suponiendo todavía que el potencial es de pozo cuadrado (16–114), podremos aprovechar inmediatamente todos los resultados útiles de los cálculos para el potencial idéntico (15–82). Sin embargo, no nos limitaremos a escribir la expresión (15–91) para δ_0 debido a que da δ_0 en términos de V_0, y preferimos una expresión en función de la cantidad conocida ΔE.

Es fácil obtener una expresión aproximada de este tipo si comprendemos que la forma de la función propia en la región $r < R$ no va a cambiar mucho cuando la energía total E pase del valor negativo pequeño $-\Delta E$ a valores positivos pequeños que tomamos aquí en consideración, para todos estos valores, $|E| \ll V_0$, y la forma de la función propia en la región del pozo queda determinada casi enteramente por su profundidad V_0. Así, usamos la ecuación (16–120) dentro del pozo de potencial, esto es

$$u \simeq A \operatorname{sen} K_{|} r, \qquad r < R \qquad (16\text{–}129)$$

Fuera del pozo de potencial, empleamos la ecuación (15–88), que es

$$u = F \operatorname{sen}(Kr + \delta_0), \qquad r > R \qquad (16\text{–}130)$$

Ajustando u y du/dr a $r = R$, se tiene,

$$A \operatorname{sen} K_{|} r \simeq F \operatorname{sen}(KR + \delta_0) \qquad (16\text{–}131)$$

y

$$AK_{|} \cos K_{|} r \simeq FK \cos(KR + \delta_0) \qquad (16\text{–}132)$$

Al dividir la ecuación (16–132) por la (16–131), obtenemos:

$$K_{|} \cot K_{|} R \simeq K \cot(KR + \delta_0) \qquad (16\text{–}133)$$

Sin embargo, la ecuación (16–125) muestra que el primer miembro de la (16–133) es igual a $-K_{||}$, en donde

$$K_{||} = \sqrt{2\mu\,\Delta E}/\hbar \qquad (16\text{–}134)$$

Por consiguiente,

$$K \cot(KR + \delta_0) \simeq -K_{||} \qquad (16\text{–}135)$$

Puesto que vamos a utilizar ecuaciones de dispersión de onda S, que son válidas sólo para $KR \ll 1$, en la ecuación (16–135), podemos igualmente despreciar KR en comparación con δ_0, y escribir la ecuación como:

$$K \cot \delta_0 \simeq -K_{||} \qquad (16\text{–}136)$$

Unas cuantas operaciones con identidades trigonométricas muestran que la expresión (16–136) es idéntica a

$$\operatorname{sen}^2 \delta_0 \simeq \frac{K^2}{K^2 + K_{||}^2} \qquad (16\text{–}137)$$

www.FreeLibros.me

Al evaluar la expresión (16–128) a partir de la (16–137), y utilizar la (16–128′) y la (16–134), obtenemos una expresión para la sección transversal de dispersión neutrón-protón a baja energía,

$$\sigma \simeq \frac{4\pi}{K^2 + K_{\parallel}^2} = \frac{4\pi}{2\mu E/\hbar^2 + 2\mu\,\Delta E/\hbar^2} = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}\,\frac{1}{E + \Delta E} \qquad (16\text{–}138)$$

en términos de la energía de dispersión E y la energía de amarre conocida del deuterón $\Delta E = 2.22$ Mev. Esta expresión la obtuvo primeramente Wigner, en 1933. Está bastante de acuerdo con el experimento para E de aproximadamente 1 Mev hasta 5 Mev. No obstante, la expresión subestima considerablemente los valores observados de σ cuando E es pequeño en comparación a 1 Mev. Por ejemplo, la expresión (16–138) predice que σ se aproxima al valor constante $\sigma \simeq 2\pi\hbar^2/\mu\,\Delta E \simeq 2.4 \times 10^{-24}$ cm^2 = 2.4 bn, para $E \simeq 0$.* Sin embargo, el valor experimental de σ para $E \sim 1$ ev es $\sigma = 20.4$ bn. Aunque la ecuación (16–138) se obtuvo a partir de ciertas aproximaciones, cálculos en los que éstas no se utilizan, demuestran que apenas puede desviarse en un factor de 2. Así, el factor de discrepancia de 10 entre los valores previstos y medidos de σ demuestra definitivamente que hay algo mal en esa teoría.

En 1935, Wigner sugirió que el punto en el que la teoría podía estar equivocada era la suposición de que el potencial de interacción usado para ajustar la energía de amarre del deuterón puede utilizarse también para explicar la dispersión de un neutrón libre por un protón. En el deuterón, el neutrón y el protón deben interaccionar siempre en el estado $^3S_1$, debido a que el número cuántico de spin es $i = 1$, mientras que un neutrón libre y un protón pueden interaccionar en el estado $^1S_0$, lo mismo que en el $^3S_1$. De hecho, para un haz no polarizado de neutrones, incidente sobre un blanco no polarizado de protones libres, una cuarta parte de las dispersiones tendrán lugar en el estado de singulete $^1S_0$, en el que los spins son "antiparalelos", y $\frac{3}{4}$ de las dispersiones en el estado de triplete $^3S_1$, en donde los spins son "paralelos". La razón de 1 a 3 tiene lugar, debido a que hay un estado de singulete y tres de tripletes (sección 4, capítulo 12). Si el blanco contiene protones libres, cada dispersión será incoherente con todas las demás, y la sección observada de dispersión σ será un promedio de la sección de dispersión σ_s para el singulete y la de dispersión para el triplete, σ_t, pesado de acuerdo con las probabilidades relativas de $\frac{1}{4}$ y $\frac{3}{4}$. Esto es,

$$\sigma = \tfrac{1}{4}\sigma_s + \tfrac{3}{4}\sigma_t \qquad (16\text{–}139)$$

La sección de dispersión de triplete es lo que en realidad se evaluó en la expresión (16–138). La sección de dispersión de singulete tendrá la misma forma general que la (16–138); pero la cantidad ΔE tendrá un valor diferente, si el potencial de interacción neutrón-protón en el estado de singulete es diferente que en el estado de triplete. Dejando margen para esta posibilidad, Wigner escribió:

$$\sigma \simeq \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}\left[\frac{1}{4(E + \Delta E_s)} + \frac{3}{4(E + \Delta E_t)}\right] \qquad (16\text{–}140)$$

* El *barn* (bn) es una unidad de sección transversal, que se usa comúnmente en la física nuclear; 1 bn = 10^{-24} cm^2.

www.FreeLibros.me

en donde $\Delta E_t = 2.22$ Mev. Al igualar esto con el valor observado $\sigma = 20.4$ bn para $E \sim 1$ ev, ΔE_s puede determinarse. El resultado es $\Delta E_s \simeq 0.06$ Mev. Puesto que esto es muy diferente de ΔE_t, resulta obvio que el potencial de interacción es distinto en los estados de singulete y de triplete. Puesto que el primero corresponde a spins "antiparalelos", mientras que el último lo hace a spins "paralelos", vemos que el potencial de interacción de un protón y un neutrón depende de la orientación relativa de los spins de los dos nucleones. Esto se describe, diciendo que *el potencial de interacción depende del spin.*

El valor experimental de σ para $E \sim 1$ ev no determina el signo de ΔE_s debido a que, para $E \ll |\Delta E|$, puede demostrarse que la expresión

$$\sigma \simeq \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} \frac{1}{E + |\Delta E|}$$

es válida, si $\Delta E < 0$, como lo es la expresión (16–138), si $\Delta E > 0$. El corrimiento de fase toma otro signo, si ΔE cambia de signo; pero la sección de dispersión (16–128) es independiente del signo del cambio corrimiento de fase. Así, el estado de singulete puede ser un estado ligado estable, con energía de amarre $\Delta E_s > 0$, o un estado *virtual* inestable, con energía de amarre $\Delta E_s < 0$ (vea la sección 6 del capítulo 15). La observación de que no hay estados estables que contengan dos neutrones o dos protones, para los cuales exige el principio de exclusión que el estado de energía más baja sea el singulete $^1S_0$, sugiere que el estado de singulete del sistema que contiene un neutrón y un protón es también inestable, o sea, virtual. El hecho de que este estado sea en realidad virtual, se demuestra mediante las mediciones de dispersión de neutrones de baja energía por un blanco de hidrógeno molecular, a temperaturas muy bajas. La molécula de hidrógeno puede tener dos protones "paralelos" (ortohidrógeno) o "antiparalelos" (parahidrógeno). El último tipo tiene el estado de energía más baja y, por esto, a temperaturas muy bajas, esencialmente todas las moléculas se transformarán eventualmente en ese tipo, mediante colisiones y otros procesos. Para neutrones de longitud de onda de De Broglie comparable al espaciamiento internuclear de la molécula, la onda total dispersada de la molécula será una combinación coherente de las ondas dispersadas a partir de dos protones. Puesto que en uno de esos procesos de dispersión, el neutrón y el protón están en un estado de singulete, mientras que en el otro, se encuentran en el de triplete, la sección total de dispersión es sensible a los signos relativos de los corrimientos de fase del singulete y del triplete. Un análisis hecho por Teller (1937) de las medidas que se tomaron por sugerencia suya, demuestra que estos corrimientos de fase son de signos opuestos y, por tanto, que el estado de singulete del sistema neutrón-protón es virtual.

Los puntos de la figura 16–54 muestran algunos de los valores medidos de la sección para la dispersión de neutrones por protones libres, en el rango de energías de onda *S*. Dentro de su exactitud, estos datos pueden encajar perfectamente en una ecuación que es básicamente la misma que la (16–140); pero incluyendo correcciones para las aproximaciones que hicimos en su derivación. Esto se indica mediante la línea continua. Estas correcciones hacen que la ecuación exacta dependa más de las características del potencial de

www.FreeLibros.me

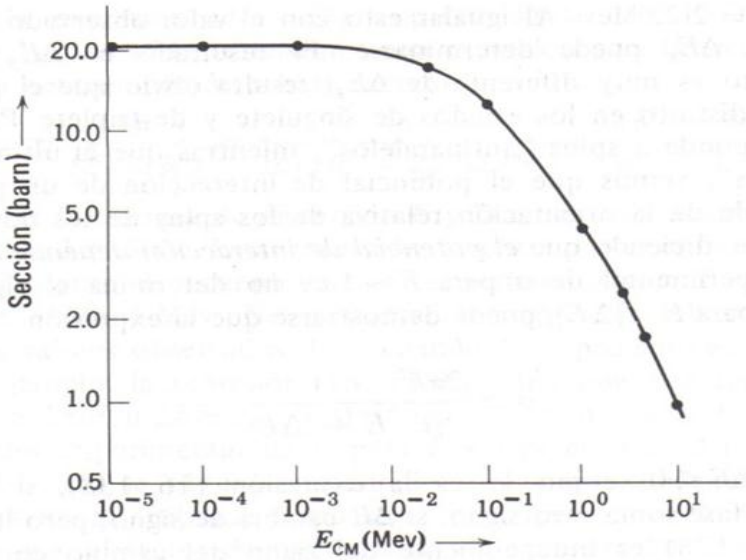

Figura 16-54. Secciones experimentales y ajustes teóricos para la dispersión de neutrones por protones libres, en el rango de energías de onda *S*.

interacción neutrón-protón que la (16–140) y, en esa forma, permiten determinar el radio y la profundidad de los potenciales de interacción tanto de triplete como de singulete, mediante un ajuste de los datos.* (Es también necesario incluir los datos obtenidos en la dispersión de neutrones por hidrógeno molecular a bajas temperaturas.) Los valores así determinados son:

$$\begin{aligned} R_t &= 2.05 \times 10^{-13}\ \text{cm} \\ V_{0_t} &= 33.9\ \text{Mev} \\ R_s &= 2.9 \times 10^{-13}\ \text{cm} \\ V_{0_s} &= 11.7\ \text{Mev} \end{aligned} \tag{16–141}$$

Observe que, desde luego, el potencial de interacción depende del spin y que el potencial de singulete es considerablemente más débil que el de triplete para la interacción neutrón-protón.

Veamos ahora la interacción protón-protón. Para estas partículas idénticas con $s = \frac{1}{2}$, el principio de exclusión desempeña un papel importante al eliminar ciertos estados, debido a que exige que la función propia completa para el sistema de dos partículas sea antisimétrica con respecto a un intercambio de sus índices. Así, la parte del spin de la función propia debe ser antisimétrica, si la parte espacial es simétrica, y viceversa (vea la sección 4, del capítulo 12). La simetría de la parte espacial puede evaluarse con facilidad, si se comprende que, para este sistema de dos partículas, el intercambio de sus índices es lo

* Por ejemplo, el radio *R* aparece por separado en el término que se ha omitido entre las ecuaciones (16–135) y (16–136). Vea el ejercicio 20 que aparece al final de este capítulo.

www.FreeLibros.me

mismo que el cambio de los signos de las coordenadas, debido a que el origen de coordenadas está en el CM de las dos partículas. Por lo tanto, la parte espacial de la función es simétrica si su paridad es par, y antisimétrica, si su paridad es impar, y la paridad es par, si lo es l, e impar, en el caso de que lo sea l (vea la ecuación 13–112). Así, los estados $S, D, G, \ldots$ corresponden a partes espaciales simétricas y requieren que la parte de spin sea de triplete antisimétricas. Lo contrario es también cierto, para los estados $P, F, H, \ldots$. Los estados posibles en los que los dos protones pueden interaccionar son solamente los ^1S, ^3P, ^1D ^3F, ^1G, $^3H, \ldots$.

En los experimentos de dispersión, a energías un poco más bajas que 10 Mev, KR es suficientemente pequeño para que los dos protones interaccionen sólo en el estado ^1S, que es el $^1S_0$. La exclusión del estado $^3S_1$ simplifica el análisis de los experimentos de dispersión protón-protón, lo cual, desde luego, es una buena ayuda, puesto que el análisis se ve complicado por la existencia de una interacción de Coulomb, así como también la nuclear entre los dos protones. Debido a la interacción de Coulomb, la distribución general angular no es isotrópica en el sistema del CM, aun cuando tiene dispersión de onda S en lo que concierne a su interacción nuclear. La figura 16–55 muestra las secciones diferenciales para la dispersión protón-protón, medida a varias energías bajas diferentes y, asimismo, ajustes teóricos a esas medidas. El examen de la figura 15–2 demuestra que $d\sigma/d\Omega$ debe ser simétrico, en torno

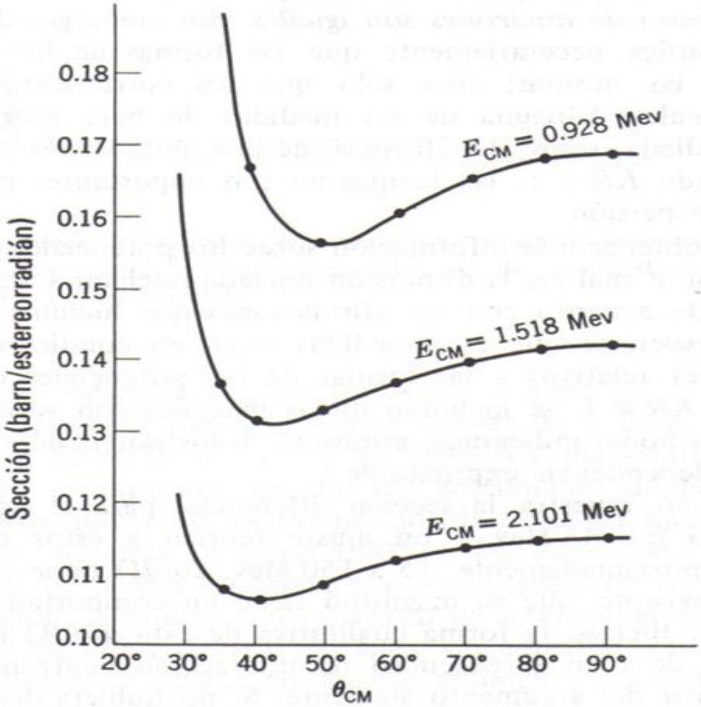

Figura 16-55. Secciones diferenciales experimentales y ajustes teóricos para dispersión protón-protón, en el rango de energías de onda S. Tomado de G. Breit y R. L. Gluckstern, *Annual Review of Nuclear Science*, Vol. 2, Annual Reviews, Stanford (1953).

www.FreeLibros.me

a 90°, debido a que, si se dispersa un protón en el ángulo θ, el otro debe dispersarse a $180° - \theta$. Esto se verifica experimentalmente y se utiliza, a veces, como control experimental. A ángulos menores que, aproximadamente 30°, $d\sigma/d\Omega$ se eleva muy rápidamente. En esta región, sigue la dependencia angular rápida de la dispersión de interacción de Coulomb (vea la ecuación 15–94), que domina a la dispersión de interacción nuclear. Cerca de 90°, la dispersión de interacción nuclear de onda S es la que predomina, y $d\sigma/d\Omega$ es casi isotrópico. Entre esos valores, hay una región en la que las interacciones nucleares y de Coulomb interfieren de manera destructiva. Esta interferencia permite determinar el signo, así como también la magnitud del corrimiento de fase de interacción nuclear. Se ha descubierto que para energías de hasta cerca de 5 Mev, el corrimiento de fase puede coincidir con un potencial de interacción protón-protón de pozo cuadrado con radio y profundidad exactamente iguales a R_s y V_{0_s} de la expresión (16–141), el radio y la profundidad que se determinan para el potencial de interacción neutrón-protón de estado $^1S_0$. Así, a bajas energías, los potenciales de interacción neutrón-protón y protón-protón parecen ser iguales en el estado $^1S_0$, que es el único estado en que puede hacerse una comparación. Recuerde también que los núcleos espejo indican que los potenciales de interacción neutrón-neutrón y protón-protón, son los mismos en el rango de baja energía que caracteriza a las energías relativas de los dos nucleones en el núcleo. De acuerdo con todo esto, llegamos a la conclusión de que, *a bajas energías los potenciales de interacción entre todos los pares de nucleones son iguales.* Sin embargo, debe recordarse que esto no significa necesariamente que las formas de los potenciales de interacción sean las mismas; sino sólo que los corrimientos de fase que producen son iguales. Ninguna de las medidas de baja energía puede dar información detallada sobre las formas de los potenciales de interacción, puesto que, cuando $KR < 1$, las formas no son importantes para determinar las secciones de dispersión.

Con el fin de obtener más información sobre los potenciales de interacción, es necesario medir y analizar la dispersión nucleón-nucleón a altas energías, en donde $KR \gg 1$. De acuerdo con las afirmaciones que hicimos en el capítulo anterior, puede esperarse que esas medidas estén en condiciones de proporcionarnos informes relativos a las formas de los potenciales de interacción. Puesto que, para $KR \gg 1$, se incluirán ondas parciales con varios valores de l, las medidas deben poder indicarnos, asimismo, si los potenciales de interacción tienen o no una dependencia explícita de l.

La figura 16–56 muestra la sección diferencial para el sistema neutrón-protón, medida a $E = 45$ Mev y un ajuste teórico a estos datos. A otras energías, desde, aproximadamente, 15 a 150 Mev, $d\sigma/d\Omega$ tiene en gran parte el mismo aspecto, excepto que su magnitud tiene un comportamiento de aproximadamente $1/E$. Incluso la forma cualitativa de esta $d\sigma/d\Omega$ indica que hay una dependencia de l en el potencial de interacción neutrón-protón, como puede verse a partir del argumento siguiente. Si no hubiera dependencia de l, el potencial podría escribirse como $V(r)$, y su sección diferencial de dispersión a altas energías podría evaluarse, al menos cualitativamente, gracias a la aproximación de Born. No obstante, en la sección 4 del capítulo 15, vimos que para $KR \gg 1$ parece ser una característica general de todos los potenciales

www.FreeLibros.me

$V(r)$ el que $d\sigma/d\Omega$ sea una función muy asimétrica de θ, con valores mucho mayores para $\theta \sim 0°$ que para $\theta \sim 180°$. Esto contrasta fuertemente con la simetría en torno a 90° que posee la $d\sigma/d\Omega$ de la figura 16–56 y esto muestra que el potencial de interacción no se puede escribir como $V(r)$. Serber (1948) propuso un potencial de interacción dependiente de l, que es capaz de ajustar los datos experimentales para la interacción neutrón-protón, al menos hasta energías de aproximadamente 150 Mev. Este *potencial de Serber* puede escribirse como:

$$V_l(r) = \frac{[1 + (-1)^l]}{2} V(r) \tag{16–142}$$

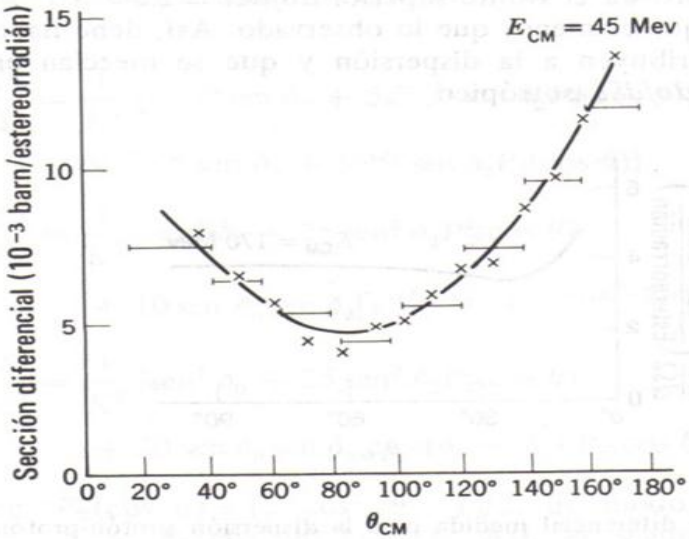

Figura 16-56. Secciones diferenciales experimentales y ajustes teóricos para la dispersión neutrón-protón a alta energía. Tomado de R. Christian y E. W. Hart, *Phys. Rev.*, 77, 441 (1950).

Puesto que $V_l(r)$ desaparece para todos los valores de l impares, dará un corrimiento de fase cero para todos esos valores de l. Esto, a su vez, da una $d\sigma/d\Omega$ que tiene simetría en torno a 90° debido a que sólo los términos pares en l quedan en la expresión general del corrimiento de fase (15–73) para $d\sigma/d\Omega$ y debido a que todos los polinomios de Legendre $P_l(\cos\theta)$ para valores pares de l tienen simetría en torno a 90° [vea la expresión (15–53)]. Observe que el potencial de Serber contribuye a la tendencia de las fuerzas nucleares hacia la saturación, al eliminar el potencial de interacción nucleón-nucleón en la mitad de los estados cuánticos posibles; sin embargo, esto no es suficiente. Para que las fuerzas nucleares conduzcan realmente a la saturación, es necesario que haya repulsiones en ciertas circunstancias.

El estudio de la dispersión protón-protón de alta energía indica dónde se presentan las repulsiones. La figura 16–57 muestra $d\sigma/d\Omega$ para la dispersión protón-protón, medida a $E = 170$ Mev. En el rango de energía de, aproxima-

www.FreeLibros.me

damente, 50 a 200 Mev, $d\sigma/d\Omega$ tiene casi la misma forma, una región plana alargada en donde $d\sigma/d\Omega \simeq 4 \times 10^{-3}$ bn por unidad de ángulo sólido, y una elevación brusca en ángulos pequeños, siguiendo la $d\sigma/d\Omega$ de la interacción de Coulomb que predomina en esos ángulos. Cuando se tomaron por primera vez esas medidas, se pensó que, debido a que $d\sigma/d\Omega$ es isotrópico en la región angular en la que predomina la dispersión de interacción nuclear, se trataba en cierto modo de un caso de dispersión de onda S pura, aun cuando $KR > 1$. No obstante, el valor máximo posible de $d\sigma/d\Omega$ para la dispersión de onda S de dos protones es*

$$d\sigma/d\Omega = (2/K)^2$$

A $E = 170$ Mev, esto da el límite superior $d\sigma/d\Omega \simeq 2.5 \times 10^{-3}$ bn por unidad de ángulo sólido, que es menor que lo observado. Así, debe haber varias ondas parciales que contribuyen a la dispersión y que se mezclan entre sí, de tal modo que den un $d\sigma/d\Omega$ isotrópico.

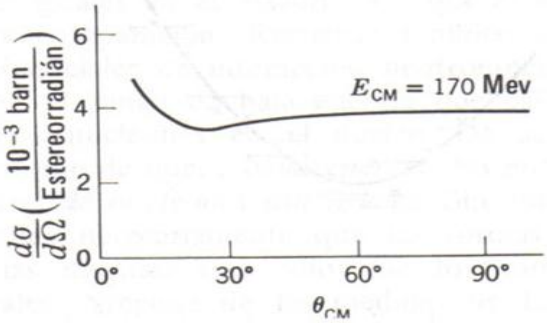

Figura 16-57. Sección diferencial medida para la dispersión protón-protón a alta energía.

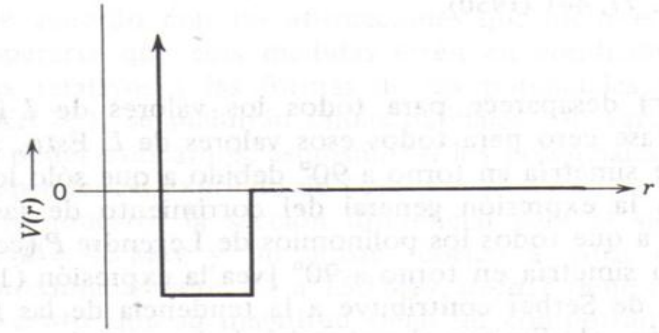

Figura 16-58. Potencial con una fuerte coraza de repulsión.

* Excepto por el factor de 2, ésta es la ecuación (15–80) para $\text{sen}^2\,\delta_0 = 1$. El factor de 2 se presenta porque hay dos partículas identicas en la dispersión protón-protón.

www.FreeLibros.me

Jastrow (1951) ha demostrado que esto implica la existencia de una *coraza de repulsión fuerte* en el potencial de interacción, o sea, que el potencial tiene la forma del tipo indicado en la figura 16–58. El análisis detallado que condujo a esta conclusión es muy complicado; pero los puntos esenciales pueden verse a partir de un razonamiento simple. Consideremos una dispersión protón-protón a $E = 170$ Mev y supongamos que, como para la dispersión neutrón-protón, el potencial de Serber describe la interacción. Puesto que $KR \simeq 2$ en esta energía, sólo pueden ser apreciables los corrimientos de fase de ondas S, P y D; pero el corrimiento de fase de onda P es cero para el potencial de Serber, de tal modo que la sección diferencial de dispersión puede obtenerse a partir de la expresión (15–73), haciendo todos los corrimientos de fase iguales a cero, excepto δ_0 y δ_2.* Cuando $P_0(\cos\theta) = 1$, se tiene:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{K^2}\{e^{-i\delta_0}\operatorname{sen}\delta_0 + 5e^{-i\delta_2}\operatorname{sen}\delta_2 P_2(\cos\theta)\}$$
$$\times\{e^{i\delta_0}\operatorname{sen}\delta_0 + 5e^{i\delta_2}\operatorname{sen}\delta_2 P_2(\cos\theta)\}$$
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{K^2}\{\operatorname{sen}^2\delta_0 + 25\operatorname{sen}^2\delta_2 P_2^2(\cos\theta)$$
$$+ 10\operatorname{sen}\delta_0\operatorname{sen}\delta_2[e^{i(\delta_0-\delta_2)} + e^{-i(\delta_0-\delta_2)}]P_2(\cos\theta)\}$$
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{K^2}\{\operatorname{sen}^2\delta_0 + 25\operatorname{sen}^2\delta_2 P_2^2(\cos\theta)$$
$$+ 20\operatorname{sen}\delta_0\operatorname{sen}\delta_2\cos(\delta_0-\delta_2)P_2(\cos\theta)\} \qquad (16\text{–}143)$$

Ahora bien, $P_2(\cos\theta) = (3\cos^2\theta - 1)/2$, de modo que $P_2(\cos 0°) = P_2(\cos 180°) = 1$, y $P_2(\cos 90°) = -\frac{1}{2}$. Así, el segundo término de la expresión (16–143) es mayor en 0° y 180° que en 90° y, si δ_0 y δ_2 son positivos, el tercer término será positivo en 0° y 180° y negativo en 90°. Esto hace que $d\sigma/d\Omega$ sea mucho menor en 90° que en 0° y 180° y, desde luego, no será isotrópica, como se observa experimentalmente. Para lograr la isotropía, es necesario que δ_0 y δ_2 tengan signos opuestos. Ahora bien, para un potencial puramente de atracción, de la intensidad utilizada para ajustar los datos de baja energía, δ_0 y δ_2 serán positivos (vea la sección 5 del capítulo 15). No obstante, para un potencial de la forma indicada en la figura 16–58, δ_0 se hará negativo a energías altas en comparación a la profundidad de la región de atracción, puesto que el efecto de la región de atracción se hace despreciable y sólo la coraza de repulsión, que produce un corrimiento de fase negativos, será importante. Sin embargo, la coraza de repulsión no es importante para determinar el corrimiento de fase δ_2 hasta que la energía se hace extremadamente alta, debido a la dependencia de r^l que tienen las funciones propias para $r \to 0$, lo cual hace que la onda parcial $l = 2$ sea menor en la región de la coraza de repulsión que en la de atracción; a $E = 170$ Mev,

* Puesto que ésta es una dispersión protón-protón, sólo son posibles los estados ^1S y ^1D. Por consiguiente, sólo hay un corrimiento de fase para $l = 0$ y otro para $l = 2$.

www.FreeLibros.me

y energías similares, δ_2 será positivo. Al ajustar los datos de dispersión protón-protón a altas energías, se descubre que *el radio del núcleo es de aproximadamente* 0.5×10^{-13} cm. A continuación, puede ajustarse la región de atracción, para que esté de acuerdo con los datos de baja energía. Si su fuerza se hace algo mayor que la del simple potencial de atracción de pozo cuadrado que se describe en los párrafos (16–141), el valor positivo correcto para δ_0 puede obtenerse a energías bajas, debido a que el cambio de fase positivo producido por la región de atracción, se hace mayor que el cambio de fase negativo, producido por la coraza de repulsión a esas energías.

Los trabajos recientes de numerosos investigadores muestran que, al utilizar una *coraza de repulsión* en un *potencial dependiente del spin,* que es similar al *potencial de Serber* en el sentido de que es débil para l impar, se puede encontrar un potencial de interacción que da un buen ajuste a los datos tanto de neutrón-protón como de protón-protón, a todas las energías de hasta más de 100 Mev, a condición de que se incluyan el *potencial tensorial* y un *potencial de spin-órbita.* Este último es proporcional a $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ y es de atracción, si esta cantidad es positiva, y de repulsión, si es negativa.* Una de las razones para esta inclusión es contribuir a hacer encajar los experimentos que encuentren que los vectores de impulso angular de spin de dos nucleones se polarizan parcialmente mediante el proceso de dispersión mutua. Evitamos mencionar los parámetros para el potencial de interacción muy complicado que satisface todos estos datos, debido a que ese parámetro no se ha determinado en forma única. De hecho, hay muchos que opinan que no sería posible encontrar un potencial único y que es mejor expresar lo que se sabe respecto a las fuerzas nucleares, en términos de conjuntos de corrimientos de fase que describen las interacciones nucleón-nucleón en varios estados cuánticos y a diversas energías. Hay incluso ambigüedades relativas a los valores de esos corrimientos de fase.

Sin embargo, en la actualidad, quedan pocas dudas respecto a la existencia de corazas de repulsión (al menos en los estados de singulete, que son los más importantes en la interacción protón-protón). En primer lugar, las corazas de repulsión producen, evidentemente, fuerzas nucleares que llevan a la saturación; aunque se creía originalmente que no llevaban a la saturación a la densidad correcta, debido a que el radio $\simeq 0.5 \times 10^{-13}$ cm de las corazas de repulsión es considerablemente menor que el espaciamiento medio de centro a centro $\simeq 1.2 \times 10^{-13}$ cm de los nucleones, en un núcleo saturado. De todos modos, los cálculos recientes indican que las corazas de repulsión deben producir en realidad fuerzas nucleares que conducen a la saturación, a densidades y energías de amarre cercanas a las observadas en los núcleos.

Estos cálculos se basan en una teoría de estructura nuclear que se debe a Brueckner (ca. 1953) y otros. La teoría parte del potencial de interacción nucleón-nucleón que se describe en el penúltimo párrafo y, a continuación, sigue un procedimiento autoconsistente, similar al de la teoría de Hartree del átomo. Sin embargo, para el núcleo, el procedimiento es mucho más difícil que para el átomo, puesto que no hay una sola interacción dominante análoga

* Observe que la interacción spin-órbita entre dos nucleones es similar a la interacción spin-órbita entre un nucleón y un núcleo (vea la sección 8). Los dos efectos están probablemente relacionados.

www.FreeLibros.me

a la interacción electrón-núcleo del átomo y porque las fuerzas nucleares que deben incluirse en la teoría son muy complejas. Aunque la teoría se encuentra todavía en su infancia, se han obtenido algunos resultados muy alentadores. Además de determinar densidades nucleares y energías de amarre cercanas a las observadas, se han hallado valores bastante buenos para V_0 y W_0, las partes real e imaginaria del potencial del modelo óptico. Además, la teoría da una buena idea de lo que sucede en realidad en un núcleo. Por ejemplo, el procedimiento autoconsistente indica que los nucleones interaccionan por pares y no tres o más simultáneamente. Esta es la justificación para suponer que el potencial nucleón-nucleón, obtenido a partir del análisis de experimentos que incluyen la interacción de dos nucleones libres, se aplica a interacciones entre los nucleones de un núcleo. Se ha descubierto también que las características del potencial de interacción que son más importantes para determinar la estructura nuclear, son: *a*) hay corazas de repulsión; *b*) las regiones de atracción de los potenciales de interacción de estado S son apenas suficientemente fuertes para vencer a las corazas de repulsión y proporcionar un amarre neto para el sistema neutrón-protón; y *c*), todos los potenciales de interacción del estado P se anulan o son muy débiles.* Por supuesto, el principio de exclusión es también extremadamente importante. A pesar de las incertidumbres en el estado actual de conocimientos relativos a las fuerzas nucleares se han logrado avances en la teoría de la estructura nuclear, debido a que las características de las fuerzas nucleares que, aparentemente, son las más importantes, son por fortuna, las menos inciertas.

16. Mesones

En la sección anterior presentamos una descripción de ciertas características de las fuerzas nucleares que se observan en los experimentos. Aunque se echó mano de la teoría en la descripción, se utilizó sólo para correlacionar las observaciones experimentales y no para explicarlas. Sin embargo, existe una teoría que intenta explicar la forma en que las propiedades de las fuerzas nucleares se basan en atributos más fundamentales de la naturaleza. Se trata de la *teoría mesónica o del mesón,* que se originó con el trabajo de Yukawa en 1935.

Imaginemos dos nucleones en interacción. Yukawa propuso que, junto con el sistema existe un "campo" asociado que describe la interacción y que el mecanismo real de dicha interacción involucra el intercambio de un "cuanto" del campo entre los dos nucleones (es decir, en la interacción un nucleón emite un "cuanto" y el otro lo absorbe). En la figura 16–59 se ilustra esta situación en forma esquemática. En una interacción de este tipo, el impulso que lleva el "cuanto" se transfiere de un nucleón al otro y éste es el origen de la fuerza que actúa entre los nucleones.

Al postular esta teoría, Yukawa se guió por la analogía que tiene con el caso de la interacción de Coulomb entre un sistema de dos partículas cargadas.

* Los estados con valores de l más altos que los del estado P no son muy importantes a las energías que caracterizan al movimiento de los nucleones en el núcleo.

www.FreeLibros.me

Figura 16-59. Representación esquemática del proceso de intercambio de un mesón.

De acuerdo con la teoría de la electrodinámica cuántica tan bien desarrollada y que tan buenos resultados ha dado (vea la nota al pie de la página 452), asociado a este sistema hay un campo electromagnético que describe la interacción, y ésta se origina realmente del intercambio de un cuanto de dicho campo entre las dos partículas cargadas. Los cuantos del campo electromagnético son los entes de masa en reposo nula que, en toda esta obra, hemos denominado simplemente cuantos.

La electrodinámica cuántica señala que el largo alcance de la interacción de Coulomb, es el resultado de la masa en reposo nula de los cuantos que se intercambian en la interacción, y que dicho alcance no sería largo si los cuantos tuvieran una masa en reposo finita. Yukawa adaptó la teoría al caso del sistema de nucleones que interaccionan con una fuerza nuclear de corto alcance, suponiendo que los "cuantos" del "campo" que describen la interacción, tienen una masa en reposo finita. Estos "cuantos" se denominan *mesones* y el "campo" se ha llamado *campo mesónico.* No intentaremos ir más allá de los primeros pasos de un desarrollo cuantitativo de la teoría mesónica, porque esto implicaría adentrarnos en terrenos muy difíciles de las matemáticas. No obstante, existen ciertas características de la teoría que no son difíciles de describir.

Por ejemplo, es fácil calcular la masa en reposo del mesón m_π requerida para obtener el alcance observado R de las fuerzas nucleares. Analicemos el proceso que se representa en la figura 16–59. En él, un nucleón emite un mesón cuya masa en reposo es m_π, dicho mesón recorre una distancia del orden de R y, finalmente, el otro nucleón lo absorbe. Mientras el mesón está en movimiento, la conservación de la energía total se viola porque la energía total del sistema es igual a las energías de masa en reposo de los dos nucleones en el estado inicial y final, y es igual también a las energías de la masa en reposo de los dos nucleones más, cuando menos, la energía de la masa en reposo de un mesón en el estado intermedio. No obstante, el principio de incertidumbre establece que la violación de la conservación de energía en la cantidad de

$$\Delta E \sim m_\pi c^2$$

no es posible si no sucede durante un tiempo mayor que $\Delta\tau$, en donde

$$\Delta\tau\, \Delta E \sim \hbar$$

porque no podría medirse una violación de este tipo. La velocidad del mesón

www.FreeLibros.me

no puede ser mayor a c, de modo que su tiempo de vuelo $\Delta\tau$ es, cuando menos,

$$\Delta\tau \sim R/c$$

Estas tres ecuaciones dan

$$m_\pi c^2 \sim \hbar/\Delta\tau \sim \hbar c/R$$

o bien,

$$m_\pi \sim \hbar/Rc \tag{16–144}$$

Haciendo que $R \sim 2 \times 10^{-13}$ cm, esto predice que $m_\pi \sim 200m$, en donde m es la masa en reposo del electrón. Vale la pena volver a enunciar el argumento en la siguiente forma. Un mesón cuya masa en reposo es $m_\pi \sim \hbar/Rc$, conduce a una interacción de rango $\sim R$ porque si los nucleones están separados por una distancia mucho mayor que R, no podría haber interacción, ya que su tiempo de vuelo sería tan largo que el principio de incertidumbre permitiría hacer una medida lo suficientemente exacta de la energía total que permita detectar la violación a la conservación de la energía.

Si hacemos un análisis detallado utilizando la mecánica cuántica relativista, llegamos a la predicción también detallada del potencial de interacción que se origina en el intercambio del mesón. Este se conoce como el *potencial de Yukawa*,

$$V(r) = -\frac{q^2}{r}\, e^{-r/R} \tag{16–145}$$

en donde

$$R = \hbar/m_\pi c \tag{16–145'}$$

que se muestra gráficamente en la figura 16–60. No es difícil seguir los pasos que llevan a este potencial. Se puede obtener una ecuación de onda relativista para el mesón, expresando la ecuación (1–25)

$$E^2 = c^2p^2 + m_\pi^2 c^4$$

en donde

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

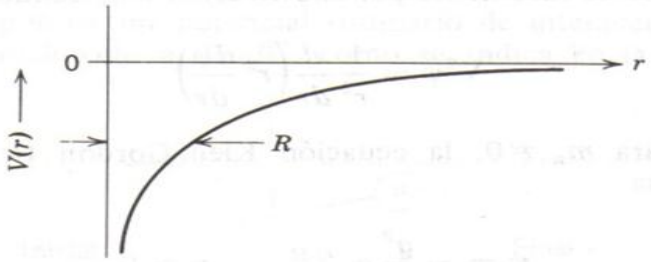

Figura 16-60. El potencial de Yukawa.

www.FreeLibros.me

haciendo las substituciones (7–77)

$$p_x \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$p_y \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

$$p_z \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

$$E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

y luego, multiplicando la ecuación del operador resultante en la igualdad

$$\psi = \psi$$

Esto da

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -c^2\hbar^2 \nabla^2 \psi + m_\pi^2 c^4 \psi$$

o bien,

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{m_\pi^2 c^2}{\hbar^2} \psi \tag{16–146}$$

que se conoce como la *ecuación Klein-Gordon.* Para $m_\pi = 0$, se reduce a la ecuación de onda

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$$

para los cuantos del campo electromagnético que tiene una solución estática de la forma

$$\psi = -e^2/r, \qquad r > 0$$

como puede verificarse fácilmente por substitución empleando la relación

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{d\psi}{dr}\right)$$

para $\psi = \psi(r)$. Para $m_\pi \neq 0$, la ecuación Klein-Gordon tiene una solución estática de la forma

$$\psi = -\frac{g^2}{r} e^{-r/R}, \qquad r > 0$$

www.FreeLibros.me

en donde

$$R = \hbar/m_\pi c$$

como se puede verificar por substitución. Puesto que la solución a la ecuación de ondas para los cuantos de masa en reposo nula da el potencial de Coulomb de interacción para el campo electromagnético, podemos suponer que la solución para los cuantos de masa en reposo diferente a cero es el potencial de interacción para el campo mesónico, es decir, el potencial de Yukawa (16–145).

La constante q^2 de la (16–45) determina la intensidad del potencial. Aunque evidentemente este potencial no puede explicar la existencia de la coraza de repulsión de corto alcance en la interacción nucleón-nucleón, sí puede explicar la región de atracción que está fuera de la coraza. Si lo ajustamos a esta región, podremos fijar el valor de q^2. En términos de la constante adimensional $q^2/\hbar c$, es

$$q^2/\hbar c \simeq 15 \qquad (16\text{–}147)$$

En la forma original de la teoría mesónica, se supuso que todos los mesones tienen una carga eléctrica de $-e$ ó $+e$. Entonces, la teoría predice que un proceso de interacción típico entre un protón y un neutrón, llevaría a la situación que se ilustra esquemáticamente en la figura 16–61. En ella, n representa un neutrón, p es un protón y π^- representa un mesón π^- cuya carga es $-e$. Podemos ver que, como resultado de la interacción, el neutrón se convierte en un protón y el protón se transforma en un neutrón.

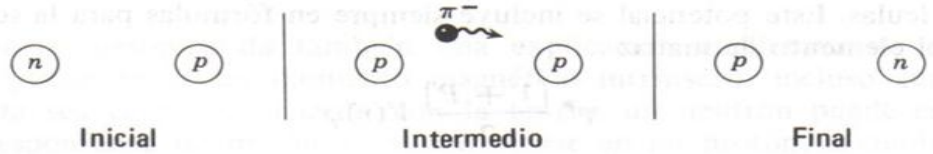

Figura 16-61. El intercambio de un mesón π^-.

Esto podría parecer una predicción poco razonable; pero se han recabado pruebas experimentales muy directas de que es algo factible. Considere la curva de la sección diferencial de dispersión de un sistema neutrón-protón a altas energías, que aparece en la figura 16–56. Hemos interpretado su simetría alrededor de los 90° como prueba del potencial de Serber (ecuación 16–142), porque un potencial ordinario de interacción $V(r)$ produciría dispersión principalmente a $\theta \sim 0°$, como se indica en la figura 16–62. Sin

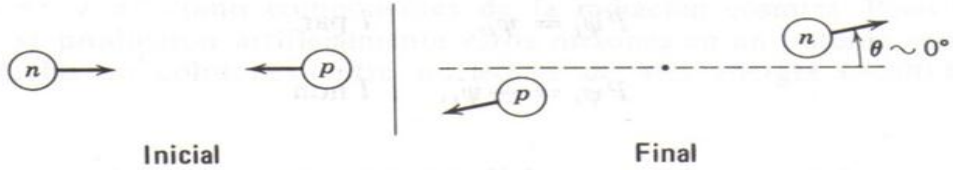

Figura 16-62. Dispersión a ángulos pequeños.

www.FreeLibros.me

embargo, podríamos haber interpretado también esta simetría como prueba para la conclusión de que existe una probabilidad de $\frac{1}{2}$ de que el neutrón se transforme en un protón, y viceversa, durante la dispersión, mediante el intercambio de un mesón π^- emitido por el neutrón o bien, a causa del intercambio de un mesón π^+ de carga $+e$ emitido por el protón. En la figura 16–63 se señala este tipo de dispersión en un caso en que se intercambia un mesón π^-. El potencial de interacción, que daría origen a una dispersión en la que se tuviera una probabilidad de $\frac{1}{2}$ de que se produzca tal proceso, se puede expresar como

$$\frac{[1+P]}{2}V(r) \tag{16–148}$$

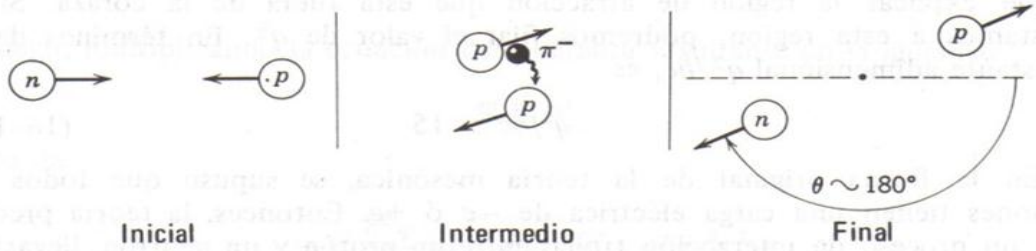

Figura 16-63. Dispersión a ángulos pequeños con el intercambio de un mesón π^-.

en donde P es un *operador de intercambio* que intercambia los índices de las dos partículas. Este potencial se incluye siempre en fórmulas para la sección, a través del elemento de matriz

$$\psi^* \frac{[1+P]}{2} V(r)\psi$$

de modo que es interesante tomar en cuenta la cantidad

$$\frac{[1+P]}{2} V(r)\psi_l = \tfrac{1}{2}V(r)\psi_l + \tfrac{1}{2}V(r)P\psi_l \tag{16–149}$$

en donde hemos especificado la función propia mediante su número cuántico l. En el párrafo que sigue a la ecuación (16–141), encontramos que este intercambio de índices de las dos partículas, es lo mismo que cambiar los signos de las coordenadas. En esta operación, ψ_l quedará igual si l es par y cambiará de signo si l es non, debido a que su paridad es par en el primer caso, e impar en el segundo. Por lo tanto,

$$P\psi_l = \psi_l, \qquad l \text{ par}$$

$$P\psi_l = -\psi_l, \qquad l \text{ non}$$

o bien,

$$P\psi_l = (-1)^l\psi_l$$

www.FreeLibros.me

y la ecuación (16–149) se puede escribir como sigue

$$\frac{[1+P]}{2}V(r)\psi_l = \tfrac{1}{2}V(r)\psi_l + \tfrac{1}{2}V(r)(-1)^l\psi_l = \frac{[1+(-1)^l]}{2}V(r)\psi_l$$

Entonces, vemos que la expresión (16–148) es perfectamente equivalente al potencial de Serber (16–142) y que la teoría mesónica proporciona una explicación cualitativa de este potencial.

Sin embargo, la sección diferencial de la dispersión de un sistema neutrón-protón a altas energías, indica que la suposición original de que todos los mesones están cargados, no puede ser correcta. Si lo fuera, los procesos del tipo indicado en la figura 16–63 se desarrollarían con una probabilidad de 1, en lugar de tener la probabilidad de $\frac{1}{2}$ que se requiere para satisfacer los datos. Así, debe haber también mesones no cargados que permitan interacciones del tipo que se ilustra esquemáticamente en la figura 16–64, en donde π^0 representa al *mesón* π^0 sin carga. Es más, los mesones π^0 son necesarios a fin de permitir interacciones nucleares entre dos nucleones de cargas idénticas.*

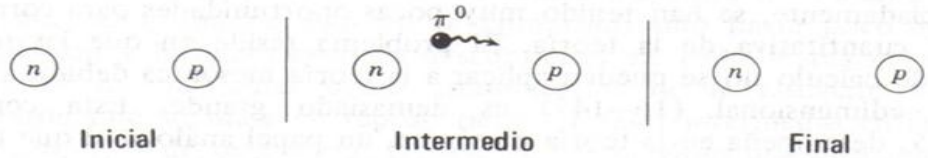

Figura 16-64. Intercambio de un mesón π^0.

La teoría mesónica da también una explicación cualitativa de cómo el neutrón puede tener un momento magnético intrínseco, incluso aunque su carga neta sea cero. De acuerdo con la teoría, un neutrón puede emitir de manera espontánea un mesón π^- y convertirse en un protón, a condición de que éste reabsorba al mesón dentro de un lapso $\Delta\tau \sim \hbar/m_\pi c^2$ y se transforme nuevamente en neutrón. Como resultado de estos procesos, existen corrientes internas relacionadas con el neutrón, y son éstas precisamente las que producen el momento magnético intrínseco del neutrón. La teoría predice que los protones emiten y reabsorben mesones también en forma espontánea. Así, la teoría mesónica representa a los nucleones rodeados de una "nube" de mesones que tienen una existencia transitoria y están unidos a la "coraza" del nucleón por los requisitos de la conservación de la energía.

En la época en que Yukawa presentó su teoría, no se conocían partículas con masa en reposo entre la del electrón m y la del protón, $1836m$. Powell y sus colaboradores fueron los que observaron por primera vez, en 1947, a los mesones π^+ y π^- como componentes de la radiación cósmica. Poco tiempo después, se produjeron artificialmente estos mesones en un potente acelerador de partículas en colisiones entre nucleones de alta energía (~300 Mev) y

* En la época de la proposición original de Yukawa se pensaba que ls fuerzas nucleares actuaban sólo entre neutrones y protones.

www.FreeLibros.me

nucleones en un blanco. Parece ser que los mesones de la radiación cósmica se producen también inicialmente en choques de alta energía. Las medidas realizadas han demostrado que los mesones π^+ y π^- tienen la misma masa en reposo

$$m_{\pi^\pm} = 274m \tag{16–150}$$

Esto es muy semejante a la predicción de Yukawa (16–144). Moyer y sus colaboradores, fueron los primeros en observar en 1950, los mesones π^0 como producto de colisiones de alta energía. Después se ha encontrado que su masa en reposo es

$$m_{\pi^0} = 264m \tag{16–151}$$

De acuerdo con la teoría, los mesones libres π que se observan en estos experimentos, se liberan de la nube que rodea a los nucleones en colisión, gracias a la energía disponible en estos choques. Entonces, se supone que son los mismos que los que se discutieron en la teoría mesónica. Por supuesto, su descubrimiento constituye una verificación notable de la validez cualitativa de la teoría.

Desgraciadamente, se han tenido muy pocas oportunidades para corroborar la validez cuantitativa de la teoría. El problema reside en que las técnicas normales de cálculo no se pueden aplicar a la teoría mesónica debido a que la constante adimensional (16–147) es demasiado grande. Esta constante $q^2/\hbar c \simeq 15$, desempeña en la teoría mesónica, un papel análogo al que tiene la constante de estructura fina, $\alpha \equiv e^2/\hbar c \simeq 1/137$, en la electrodinámica cuántica. Se pueden hacer cálculos bastante precisos en esta última teoría, empleando las técnicas de la teoría de perturbaciones, porque resulta que las perturbaciones relacionadas con las interacciones electromagnéticas son siempre proporcionales a las potencias de $e^2/\hbar c$ y, por lo tanto, son muy pequeñas.* Las técnicas perturbativas no se pueden aplicar a la teoría mesónica, porque las perturbaciones son proporcionales a las potencias de $q^2/\hbar c$ y, en consecuencia, son muy grandes. Los cálculos cuantitativos de la teoría mesónica deberán esperar el desarrollo de técnicas más apropiadas.

Los mesones son inestables; los π^- y los π^+ se desintegran espontáneamente en el espacio libre de acuerdo con el esquema

$$\pi^\pm \rightarrow \mu^\pm + \nu \tag{16–152}$$

con una vida media de

$$\tau_{\pi^\pm} = 2.54 \times 10^{-8} \text{ seg} \tag{16–153}$$

El símbolo μ^+ representa un *mesón* μ^+ cuya carga es $+e$; μ^- representa un *mesón* μ^- con carga $-e$ y ν es un neutrino. Los mesones π^0 se desintegran de acuerdo con el esquema

$$\pi^0 \begin{array}{ll} \nearrow \gamma + \gamma, & 99\% \\ \searrow e^+ + e^- + \gamma, & 1\% \end{array} \tag{16–154}$$

* Como ejemplo particular, observe que la perturbación spin-órbita (11–51) es proporcional a $\alpha^2 = (e^2/\hbar c)^2$.

www.FreeLibros.me

con una vida media de

$$\tau_{\pi^0} \sim 10^{-15} \text{ seg} \tag{16–155}$$

El símbolo γ representa un rayo gamma; e^+ representa un positrón y e^- a un electrón. Los mesones μ^+ y μ^- se desintegran también de acuerdo con

$$\mu^{\pm} \rightarrow e^{\pm} + \nu + \nu \tag{16–156}$$

y su vida media es

$$\tau_{\mu^{\pm}} = 2.22 \times 10^{-6} \text{ seg} \tag{16–157}$$

No existen mesones μ sin carga. Todos los valores dados en relación con la vida media, están tomados en marcos de referencia en los que dichos mesones están en reposo. En un marco en que el mesón esté en movimiento, su vida media parece prolongarse debido al efecto relativista de la dilatación de tiempo que describe la ecuación (1–7). Las medidas de los valores observados de $\tau_{\pi^{\pm}}$ y $\tau_{\mu^{\pm}}$, realizadas en marcos en reposo y en movimiento, dan una verificación experimental directa de la dilatación del tiempo.

Los mesones μ no participan en la teoría mesónica de Yukawa sobre las fuerzas nucleares, aunque esto no se comprobó sino hasta poco después de que Anderson y Neddermeyer los descubrieron en 1936. Estos investigadores encontraron las partículas como componentes de la radiación cósmica y demostraron que su masa en reposo tiene un valor intermedio entre la de un electrón, m, y la de un protón, $1836m$. Ahora sabemos que probablemente se producen en la radiación cósmica debido a la desintegración de los mesones π; pero, en 1936 no se habían descubierto todavía estos mesones y, naturalmente, se supuso que los mesones π eran los de Yukawa. Sin embargo, las pruebas posteriores que se fueron recabando, demostraron que la interacción de los mesones μ con la materia, es muy débil. Por ejemplo, los mesones μ de la radiación cósmica pueden penetrar grandes espesores de materia sólida con muy poca atenuación, ya que se pueden detectar minas profundas. Siendo así, los mesones μ difícilmente pueden ser las partículas que causen las fuertes interacciones de las fuerzas nucleares, a pesar del hecho de que su masa en reposo

$$m_{\mu^{\pm}} = 207m \tag{16–158}$$

es muy semejante al valor que previó Yukawa.

Esta situación dio origen a una gran confusión durante los diez años anteriores al descubrimiento de los mesones π. No obstante, después de su descubrimiento, se supuso inmediatamente que los mesones π son los de Yukawa, ya que las primeras pruebas obtenidas indicaban que su interacción con la materia era potente. Esto quedó confirmado gracias a mediciones posteriores que corroboraron el hecho de que la sección para la interacción de un mesón π con un núcleo, queda cerca de su máximo valor posible, la superficie proyectada de la sección transversal geométrica πR^2 (vea la ecuación 15–103). La interacción es también particularmente violenta; cuando un mesón π interacciona con un núcleo, la mayor parte de su energía de masa en reposo sirve para dividir el núcleo en varios fragmentos que vuelan con

www.FreeLibros.me

considerable energía. Ahora sabemos que los mesones π están íntimamente relacionados con los nucleones y participan en la interacción nuclear fuerte, en tanto que los mesones μ están íntimamente asociados con los electrones y toman parte en las interacciones de desintegración beta muy débiles. Una de las pruebas de la asociación entre los mesones μ y los electrones, es que ambos tienen el número cuántico de spin $i = \frac{1}{2}$, poseen un carácter de simetría antisimétrica y momentos magnéticos correspondientes al factor g de spin $g_s = 2$. Los mesones π tienen $i = 0$, poseen un carácter de simetría simétrico y no tienen momentos magnéticos.

En los últimos años se han descubierto más de doce partículas inestables que se han clasificado en dos grupos: los *mesones K* cuyas masas en reposo son de alrededor de $1000m$, y los *hiperones* con masas en reposo de aproximadamente $2500m$. En la actualidad, no se sabe mucho todavía sobre las propiedades de estas partículas; sin embargo, parece ser que algunas de ellas tienen interacciones fuertes y, por lo tanto, es posible que contribuyan a las fuerzas nucleares. En efecto, la relación (16–144) podría hacer que nos inclináramos a relacionar a las que interaccionan con gran fuerza con la coraza de repulsión de corto alcance del potencial nucleón-nucléon, debido a que la relación indica que el alcance de las fuerzas es inversamente proporcional a la masa del mesón. Es posible que esto sea verdad; pero también es probable que esta parte de los efectos que llevan a la coraza se originen del intercambio simultáneo de varios mesones π. No intentaremos siquiera enumerar los mesones K y los hiperones que se conocen en la actualidad, ya que sin duda alguna, esta lista sería pronto obsoleta. Para tener datos actualizados en relación con este campo que se desarrolla tan vertiginosamente, y respecto al papel importante que representará con toda seguridad en los aspectos fundamentales de la física moderna, el lector deberá consultar las revistas especializadas en este campo.

BIBLIOGRAFIA

Bethe, H. A. y P. Morrison, *Elementary Nuclear Theory,* John Wiley and Sons, Nueva York, 1956.

Blatt, J. M., y V. F. Weisskopf, *Theoretical Nuclear Physics,* John Wiley and Sons, Nueva York, 1952.

Elton, L. R. B., *Introductory Nuclear Theory,* Isaac Pitman and Sons, Londres, 1959.

Evans, R. D., *The Atomic Nucleus,* McGraw-Hill Book Co., Nueva York, 1955.

Halliday, D., *Introductory Nuclear Physics,* John Wiley and Sons, Nueva York, 1955.

EJERCICIOS

1. Demuestre que el cuanto de energía mínima que puede expulsar a un protón de 4.5 Mev desde una capa delgada hidrogenada, es $E_\gamma \simeq 50$ Mev, como se indicó en la sección 2.

2. Evalúe en Mev la energía de la atracción gravitacional y la de repulsión de Coulomb para dos protones separados por una distancia de 5×10^{-13} cm.

www.FreeLibros.me

3. Demuestre la ecuación (16–3). *Nota:* utilice la ley de Gauss que se estableció en la sección 2 del capítulo 13.

4. Verifique las ecuaciones (16–11), (16–11′) y (16–11″). Demuestre también que la expresión (16-11′) se reduce a la (16–12).

5. Emplee las expresiones clásicas apropiadas para derivar la (16–20).

6. Use la expresión (16–20) para calcular la energía en el marco LAB, de los protones emitidos hacia adelante y a 30° de esta dirección, en la reacción $^{2}He^{4} + {}^{7}N^{14} \rightarrow {}^{8}O^{17} + {}^{1}H^{1}$ inducida por partículas alfa de 30 Mev. En esta reacción, $Q = -1.18$ Mev.

7. Tomando como base los datos de la tabla (16–1), evalúe en Mev, la energía liberada en la fusión de dos núcleos de $^{1}H^{2}$ para formar un núcleo de $^{2}He^{4}$. Evalúe también en Mev, la altura de la barrera de repulsión de Coulomb que se debe vencer antes de que exista una probabilidad apreciable de que los dos núcleos se acerquen lo suficiente para que se lleve a cabo la fusión, suponiendo que el radio de $^{1}H^{2}$ sea 2×10^{-13} cm.

8. Evalúe los términos de la fórmula semiempírica de la masa para el núcleo de $^{92}U^{238}$. Emplee los resultados para calcular los valores previstos de la energía total de enlace ΔE y la energía promedio de enlace por nucleón $\Delta E/A$, y compárelas con la tabla 16–1. Calcule la fracción con la que contribuyen a ΔE, los términos de f_1 hasta f_5.

9. Busque los números cuánticos de spin del estado base de todos los núcleos de A non, y compárelos con las predicciones obtenidas del modelo de capas y la figura 16–23.

10. Suponiendo que $^{71}Lu^{175}$ es un elipsoide de revolución, encuentre las longitudes de los ejes semimenor y semimayor que llevan al valor del momento cuadripolar dado en la figura 16–24, así como un volumen consistente con las densidades nucleares normales.

11. Demuestre que la fórmula semiempírica de la masa predice correctamente que $^{92}U^{238}$ es estable con respecto a la emisión de $^{0}n^{1}$, $^{1}H^{1}$, $^{1}H^{2}$, o $^{2}He^{3}$; pero es inestable a la emisión de $^{2}He^{4}$. Explique el porqué. *Sugerencia:* tome las masas de las partículas emitidas de la tabla 16–1, porque la fórmula semiempírica de la masa no es muy exacta para valores pequeños de A.

12. Un núcleo inestable cuya probabilidad por segundo de desintegración es λ, se está produciendo artificialmente en un acelerador de partículas, a una velocidad constante de I núcleos por segundo. Si el proceso de producción se inicia a $t = 0$, calcule la cantidad de estos núcleos que estarán presentes cuando $t = t'$, formulando y resolviendo una ecuación similar a una de las (16–46).

13. Utilice la fórmula semiempírica de la masa para calcular cómo se extrapolarían los datos de la figura 16–25 a $A = 190, 180, 170, 160$.

14. Use la fórmula semiempírica de la masa para evaluar los puntos de una figura similar a la 16–36, para $A = 77$. Asimismo, tómela como base para predecir las energías de que se dispone para la desintegración con emisión de electrón y de positrón. Luego consulte los datos y haga una comparación.

15. Emplee el modelo de capas para predecir los spins y las paridades de los estados base de varios grupos de núcleos con A impar, en la región $N = 50$ a $N = 82$. Después, prevea cuál de las transmisiones beta entre estos estados fundamentales podrá satisfacer las reglas de selección de Fermi (16–74), y cuál hará lo propio con las reglas de selección de Gamow y Teller (16–77).

16. Evalúe la longitud de atenuación Λ para neutrinos que atraviesan materia cuya densidad es 10 gm/cm^3, utilizando la sección transversal de interacción típica $\sigma = 10^{-44}$ cm^2 predicha por la ecuación (16–80).

17. Tome las predicciones del modelo de capas y la figura 16–23 para los números cuánticos de spin y las paridades de los estados base y los primeros excitados, de núcleos de A impar en las regiones de los números mágicos, en donde el modelo debe ser válido, y use las reglas de selección (16–83) y (16–83′) para predecir el carácter (el valor de L y

www.FreeLibros.me

si es eléctrico o magnético) de las transiciones de la desintegración gamma del primer estado excitado al estado base en estos núcleos. Determine también las predicciones del modelo colectivo para núcleos de N par y Z par en las regiones entre los números mágicos, en donde el modelo debe ser válido, consultando la sección 13.

18. Compare el valor de la sección transversal $\sigma(p, pn)$ para $^{29}Cu^{63}$ y protones de 25 Mev, citados en la figura 16–49, con el área geométrica proyectada para un núcleo de radio $R = 1.25A^{1/3} \times 10^{-13}$ cm^2. Analice y explique lo que implica esta comparación en función del modelo óptico. Calcule también la probabilidad de que un protón de 25 Mev pudiera efectuar dicha reacción al atravesar un papel metálico de 0.001 plg de espesor y que contiene la mezcla normal de isótopos de ^{29}Cu.

19. Resuelva gráficamente la ecuación (16–125′); pero sin aproximaciones, para $R = 2 \times 10^{-13}$ cm. Compare esto con las predicciones de la (16–126).

20. Derive la fórmula de la sección transversal de dispersión de un sistema neutrón-protón de poca energía, sin hacer la aproximación de usar la función propia del estado ligado para $r < R$ en (16–129), y sin quitar KR en la (16–135). Demuestre que esto da $\sigma = [4\pi/(K^2 + K_{||}^2)](1 + K_{||}R)$ en lugar de (16–138). Haciendo $R = 2 \times 10^{-13}$ cm, determine el error en la (16–138) cuando $E = 1$ ev.

21. Dado el hecho de que a 1 ev, la sección transversal de dispersión isotrópica neutrón-protón es $\sigma = 20.4$ bn en el marco CM, utilice la ecuación (15–17) para evaluar $d\sigma/d\Omega$ en el marco LAB. Haga una gráfica con los resultados.

22. Un mesón π llega al estado de reposo en el marco LAB, y luego se desintegra en un mesón μ y un neutrino, de acuerdo con el proceso (16–152). Demuestre que la energía cinética del mesón μ en el marco LAB es $(m_\pi - m_\mu)^2c^2/2m_\pi$, en donde m_π y m_μ son, respectivamente, las masas en reposo de los mesones π y μ. Determine esta energía cinética en Mev, a partir de los valores de la masa en reposo que se citaron en las ecuaciones (16–150) y (16–158).

www.FreeLibros.me

Indice

"A"

Absorción, de la radiación electromagnética, 441-445, 492-499.
coeficiente de Einstein para la, 447
imagen física de la, 449-450
rapidez de transición para la, 445
de nucleones por núcleos, 465-466
de partículas, 542
en la teoría de Schrödinger, 542-546
en un potencial complejo, 544-546
por una esfera absorbente, 543-544, 560
Absortividad, 56
Acoplamiento de impulso angular, JJ, 430-432, LS, 418-430
campo intenso, 436
spin, 417
spinorial y orbital, 418
orbital, 416-417
restricciones por el principio de exclusión, 425-428, 431
Acoplamiento LS, 418-430
de impulso angular orbital, 419
del impulso angular de spin, 418
del impulso angular total, 419
espectro, 429-430
niveles de energía, 423-424, 428-429, 430
números cuánticos, 419-423, 424
reglas de selección, 430
y el principio de exclusión, 425-428
y el rompimiento de estructura fina, 423-424, 430
Acoplamiento JJ, en átomos, 430-432
en núcleos, 589
Agujeros, y producción de pares, 501-503
espectro de rayos X y, los, 472-473
propiedades de los, 426, 502
números cuánticos para los, 473
reglas de selección para los, 474
subcapas con los, 426
Alcance, de partículas cargadas, 550
de las fuerzas nucleares, 565, 658, 670, 675
comparadas con otras fuerzas, 565
y teoría mesónica, 679, 680
Ampere, ley de, 336
Análisis de Fourier, 159, 163, 195, 203
Anchura de líneas, 456-459
y ensanchamiento natural, 456-458
y ensanchamiento por colisión, 457
y ensanchamiento por efecto Dopler, 456
y principio de incertidumbre, 456-457, 459
Anchura natural de las líneas espectrales, 457
Anchuras, de los niveles de energía nuclear, 644-646
medida de las, 642; *véase también* Desintegración alfa; Desintegración beta; Desintegración gamma.
y la fórmula de Breit y Wigner, 654
y la hipótesis de anchura al azar de la teoría del núcleo compuesto, 651
y las predicciones de la teoría del núcleo compuesto, 650
de los estados cuánticos, 457-459
y el principio de incertidumbre, 457, 459
y las vidas medias, 459
de las líneas espectrales, *véase* Anchura de línea

www.FreeLibros.me

Angulo sólido, 484
Aniquilación, 502-503
Antigua teoría atómica, 141
crítica de la, 141-142
Antipartícula, 503
Antiprotón, 503
Aproximación de Born, 511-518
aplicabilidad de la, 522, 541
para electrones relativistas, 556
para interacción nuclear directa, 556-557
para potencial de Coulomb, 541
para potencial de Gauss, 518-520
para un pozo cuadrado de potencial, 520-521
Atenuación, coeficiente de, 503
Atenuación de rayos X, 480
coeficiente de, 498
ley exponencial para la, 497-499
longitud de, 498
sección para la, 496-498
Atenuación exponencial, 498-499
Atenuación, ley exponencial para la, 497-499
de nucleones, 564-565
de rayos X, 481-499
Atómica, carga, 95-96, 112-113, 476
densidad de carga, 388-389, 393-395
estabilidad, 114-115, 120-121, 191, 406, 455
excitación, 125, 408-409
masa, 86, 572
niveles de energía, *véase* Niveles de energía de los átomos
Atómica, unidad de masa, 569
equivalente en energía de la, 571
Atómico, número (Z), 95, 548
Atómico, factor de forma, 487
Atómicos, estados de energía, 130-135
Atomo con un electrón, 295-323, 346-354
y su papel en la teoría de los átomos con varios electrones, 395-396
Atomo con un electrón, impulso angular, valores de expectación, 315
cuantización del, 321
movimiento precesional del, 321-322
Atomos alcalinos, 409-415
espectro de los, 118, 415
estructura fina en los, 412-415
niveles de energía de los, 409-415
números cuánticos para los, 412
reglas de selección para los, 415
Atomos con varios electrones, en la teoría de Hartree, 389-399; *véase también* Atomos alcalinos; Atomos, con varios electrones ópticos; Tabla periódica de los elementos
autoconsistencia en los, 386, 391
capas en los, 395-396
carga efectiva para los, 395
condiciones a la frontera para los, 388-389
densidad de probabilidad para los, 390-395, 397-398
ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para los, 390
en la teoría de Thomas y Fermi, 386-389
funciones propias para los, 390-392
números cuánticos para los, 392
potenciales netos para los, 391, 392-395
subcapas en los, 396-398, 401-402, 403-405, 407
Autoconsistencia, 386
en la teoría de Hartree del átomo, 389-399
en la teoría de la estructura nuclear, 676-677
en la teoría de Thomas-Fermi del átomo, 386

"B"

Balmer, series de, 119, 126
Barn (bn), 668
Bassel, funciones esféricas de, 525
Blindaje, *véase* Carga efectiva,
Bohr, magnetón de, 327
Bohr, microscopio de, 161-163
Boltzmann, constante de, 69
Bomba Atómica, 604
Born, interpretación de las funciones de onda, 176-180, 294-295
Bose, distribución de probabilidad de, 582-583
Brackett, series de, 119, 126
Bragg, ley de, 467
Breit y Wigner, fórmula de, 654
Brusckner, teoría de la estructura nuclear, 676-677
Bucherer experimento de, 48, 83-84

"C"

Cámara de niebla, 499
Camino aleatorio, 104

www.FreeLibros.me

Campo, electromagnético, 677-678
mesónico, 677-678
Capas, en átomos con electrones, 395-396
en átomos con un electrón, 305-308
en núcleos, 588
Carga de los átomos, reacción en cadena, 95-96, 112-113, 398, 476-477
de los electrones, 83
medida de la, 82-83
del núcleo, 111, 548
Carga del electrón, 83
medida de la, 82-83
Carga efectiva, 395, 476
Carga, independencia de las fuerzas nucleares de la, 659, 672-673
Cascadas, en la desintegración gamma, 627
Catástrofe ultravioleta, 71
Centro de masa, 127
separación de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para el, 295-298
Centro de masa (CM), marco 50, 506
relación con el marco de laboratorio, 506-509
Coeficiente de transmisión, para el potencial de barrera, 235-236
para el potencial de escalón, $E > V$, 231-232
para el potencial de pozo cuadrado, 241, 252
Colisión, ensanchamiento de las líneas espectrales por, 457
Combinaciones lineales, *véase* Superposición de funciones de onda
de funciones de onda, 190, 195, 284
de funciones propias, 193-194, 195, 269, 273-274, 276-277, 525
Combinaciones lineales, de, 193-194, 195, 269, 273-274, 276-277, 525
de singulete, 364-366
de triplete, 364-366
normalización de las, *véase* Normalización de funciones propias
ortogonalidad, *véase* Ortogonalidad de las funciones propias
para átomos con varios electrones, 390-392
para átomos con un electrón, *véase* Funciones propias para átomos con sólo un electrón
para el acoplamiento LS, 422-423
para el impulso angular spinorial, 364
para el potencial del oscilador armónico simple, 263-264
para el potencial de escalón, $E < V_0$, 226, 227
para la cuerda, 199
para partículas idénticas sin interacción, 358-359, 362-363
para un potencial de pozo cuadrado, $E < V_0$, 244, 247
$E > V_0$, 250-251
propiedades matemáticas de las, 188-195
simétricas, 358-359, 363-364
Complejo conjugado, 176
Compton, dispersión de, 89-92, 488-492
por protones, 551
sección para la, 490-492
teoría cuántica de la, 89-92, 490
Compton, longitud de onda, de, 92
Condiciones a la frontera, para funciones propias, 182, 300
de potencial de barrera, 233
para el potencial cuadrado, $E < V_0$, 242, $E > V_0$, 250
para el potencial de escalón, $E < V_0$, 225-226, $E > V_0$, 230
para el potencial de oscilador armónico simple, 258-259, 261
para la teoría de Thomas y Fermi, 394-395
para un átomo con un electrón, 299-302
periódicas, *véase* Condiciones periódicas a la frontera.
Condiciones periódicas a la frontera, para la radiación electromagnética, 61
en el intervalo relativista, 614
para las funciones propias y las funciones de onda, 222, 513-514
Configuración, 402
Conservación, de la carga, 571, 629
de la energía, en la desintegración beta, 609-610
en la teoría de la relatividad, 352
y las reacciones nucleares, 569-572
y limitaciones del principio de incertidumbre, 289, 651, 678-679, 683
de probabilidad, 180, *véase también* Normalización de las funciones de onda y de las funciones propias
y potenciales complejos, 544-545
Conservación de la energía, en reacciones nucleares, 569-572

www.FreeLibros.me

en la teoría de la relatividad, 46-47
y limitaciones por el principio de incertidumbre, 289, 651, 678-679, 683
Conservación, ecuación de, 178-179
Constante de acoplamiento en la desintegración beta, 613, 620, 625
campo coulómbico, 684
campo mesónico, 681, 684
comparación entre las magnitudes de la, 625
Constante de estructura fina, 139
y la electrodinámica cuántica, 684
y la energía spín-órbita, 357
Constante de Rydberg, para el hidrógeno, 118
para un núcleo de masa M, 129
para un núcleo infinitamente pesado, 125, 129
Contador de cintilación, NaI, 560
ZnS, 99
Continuidad de las funciones propias y de sus derivadas, 182, 319
Continuo de niveles de energía, atómicos, 134, 188
nucleares, 647
Contracción de la longitud, *véase* Contracción de Lorentz
Contracción de Lorentz, 27, 30, 33-34
derivación de la fórmula para la, 36-39
transformación de, 38
Conversión interna, coeficientes de, 636-637
desintegración gamma y la, 635
energética de la, 635-636
Coraza repulsiva en las fuerzas nucleares, 674-677
y la teoría mesónica, 686
Correspondencia, principio de, 140-141
véase también Límite clásico de la teoría cuántica.
Corrientes en bucle, 325-326
Corrimiento de fase, 529, 542-543
dependencia con la energía del, 540
en resonancia, 539
interpretación del, 542-544
para dispersión S, 539
para el efecto Ramsauer, 539
para *l KR*, 536
para la dispersión por esfera absorbente, 544
para la dispersión por esfera rígida, 536
y las secciones, 531, 543
Coulomb, ley de,
y la electrodinámica cuántica, 677-678, 679-681
Coulómbica, energía de repulsión en los núcleos, 553
Coulómbica, sección, 542
Cuánticos, defectos, 411
Cuantización, 64; *véase también* Niveles de energía de los estados atómicos, 123, 130-134
de la energía en la teoría de Schrödinger, 182-188
del impulso angular de spin nuclear, 438
del impulso angular gran total, 438
del impulso angular orbital
del impulso angular orbital total, 419
del impulso angular total, 343, 419-420
del impulso angular total spinorial, 419
del impulso magnético orbital, 327
del oscilador armónico simple, 72
y el principio de incertidumbre, 161-162
y las reglas de Wilson y Sommerfeld, 134-138
Cuantización espacial, 322
verificación experimental de la, 332
y la forma del potencial, 322-323
Cuanto, del campo electromagnético, 88, 677-678
del campo mesónico, 677-688

"D"

Davisson y Germer, experimento de, 152-155
De Broglie, longitud de onda, 151
valores típicos de la, 151-152, 155
De Broglie, postulado de, 145-147
confirmación experimental del, 151-156
relación en el principio de incertidumbre, 158
relación con la teoría de Schrödinger, 169-171
Deficiencia de masa en los núcleos, 571-573
e intercambio de partículas idénticas, 358
en átomos con varios electrones ópticos, 415-417
en la teoría de Sommerfeld, 138
y efecto de la perturbación, 278-280
Degeneración de intercambio, 358
en el átomo de helio, 369

www.FreeLibros.me

Degeneración, teoría de las perturbaciones con, *véase* Teoría de las perturbaciones en el caso degenerado.
Densidad de carga, en los átomos, 335-394
en el núcleo, 557-559
Densidad, de los átomos, 87
de estados finales, en la desintegración beta, 613-616
de los núcleos, 548, 559, 566
en la emisión de nucleones, 645
en la teoría de la perturbación dependiente del tiempo, 290
Densidad de probabilidad, 175-176, 177-180, 294-295
para dos partículas no idénticas sin interacción, 358-360
para el oscilador armónico simple, 264
para el potencial de escalón, $E < V_0$, 228
para el pozo cuadrado de potencial, $E < V_0$, 249, $E > V_0$, 252
para la partícula libre, onda estacionaria, 220
onda viajera, 216
para un átomo con un electrón, *véase* Atomo con un electrón
en un átomo con un electrón, 306-309
en un átomo con varios electrones, 394-395
radial, 305
para un átomo con varios electrones, 390, 394-395
para un átomo que radía, 449-450
para una función de onda de estado propio, 191
para una función de onda general, 190-191
Densidad de niveles de energía para la para la partícula libre, 514-515
Densidades de probabilidad del átomo con un electrón,
comportamiento cerca del origen, 309
dependencia angular de las, 309-312
dependencia radial de las, 306-309
medibilidad de las, 310-311
relación al impulso angular, 311-312
Densidad radial de probabilidad, 305
en átomos con un electrón, 306-309
en átomos con varios electrones, 394
Desintegración alfa, 96-98, 237-240, 594-601
componente de largo alcance en la, 626
con varios electrones ópticos, 416-418
energía, 594-595
equilibrio en la, 599-601
estructura fina de la, 641
ley de Geiger y Nutall para la, 597-598
movimiento de la partícula alfa antes de la, 597
potencial en la, 238, 596
probabilidad de penetrar la barrera, 239, 595-597
radio nuclear y la, 240, 597
rapidez, y números mágicos, 594
y fórmula semiempírica para la masa, 594
series radioactivas y la, 599-601, 605-606
vida media, 598
Desintegración beta, 96-97, 605-625
conservación de la energía en la, 609-610
constante de acoplamiento, 613, 620, 625
densidad de estados finales para la, 613-616
diagramas de Kurie para la, 616
efectos coulómbicos en la, 617
elementos de matriz en la, 613, 618-623
elementos pseudoescalares de la matriz para la, 621-624
energía en la, 606-609
espectro de la, 609
modelo de capas y la, 619-621
neutrinos y la, 611
no conservación de la paridad en la, 621-623
origen de la, 606
reacciones inducidas por neutrinos en la, 623-625
reglas de selección de Fermi para, 618-620
reglas de selección de Gamow y Teller para la, 621
retroceso del neutrino en la, 623
teoría de Fermi para la, 612-618
valores F para la, 618-621
vida media de la, 617-619
Desintegración beta, teoría de Fermi de la, 612-619
Desintegración en equilibrio, 599-600
Desintegración exponencial, 455-457
de estados de núcleo compuesto, 650
Desintegración gamma, 625-639
cascadas, 627

www.FreeLibros.me

conversión interna y la, 634-638
elementos de matriz, 633-635
energía de los rayos gamma en la, 627
medida de la energía, 627-628
medida de la vida media, 628
rapidez de transición en el modelo de capas, 632-633
reglas de selección, 633
transiciones eléctricas y magnéticas, 629-633
transiciones isoméricas, 628
vidas medias, 637-638
Desintegración radioactiva, 96; *véase también,* Desintegración alfa; Desintegración beta; Desintegración gamma.
Detector de centelleo de Z n S, 99
Detector de cintilaciones de NaI, 524
Deuterio, *véase* Deuterón
Deuterón, 661-666
ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el, 664
estado base del, 662
estado virtual del, 669
estados excitados del, 666, 669
funciones propias para el, 666
momento cuadripolar eléctrico del. 661-663
potencial para el, 663, 670
propiedades del, 661
Diagrama de niveles de energía, 72
Diagramas vectoriales para la suma de impulso angular, 344-35, 421
Diferencial, sección, 485, 509, *véase también* Sección
Difracción, de la radiación electromagnética, 145, 153, 154-156, 164-166, 454-468
de átomos de helio, 155
de electrones, 152-155, 554-555
de ondas en la mecánica cuántica, 520. 535-536, 544
de protones, 560-562
Dilatación del tiempo, 31, 32-34
para mesones, 49, 685
Dinámicas, cantidades, 205
y operadores diferenciales asociados. 206
fluctuaciones en, 316-319
Dirac, teoría de, de la mecánica cuántica, 335
del vacío, 500-502
y estructura fina, 352-353
y producción de pares. 499-503
Dispersión, 542
de electrones, por átomos, 393
por núcleos, 554-557
de partículas alfa por núcleos, 98-114
de neutrones, por hidrógeno molecular, 669
por protones, 666-670, 673-674
de protones, por núcleos, 559-566
por protones, 670-672, 673-676
de rayos X, 480-492
y física nuclear, 505
Dispersión de Coulomb, 107-112
distribución angular, 112
sección, 541
Dispersión de onda S, 536-539
en la dispersión neutrón-protón, 666-671
en la dispersión protón-protón, 670-672
y límite a la sección de dispersión protón-protón, 673
Dispersión de partículas alfa, 98-99
por el átomo de Rutherford, 107-112
por el átomo de Thomson, 99-105
y la carga atómica, 112-113
y el descubrimiento del núcleo, 106-107
y el radio nuclear, 113-115
Dispersión de Thomson, 480-485, 492
sección, 482, 485, 492
Dispersión múltiple, 99-105
distribución angular para la, 105
Distribución de probabilidad de Boltzmann, 69
aplicaciones de la, 127, 446-448
derivación de la, 65-69
distribución espectral en la, 70
relación con las distribuciones cuánticas de probabilidad, 382-384
Dobletes, de niveles de energía, *véase* Estructura fina de líneas espectrales, 415
Doppler, ensanchamiento de las líneas espectrales, 456
Dualidad partícula-onda, 92-93
y el principio de incertidumbre, 164-166, 227-229
y penetración de una barrera, 236, 240

"E"

Ecuación de onda, electromagnética, 236 680
en la mecánica cuántica, *véase* Ecuación de Schrödinger.

www.FreeLibros.me

para una cuerda, 197
relativista, 680
Ecuaciones de valores propios, 316-320
para el impulso angular, 321, 525
para el impulso lineal, 319-320
para la energía, 318-320
Edad de la Tierra, 600
Efecto fotoeléctrico, teoría clásica del, 86-87
espectro de líneas de rayos X, y el, 494
primeros experimentos sobre el, 84-85, 89
secciones para, 494-495, 496
teoría cuántica del, 87-88, 494
Efectos nucleares par-non, 575, 577
y el modelo de gas de Fermi, 582-5
Efecto Zeeman, 329, 432-6
anómalos, 436
espectro, 436-437
factor *g* de Landé y el, 434
momento magnético neto en el, 433-434
normal, 436
reglas de selección, 436
separación de los niveles de energía en el, 434-436
Ehrenfest, teorema de, 210-213
Einstein, coeficientes de, 447
Einstein, postulado cuántico, 88
y teoría de la radiación por átomos, 443, 450
Einstein, postulados de la relatividad de, 28
Einstein, relación masa-energía, 45
verificación experimental de la, 572-573
y energía de amarre nuclear, 572-573
y reacciones nucleares, 569-572
Einstein, teoría de la emisión espontánea de, 446-448
Einstein, teoría fotoeléctrica de, 87-88
Ecuación de Schrödinger, 173, 294
y la ecuación clásica de ondas, 197
carácter complejo de la, 174
desarrollo de la, 169-175
independiente del tiempo,
independiente del tiempo, *véase* Ecuación de Schrödinger
linearidad de la, 171-172, 189-190
y las leyes de Newton, 210-213
y los operadores diferenciales, 207
Ecuación de Schrödinger del tiempo, 180-182, 294
carácter real de la, 181
para el átomo con varios electrones, 389
para el átomo con un electrón, *véase* Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el átomo con un electrón.
para el deuterón, 664
para el gas de Fermi, 375
para el potencial de escalón, $E < V_0$ 224, $E > V_0$, 229
para el pozo de potencial infinito, 253
para el oscilador armónico simple, 257-258
para la partícula libre, 215
solución, por integración numerica, 184-186, 269, 277-278
por series, 259-260, 301-302
soluciones aceptables para la, 182, 300
y la cuantización de la energía, 182-188
y la ecuación clásica para las ondas, 198-199, 236
Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el átomo con un electrón, completa, 295
para el movimiento relativo, 298
separación de la ecuación completa, 295-298
separación de la ecuación para el movimiento relativo, 298-299
solución de la ecuación del movimiento relativo, 299-302
Eléctrico, elementos de matriz para el dipolo, 443, 448-449
Electrodinámica cuántica, 450
y el factor *g* de spin, 353
y el origen de la interacción coulómbica, 677-678, 679-681
y la emisión espontánea de radiación, 446, 450
y la teoría de la perturbación, 684
Electrón, captura en la desintegración beta, 608-609
descubrimiento del, 79-82
difracción, 152-155, 554-555
dispersión por núcleos, 554-557
emisión en la desintegración beta, 608-609
Electrón ópticamente activo, 409
Electrón-protón, relación de masa, 130
Electrón-volt (ev), 131
Electrones de conducción, 376, 379-381
Elementos de matriz, 274, 286
dipolar eléctrica, 443, 448-449
nuclear, *véase* Desintegración beta

www.FreeLibros.me

para la desintegración beta, 613, 618-623
para la desintegración gamma, 634-
Elementos actínidos, 147, 404
Elementos alcalinos, 405
Elementos de gas noble, 404-406
Elementos de matriz nuclear, 613, 618-622
Elementos de tierras raras, 404, 406
Elementos de transición, 405-406
Elementos transuránicos, 406
Emisión espontánea, por átomos, 441, 446-448
coeficiente de Einstein para la, 447
imagen física de la, 449-450
justificación para considerar solamente interacciones dipolares eléctricas, 455, 629-631
por núcleos, *véase* Desintegración gamma
rapidez de transición de la, 448-451
Emisión inducida, 445
coeficiente de Einstein para la, 447
imagen física de la, 449-450
rapidez de transición para la, 445
Emisión térmica de electrones, 130-131
Emisividad, 56
Energía, equipartición de la, 69
cinética relativista, 44
de masa en reposo, 45
relativista total, 45
Energía de amarre, de los electrones atómicos, 134, 367, 404-406
del núcleo, 571-573
constancia de la, 573, 576
y fisión, 573
y fusión, 573-574
y saturación de las fuerzas nucleares, 659-661
Energía de apareamiento en los núcleos, 584
Energía de repulsión coulómbica nuclear, 576-577
Energía de tensión superficial en el núcleo, 576
Energía de punto cero, 255
para el oscilador armónico simple, 262
y el principio de incertidumbre, 255-266
y la emisión espontánea de radiación, 450
y los electrones en el núcleo, 549-550
Energía potencial de orientación, del momento dipolar magnético, 327-329
del momento dipolar neto, 434
Energía relativista, 44-45
Energía relativista total, 45
Ensanchamiento de las líneas espectrales, *véase* Anchura de línea
Equipartición de la energía, 69
Escalares, 621
Espectro, análisis del, 436-438
atómico, *véase* Espectro atómico, Del cuerpo negro, 57-59
beta, 633
continuo de rayos X, 470-471, 476-480
de líneas, 471-476
del oscilador armónico simple, 141
óptico, 408
Espectro atómico, de absorción, 120, 127
de átomo alcalino, 119, 415-416
de chispa, 126-127
de emisión, 120
de un átomo con acoplamiento LS, 429-430
de un átomo con un electrón, 118, 125, 416
de un átomo con acoplamiento JJ, 432
estructura fina del, *véase* Estructura fina
límite de la serie del, 119
líneas del, 118
medida del, 117-118
óptico, 408
separación hiperfina del, 353-354, 437
series del, 119
Zeeman, 436
Espectro de absorción, 120, 127
Espectro de emisión, 120
Espectro del cuerpo negro, 57-58
y emisión espontánea, 446, 448
Espectrometría de masa, 566-569
Estabilidad, de los átomos, 114-115, 120-121, 157, 191, 407, 454
de los núcleos, 573-574, 594, 600-601, 608-609
Estado base, 125
Estado estacionario, 191, *véase también* Estados propios
Estado de triplete, ausencia de, en el estado base del helio, 375
del deuterón, 668
Estado virtual, 540
del deuterón, 540
del sistema neutrón-protón, 669-670
Estados cuánticos, 72
vida media de los, 456, 459
Estados excitados, 125, *véase también* Niveles de energía

www.FreeLibros.me

Estados propios, 191
y la interacción cuadripolar eléctrica, 449-450
Estructura fina, 137, 331-332, 335-336, 351-353
en átomos alcalinos, 412-415
en el acoplamiento JJ, 430
en el acoplamiento LS, 423-424, 430
Estructura hiperfina, 437-440
y la interacción cuadripolar eléctrica, 439-440
y la interacción dipolar magnética, 437-440
Estructura nuclear, teoría de la 676-677
Eter, 21
Eter, arrastre del, 26
Eter, marco, 21
Excitación del átomo, 125, 408-410
de núcleos, 626
Excitación óptica de los átomos, 408, 472

"F"

F_T, valores para, 618-621
Factor de forma, 487
Factor *g*, de Landé, 434
de spin, 333-334, 353
mesónico, 686
nuclear, 439
orbital, 327
Factor *g*, orbital, 327
Fermi, energía de, 379, 381
de electrones de conducción, 380
de núcleo, 582
Fermi, probabilidad de distribución de, 382-383
Fermi, reglas de selección, 618-620
Finitud de las funciones propias y de sus derivadas, 182, 319
Física clásica, 15
Física moderna, 15
Fisión del núcleo, 601-605
diagramas de energía para la, 601, 603
distribución de los fragmentos, 604-606
emisión de neutrones en la, 603
energía emitida en la, 587
espontánea, 602
fragmentos, 601
inducida, 602-603
origen de la, 601
reacción en cadena en la, 603-605
Fisión espontánea, 602
Fisión inducida, 602-603
Fluctuaciones en las cantidades dinámicas, 316-319
Flujo, clásico, 178-180
de probabilidad, 180, *véase también* Flujo de probabilidad
dispersado, 492, 509
incidente, 491-492, 509
Flujo de probabilidad, 180
para el potencial de escalón, $E < V_0$, 227
$E > V_0$, 231
para la partícula libre, onda estacionaria, 221
onda viajera, 217
para las ondas incidentes y dispersas, 523
Fórmula para la masa nuclear, 576-588
y la energía de la desintegración alfa, 594
y la energía de la desintegración beta, 606-608
Fórmula semiempírica de la masa, 578-579
y energía en la desintegración alfa, 594
y energía en la desintegración beta, 606-608
Fotoeléctrica, celda, 84
Fotoelectrones, 85
Franck y Hertz, experimento de, 130-134
Frecuencia de Thomas, 339
Fuerza de intercambio, 366-367
en el átomo de helio, 371-372, 373
Fuerzas gravitacionales comparadas con las nucleares, 553
Fuerzas nucleares, 658-677
alcance de las, 568, 658, 670, 675
carácter atractivo de las, 543, 658
comparada con otras fuerzas, 568
coraza de repulsión en las, 675-676
y la saturación de las, 676-677
y la teoría mesónica, 686
dependencia con el impulso angular, 673
dependencia del spin de las, 669, 676
independencia de la carga de las, 659, 672-673
intensidad de las, comparadas con otras fuerzas, 543, 568-580, 625
saturación de las, 659-661, 673, 676
y dispersión neutrón-molécula de hidrógeno, 669-670
y dispersión neutrón-protón, altas energías, 673-674
bajas energías, 666-671
y el deuterón, 661-666
y el potencial de Serber, 586, 675-676, 676, 682-683

www.FreeLibros.me

y el potencial spin-orbital, 676
y el potencial para el deuterón, 663, 671
y estado virtual del sistema neutrón-protón, 669-670
y la dispersión protón-protón, altas energías, 673-676
bajas energías, 670-672
y la estabilidad del núcleo, 553
y la estructura nuclear, 676-677
y la función propia para el deuterón, 666
y la teoría mesónica, 677-686
y potencial tensorial, 662-663, 676
Función de intensidad. 648
Funciones esféricas de Bessel, 525
Funciones propias, 189, 318
antisimétricas, 358-359, 362-363
en la desintegración beta, 612
condiciones para la aceptabilidad, 182, 299, 319
finitud de las, 182, 319
onda viajera, 216
para átomos de helio, 369-372
para barrera de potencial, 233
para el deuterón, 666
para la partícula libre, onda estacionaria, 220
tridimensional, 513, 527
para las ondas incidentes y dispersadas, 522
para partículas idénticas con interacción, 363-369
para un potencial cuadrado infinito, 253, 254
Funciones de onda, 169, 189, *véase también* Ondas piloto.
carácter complejo de las, 175
combinaciones lineales de, 190, 191, 284, 288
dependencia en el tiempo de las, 195-
grupos de, 147-151, 158-159, 164-165, 167, 217-219
interferencia de, 153, 156-157, 158-159, 172
interpretación de las, 209, 210, 217, 220, 294, 295, 316-320, 320
normalización de las, 191, 194-195, 210
para el potencial de escalón, $E > V_0$, 226
para la partícula libre, onda estacionaria, 220
onda viajera, 216
para partículas idénticas, 359
para reacciones nucleares de núcleos compuestos, 648
propiedades matemáticas de las, 147-151, 118-195
superposición de, 149, 150, 153, 172, *véase también* Combinaciones lineales, de funciones propias.
Funciones propias antisimétricas, 358-367
para partículas idénticas con interacción, 363
para partículas idénticas sin interacción, 358-359, 361
singulete, 364
triplete, 364
y spin, 363
y fuerzas de intercambio, 368
y principio de exclusión, 361-362
Funciones propias del átomo con un electrón, comportamiento cerca del origen, 308
degeneración de las, 303-304, 346-347
causa de la, 307-308, 397-398
normalización de las, 305
ortogonalidad de las, 305
paridad de las, 454
Funciones propias de triplete, 358-359, 363-364
números cuánticos para las, 366
y fuerzas de intercambio, 366-367
Funciones propias simétricas, 358-359, 363-364
para partículas idénticas en intersección, 364
para partículas idénticas sin intersección, 358-359, 362
y el impulso angular de spin, 363
Fusión del núcleo, 573-574
Fusión nuclear, *véase* Fusión del núcleo

"G"

Gamow y Teller, regla de selección de. 621
Gauss, ley de, 387
Gas de Fermi, 375-383
aplicaciones del, 376
densidad de niveles de energía del, 376
distribución de energía del, 376, 382
electrones de conducción y el, 379
modelo para el núcleo, 580-585
y efectos par-non, 582-585
y fórmula semiempírica para la masa, 582-584
y modelo de capas, 581, 585

www.FreeLibros.me

y profundidad de potencial nuclear, 581-582
niveles de energía del, 376
Geiger, contador de, 551-552
Geiger y Nutall, ley de, 597-598
Grupos de funciones de onda, 147-151, 158-159, 164-165, 167, 217-219

"H"

Halógenos, elementos, 405
Hamiltoniano, 319
Heisenberg, teoría de la mecánica cuántica de, 169-170, 334
Hermite, ecuación de, 259
solución de la, 259-262
Hermite, polinomios de, 263
Hidrógeno, *véase* Atomos con un electrón
Hiperfina, separación, 353-354, 437
Hiperones, 686

"I"

Impulso angular, 312-313
gran total, 438
operadores, 312-314
orbital, 321, *véase también* Impulso angular orbital
orbital total, 419, *véase también* Impulso angular orbital
spin, 333-336, 437, *véase también* Impulso angular spinorial
spinorial total, 418 *véase también* Impulso angular spinorial
suma de, en el acoplamiento JJ, 431
en el acoplamiento LS, 420-422
en el efecto Paschen y Bach, 436
Impulso angular spinorial, del deuterón, 661
cuantización del, para s 1/2, 333
de los núcleos, y las reglas de selección para la desintegración beta, 619, 621
y electrones en el núcleo, 550
y las reglas de selección para la desintegración gamma, 633, 635
de subcapas llenas, 427
de electrón, 333-336
del mesón μ, 686
del mesón π, 686
del neutrino, 611
del neutrón, 550
del positrón, 502
del protón, 550
funciones propias para el, 299, 334
medidas del, 439, 642, *véase también* Desintegración beta; Desintegración gamma.
valores del, 439
y el carácter de simetría, 363
y el modelo de capas, 589
números cuánticos del, para s 1/2, 333
total, 366, 418
cuantización del, 365, 419
en átomos con varios electrones ópticos, 417
y el carácter de simetría, 363
Impulso angular orbital, 321
cuantización del, 120, 134-135, 321, 419
en átomos con varios electrones ópticos, 417-418
de un átomo con un electrón, *véase* Atomo con un electrón.
de una subcapa llena, 427
movimiento precesional del, 321-322
total, 419
Impulso angular total, 343-346, 419-420, 431
Indistinguibilidad, 356-357
Integración numérica de las ecuaciones diferenciales, 184-186, 269, 277-278
Inercia, marco, 18
Integral de intercambio, 374
y la energéa coulómbica nuclear, 553
Integral ordinaria, 374
Intensidades de interacción, comparación entre las, 625
Interacción spin-órbita, en los átomos, 336-343, 347-349
en núcleos, 586-589
magnitud del, 588
y acoplamiento JJ, 589
y dispersión nucleón-núcleo, 588
y dispersión nucleón-nucleón, 676
y propiedades nucleares, 586-590
fórmulas para, 342, 349
magnitud de la, 342
para acoplamiento JJ, 431
para átomos alcalinos, 412-415
para acoplamiento LS, 423-424
Interacciones coulómbicas residuales, 417-418
Interacciones directas en las reacciones nucleares, 647-648, 654-658
aproximación de Born y las, 656-657
distribuciones angulares y energéticas para las, 654-655, 657

www.FreeLibros.me

excitación y desintegración en las, 656
pruebas experimentales para las, 654-655, 656-657
Intercambio, de índice para partículas idénticas, 357-358
de mesones, 677-678
y centro repulsivo, 686
y potencial de Serber, 681-683
Interferencia de funciones propias y funciones de onda, 153, 156-157, 158-159, 360
Interferómetro, 24
Ionización, energía de, 134, 406
Isomérica, transiciones, 628
Isótopos, 568
abundancia de los, 569, 574-576
estructura hiperfina y los, 486

"K"

K, mesones, 686
Kirchhoff, ley de, 56
Klein y Gordon, ecuación de, 680
Klein y Nishina, secciones de, 490-49.
Kurie, diagramas de, 615

"L"

Laboratorio (LAB), marco de, 50, 506
relación con el sistema centro de masa, 506-511
Laguerre, funciones asociadas de, 301, 303-304
Lamb, corrimiento de, 353
Landé, factor *g* de, 434
Landé, regla de intervalo de, 424, 430
Landé, regla de intervalo de, 424, 430
en núcleos, 586
Lantánidos, elementos, 403, 407
Larmor, frecuencia de, 329
Larmor, precesión de, 328-329
del momento magnético total, 433-434
Laplaciano, operador, en coordenadas rectangulares, 294
Legendre, funciones asociadas de, 301, 303-304
Legendre, polinomios de, 524
Límite clásico de la teoría cuántica, 210-213
e impulso angular spinorial, 334-335
e impulso angular orbital, 322
y oscilador armónico simple, 76, 264-265
y partículas idénticas, 359-360
y pozos cuadrados de potencial, 249-251
y principio de correspondencia, 140-141
y teoría de la perturbación dependiente del tiempo, 289-291
Límite de la serie, 119
Línea espectral, 118
anchura de la, *véase* Anchura de línea
Línea, espectral, 118
de estabilidad, 603
Linearidad de la ecuación de Schrödinger, 171-172, 189-190
Longitud de atenuación, para nucleones, 564-565
para rayos X, 498
Longitud propia, 34
Lyman, series de, 119, 126

"M"

Magnetón, de Bohr, 327
nuclear, 439
Magnetón nuclear, 439
Masa atómica, fórmula, 576-578
Masa, del deuterón, 661
en reposo, 43
del electrón, 81
medida de la, 80-83
del mesón, 685
del mesón, 684
del núcleo, 572
medida de la, 566-572
del neutrino, 611
del neutrón, 571
del positrón, 502
del protón, 571
relativista, 43
Masa del electrón, 83
medida de la, 82-83
Masa densidad en los núcleos, 559
Masa en reposo, 43
energía de la, 45
Masa reducida, 129, 506
en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el movimiento en el CM, 297
Masa relativista, 45-46
Maxwell, ecuaciones de, 20
Mecánica, clásica, 17-18
relativista, 41-48
Mecánica cuántica estadística, 383
Mecánica relativista, 41-48

www.FreeLibros.me

Mesones, 677-686
carácter de simetría del, 686
carga de, 684
carga de π, 681, 683
descubrimiento del μ, 685
descubrimiento del π, 683-684
desintegración del μ, 685
desintegración del π, 684-685
hiperones, 686
interacción del μ, 685
interacción del π, 685-686
masa del μ, 685
masa del π, 679, 684
mesones K, 686
momento dipolar magnético del, 686
momento dipolar magnético del, 686
vida media del μ, 685
vida media del π, 684-685
vida media y dilatación del tiempo, 685
Michelson y Morley, experimento de, 22-26
Modelo colectivo del núcleo, 591-594
y modelo de capas, 591
y modelo de la gota del líquido, 591
y momentos cuadripolares eléctricos, 592-594
y momentos dipolares magnéticos, 592
y niveles de baja energía, 642-643
Modelos de capas del núcleo, 585-590
bases teóricas del, 579-581
y el acoplamiento JJ, 589
y el impulso angular spinorial, 589
y el modelo colectivo, 591-594
y el modelo de gas de Fermi, 580-581
y el modelo de la gota de líquido, 591
y el modelo óptico del núcleo, 580
y la desintegración beta, 619-620
y la desintegración gamma, 632
y la teoría de Hartree, 586
y las interacciones spin-órbita, 586-588
y los momentos cuadripolares eléctricos, 594
y los momentos dipolares magnéticos, 589-590
Modelo de la gota de líquido para el núcleo, 575-578
y el modelo colectivo, 591-594
y el modelo de capas, 591
y la fisión, 602
y la fórmula semiempírica para la masa, 576-577
Modelo de Rutherford del átomo, 106-107
estabilidad en el, 114-115, 120-121, 157, 191, 449
predicciones del, 107-112
verificaciones del, 112-113
y la teoría de Bohr, 120
Modelo de Thomson del átomo, 95
y dispersión de partículas alfa, 99-105
Modelo nuclear de gas de Fermi, *véase* Modelo de gas de Fermi para el núcleo
Modelo óptico del núcleo, 559-566
y el modelo de capas, 580
y el modelo de gas de Fermi, 580-582
y etapa inicial de una reacción nuclear, 647
y valores de los parámetros del, 562-564
Modelos, 95, 547
y teorías, 590-591
Momento cuadripolar eléctrico, 591, 631
de los núcleos, 439-440, 593
del deuterón, 661-663
y el modelo de capas, 594
y modelo colectivo, 592-594
Momento cuadripolar magnético del núcleo, 332-333, 353-354, 437
y el momento colectivo, 592
y el modelo de capas, 589-590
y los electrones en el núcleo, 550
Momento dipolar magnético orbital, 325-327
cuantización del, 327
Momento dipolar magnético, del deuterón, 661-663
cuantización, 327, 333
de subcapas llenas, 427-428
del electrón, 333-334
del neutrón, 663
y la teoría mesónica, 683
del positrón, 502
del protón, 663
en un campo magnético no uniforme, 330-331
neto, 432
orbital, del electrón, 325-327
y movimientos precesionales, 329-330, 433-434
Multiplete, 424

"N"

Neutrino, desintegración beta y emisión de, 611-619
desintegración mesónica y emisión de, 684-685

www.FreeLibros.me

propiedades del, 611
reacciones inducidas, 623-625
retroceso en la desintegración beta, 623
Neutrón, 550
carácter de simetría del, 550
descubrimiento del, 550-552
desintegración beta del, 615-616
impulso angular spinorial del, 550
masa del, 571
momento dipolar magnético del, 663
y teoría mesónica, 683
Newton, leyes de, 18
para el impulso angular, 329
Nivel virtual, 540
Niveles de energía de átomo con un electrón, de generación de los, 303-304, 346-347
causa, 307-308, 397-398
con estructura fina, 351-353
en la teoría cuántica antigua, 123, 139
en la teoría de Schrödinger, 303
Niveles de energía para los átomos, para átomos alcalinos, 409-415
anchura de, 644-646
con acoplamiento *JJ*, 430-431
con acoplamiento *LS*, 423-424, 429-430
continuo de, 647
de partícula ligada, 188
de rayos X, 446-448
de una partícula no ligada, 91
del oscilador armónico simple, 72, 136, 262
del potencial de escalón, 34
del pozo cuadrado del potencial, $E < V_0$, 226-227, $E > V_0$, 241-250
del rotor rígido, 142, 323
densidad de, 644
discretos, 187
en el continuo, 188
en el gas de Fermi, 376, 581
en el modelo de capas, 587-588, 642-644
en el modelo colectivo, 642
excitación de, 626
medida de, 639-643, *véase también* Desintegración beta; Desintegración gamma
niveles de energía, separación Zeeman, 434-436
para átomos con muchos electrones, 396-397, 401-402, 403-404, 407, 416-8, 428-430, 430-431, 432-433
para átomos con un electrón 123, 139, 303-304
para el helio, 369, 370
para el hidrógeno, *véase* Atomos con un electrón
para el núcleo, espaciamiento promedio, 643-645
para un electrón libre, 134, 499-503
para un pozo de potencial cuadrado infinito, 255
Niveles discretos de energía, 127
anchura finita para los, 457
Normalización, de funciones propias, 191-192, 194
de la densidad de probabilidad, 179
de las funciones de onda, 191, 194-195, 218, 221-223
ejemplos, 254, 361-363, 512-514
Normalización en una caja, 222
aplicaciones de la, 252, 271, 512-514, 614
Notación espectroscópica, para *l*, 401
origen de la, 415
para *n*, 473
para *s*, 413-414
Nuclear, bombas, 604
Nuclear, fisión, *véase* Fisión del núcleo.
Nuclear, modelo colectivo, *véase* Modelo colectivo del núcleo.
Nuclear, modelo de la gota de líquido, *véase* Modelo de la gota de líquido para el núcleo.
Nuclear, modelo óptico, *véase* Modelo óptico del núcleo.
Nuclear, modelo para el átomo, *véase* Modelo de Rutherford, del átomo.
Núcleo blanco, 550
Núcleo compuesto, 641
y resonancia, 641-642
Núcleo hijo, 595, 599
Núcleo padre, 595, 599
Nucleones, 552
Núcleos, energía de amarre de los, *véase* Energía de amarre de los núcleos.
carácter de simetría de los, 549
composición de los, 549-552
deficiencia de masa de los, 571-573
densidad de carga de los, 557-559
densidad de masa de los, 548, 559, 566
spin, *véase* Impulso angular spinorial, de los núcleos.
estabilidad de los, 573-574, 575, 600-601-, 608
masa de los, 571
momento dipolar magnético de los, *véase* Momento dipolar magnético, de los núcleos.

www.FreeLibros.me

momentos cuadripolares eléctricos de los, *véase* Momento cuadripolar eléctrico.
niveles de energía de los, *véase* Niveles de energía de los núcleos.
Núcleos espejo, 552
desintegración beta de los, 619-621
energía de amarre y radios nucleares, 552-554
Número de Avogadro, 86
determinación del, 469
Número de onda, 119
Números cuánticos, 72, 189
asignación de los, 448-449
notación espectroscópica, para *l*, 401
para *n*, 473
para *s*, 413-414
para átomos, con acoplamiento *JJ*, 430
con acoplamiento *LS*, 419-423, 425
con un electrón, 302-304
con un electrón óptico, 412
con varios electrones ópticos, 416
para el modelo nuclear de capas, 600
para los niveles de rayos X, 473
Números mágicos, 578-580
y la distribución de los fragmentos en la fisión, 605
y la energía en la desintegración alfa, 594
y los momentos cuadripolares eléctricos, 592
Números mágicos nucleares, *véase* Números mágicos.

"O"

Ondas en una cuerda, 195-204
Ondas estacionarias en una cavidad, 61-65
números de frecuencia permitida, 65
Ondas parciales, 524-525, 542
impulso angular orbital de las, 525
y ondas planas, 527-529
Ondas parciales, análisis en, 522-532, 542-544
aplicabilidad del, 529, 536, 542
fórmulas para la sección, 531, 543
para la dispersión de onda S, 536-539
para la dispersión neutrón-protón, 666-668
para la dispersión por esfera rígida, 533-536
para la dispersión por una esfera absorbente, 543-544
para la dispersión protón-protón, 674-676
Ondas piloto, 145, *véase también* Funciones de onda
Operador de intercambio, 682
Operadores diferenciales, 204-209
para el impulso angular, 313-314
y cantidades dinámicas asociadas, 206
y desarrollo de la ecuación de Schrödinger, 293-294
y ecuaciones de valores propios, 316-320
y la ecuación relativista de onda, 680
y la relación con la teoría de Schrödinger, 207, 319
Operadores, *véase* Operadores diferenciales.
Ortogonalidad de las funciones propias, 192-194
en el caso degenerado, 193-194
en el continuo, 193
Oscilador armónico simple, 256-266
aplicaciones del, 256
comportamiento clásico del, 76, 256
condiciones a la frontera para el, 258-259
cuantización del, en la teoría cuántica antigua, 72, 135-136
ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el, 257-258
energía del punto cero del, 262
densidad de probabilidad del, 264
funciones propias para el, 263-264
niveles de energía del, 262
en la teoría cuántica antigua, 72, 136
paridad de las funciones propias del, 263
reglas de selección para el, 141

"P"

Par-non, efectos en los núcleos, 575, 577
y el gas de Fermi, 582-585
Paridad, 247, 452-454
de las funciones propias, para un potencial de pozo cuadrado infinito, 253-254
para el oscilador armónico simple, 263
para un átomo con un electrón, 454
para un potencial de pozo cuadrado, 247-248
para un potencial simétricamente esférico, 454

www.FreeLibros.me

de los niveles de energía nuclear, 637, 642-643
del estado base del deuterón, 662
medida de la, 642, *véase también* Desintegración beta; Desintegración gamma.
no conservación de la desintegración beta, 621-623
origen de la, 453
y la forma de un potencial, 249
y la teoría de la perturbación, 276
y la solución de las ecuaciones de Schrödinger independiente del tiempo, 249, 253-254
y reglas de selección para la desintegración beta, 619, 621
y las reglas de selección para la desintegración gamma, 633, 635
y reglas de selección para las transiciones atómicas, 454
Partícula independiente, movimiento en el núcleo de, 579-581
Partícula libre, 215-222
comportamiento clásico de la, 215
funciones propias, onda estacionaria, 220
en tres dimensiones, 529
onda viajera, 216
niveles de energía, 134, 216
Partícula libre, normalización de las funciones de onda para la, 218, 221
densidad de probabilidad, onda estacionaria, 221
ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, 215
flujo de probabilidad, onda estacionaria, 221
onda viajera, 217
funciones de onda, onda estacionaria, 220
onda viajera, 216
onda viajera, 216
Partícula producto, 550
Partícula proyectil, 550
Partícula beta, 96-98, 585
Partículas idénticas e indistinguibilidad, 355-356
Paschen y Bach, efectos de, 436-437
Pauli, principio de, *véase* Principio de exclusión.
Penetración de barrera, y emisión de partículas alfa, 238-240, 595-598
para potencial de barrera, 234-240
para potencial de escalón, 227-229
para radiación electromagnética, 236-238
y dualidad partícula onda, 236, 240
y principio de incertidumbre, 240
Perturbación, 270
y efecto sobre la degeneración, 278-279
Peso átomico, (A), 86, 548
Pfund, series de, 119, 126
Planck, constante de, 74
y el espectro continuo de rayos X, 470
y el principio de incertidumbre, 163
Planck, postulado de cuantización de, 72
comentarios sobre el, 74-76, 134-136, 262-263
Planck, teoría del espectro del cuerpo negro de, 71-74
Polarización, de nucleones dispersados, 588, 676
de rayos X dispersados, 464
Potencial centrífugo, 397-398
Potencial de Coulomb, 295, *véase también* Atomo con un electrón.
Potencial de escalón, 223-232
aplicaciones del, 223
coeficiente de reflexión, $E < V_0$, 227
$E > V_0$, 231-232
coeficiente de transmisión, $E < V_0$, 231-232
comportamiento clásico, $E < V_0$, 224
$E > V_0$, 229
condiciones a la frontera, $E < V_0$, 225-226, $E > V_0$, 230
densidad de probabilidad, $E < V_0$, 228
ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,
$E < V_0$, 224
$E > V_0$, 229
función de onda, $E < V_0$, 226
flujo de probabilidad, $E < V_0$, 227, $E > V_0$, 231
funciones propias, $E < V_0$, 226-227, $E > V_0$, 231
niveles de energía, $E < V_0$, 224, $E > V_0$, 229
Potencial de escalón alisado, 232
Potencial de Gauss, 518
Potencial de lápiz, 274-278
funciones propias, 276-277
niveles de energía, 276-277
Potencial de pozo cuadrado, 240-252
aplicaciones del, 241-242
coeficiente de transmisión, $E < V_0$, 241, 242

www.FreeLibros.me

condiciones a la frontera para el, $E < V_0$, 242
comportamiento clásico del, 241
$E < V_0$, 250
funciones propias, $E < V_0$, 244, 247
$E > V_0$, 250-251
infinito, *véase* Potencial de pozo cuadrado infinito.
paridad de las funciones del, 247-248
densidad de probabilidad, $E < V_0$, 248
$E > V_0$, 251
niveles de energía, $E < V_0$, 245-246
$E > V_0$, 241, 251
Potencial de pozo cuadrado infinito, 252-256
aplicaciones del, 253
condiciones a la frontera para, 253
ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el, 253
energía del punto cero para el, 255-256
funciones propias, 253, 254
niveles de energía, 255
normalización de las funciones propias para el, 253-254
paridad de las funciones propias para el, 253-254
Potencial de Serber, 673, 674-675, 676
y la teoría mesónica, 681, 683
Potencial de Yukawa, 679-681
Potencial neto, en la teoría de Hartree, 390, 393-394
en átomos con muchos electrones, 386
en la teoría de Fermi y Thomas, 388
Potencial nuclear, 559-566, *véase también* Modelo de capas del núcleo.
composición total de la parte real, 566-568
Potencial, partícula alfa-núcleo, *véase* Desintegración alfa,
barrera. *véase* Potencial de barrera
constante, *véase* Partícula libre
Coulomb, *véase* Potencial de Coulomb; Atomo con un electrón.
de escalón, *véase* Potencial de escalón.
de lápiz, *véase* Potencial de lápiz.
de oscilador armónico simple, *véase* Oscilador armónico simple.
deuterón, *véase* Fuerzas nucleares.
de Yukawa, *véase* Potencial de Yukawa.
gaussiano, *véase* Potencial de Gauss.
neto, *véase* Potencial neto.
núcleo-núcleo, *véase* Fuerzas nucleares.
pozo cuadrado de, *véase* Potencia de pozo cuadrado.
pozo cuadrado infinito, *véase* Potencial de pozo cuadrado infinito.
Potencial tensorial, 662-663, 676
Potenciales complejos, 544-545, 559-566
Potenciales de barrera, 232-240
coeficientes de transmisión para los, 234-235
comportamiento clásico de los, 234
condiciones a la frontera para los, 234
efecto Ramsauer y los, 235-236
emisión de partículas alfa y, 237-240
funciones propias para los, 233
niveles de energía para los, 233
resonancias de transmisión para los, 235-236
Potenciales y fuerzas, 182
dependientes del radio, tratamiento general, 298-299
dependiente del tiempo, tratamiento general, 285
dependiente de la coordenada relativa y la separación del movimiento del centro de masa, 298
y cuantización espacial, 322-323
Positrón, 499-503
agujeros y, 502
aniquilación de, 502-503
descubrimiento del, 499
emisión de, en la desintegración beta, 608-609
propiedades del, 502
teoría de Dirac del, 500-503
Positronio, 503
Precesión de Thomas, 336-341, 354
Precesión del impulso angular, Larmor, 328-329, 433-434
y el principio de incertidumbre, 322, 420
Principio de exclusión, 361-363
y capacidad de las subcapas, 401
y dispersión protón-protón, 670
y el acoplamiento *JJ*, 431
y el acoplamiento *LS*, 424-428
y el gas de Fermi, 378, 380-381, 581
y electrones de conducción, 380-381
y el impulso angular de agujeros, 473
y funciones propias antisimétricas, 361
y la distribución de probabilidad de Fermi, 383
y movimiento de partícula independiente en el núcleo, 581
y propiedades de los átomos, 407
y prueba experimental, 375
y teoría de Dirac de la producción de pares, 500

www.FreeLibros.me

y teoría de la estructura nuclear, 677
Principio de incertidumbre, 160, 161, 164
base física del, 161-163
e indistinguibilidad, 355
y el ancho de línea, 456-458, 459
y el postulado de De Broglie, 158-160
y la cuantización de la radiación electromagnética, 161-163
y la cuantización del impulso angular, 321
y la definición en energía en las reacciones nucleares, 651
y la difusión de grupos de ondas, 164-165
y la dualidad partícula-onda, 164-166, 228-229
y la emisión y absorción espontánea de mesones, 683
y la energía del punto cero, 255-256
y la masa en reposo del mesón, 678-679
y penetración de barrera, 227-228, 240
y reacción de núcleo compuesto, 647
Probabilidad, conservación de la, 179
Probabilidad de penetración de la barrera, para potencial de barrera, 234-236
en tres dimensiones, 596-597
para potencial nuclear, 596-598
Probabilidad de transición, 290
Probabilidad de transmisión de los nucleones a través de la superficie nuclear, 649
Probabilidad en la mecánica cuántica, 164
Producción de pares, 494-495, 499-503
sección para la, 494-495, 496
Producto escalar, 328
Producto vectorial, 312
Protón, 548
Pseudoescalares, 621
y la desintegración beta, 621-623

"Q"

Q, valor de las reacciones nucleares, 570

"R"

Radiación cósmica, 499
Radiación del cuerpo negro, 56-59
teoría de Planck de la, 71-74
teoría de Rayleigh y Jeans de la, 60-65, 70-71
Radiación electromagnética, absorción de la, 441-445, 449-450
densidad de energía de la, 53
emisión espontánea de la, 441, 448, 449-450
emisión inducida de la, 445, 449-450
flujo de energía de la, 55
naturaleza dual de la, 92-93, 145, 165-166
rapidez de emisión de la energía de la, 56
teoría clásica de la, 52-56
Radiación por cargas aceleradas, 52-56
véase Radio del átomo.
Radiación por frenamiento, *véase también* Rayos X, espectro continuo de, 476
Radiación térmica, 52
y la teoría cuántica, 51
Radio atómico, *véase* Radio del núcleo.
Radio del átomo en la teoría de Bohr, 122, 138
en la teoría de Hartree, 396
en la teoría de Thomas-Fermi, 389
estimación macroscópica del, 86-87
Ramsauer, efecto, 235-236, 539, 642
Radio nuclear, para la distribución de cargas, 552-559
comparación con los radios de distribución de potencial, 565-566
comparación con los radios de distribución de carga, 565-566
medidas por las secciones para la dispersión de neutrones, 559-560
medidas por dispersión de electrones del, 554-559
medidas por la dispersión de protones, 560-568
medida por la energía de amarre de los núcleos espejos, 552-554
para la distribución de potencial, 559-566
medidas para la desintegración y dispersión de partículas alfa, 107, 113-114, 240, 597
valores de los, 558
Rapidez de transición, 291
para absorción atómica, 441-445
para emisión inducida atómica, 445
para la emisión espontánea, atómica, 441, 446-448, 451
nuclear, 632-633
y la teoría cuántica antigua, 142, 291
Rayleigh y Jeans, teoría de la radiación del cuerpo negro de, 61-65, 70-71
distribución espectral en la, 70
Rayos catódicos, 80

www.FreeLibros.me

Rayos catódicos, tubo de, 80
Rayos gamma, 96-98, 547-548
Rayos X, difracción de, 464-468
descubrimiento de los, 463-464
medida del espectro de, 464, 468-469
propiedades de los, 464
Rayos X, dispersión de, 480-492
coherente, 464-468, 486-488
sección para la, 486-488
Compton, 89-92, 489-492
incoherente, 485-486
medida de la estructura atómica por la, 490-492
sección de Klein y Nishina para la, 490-492
sección de Thomson para la, 482, 485, 492
sección total para la, 496
teoría clásica de la, 480-492
teoría cuántica de la, 488-491
teoría de Hartree y la, 392, 488
Thomson, 480-485, 492
Rayos X, efecto fotoeléctrico por, 492-495
sección para el, 494-495, 496
Rayos X, espectro continuo de, teoría clásica, 477-478
constante de Planck y el, 470
origen del, 476-480
propiedades del, 470-471
teoría cuántica del, 478-479
Rayos X, espectro de línea de, y la teoría de Bohr, 476
el efecto fotoeléctrico y el, 494
números cuánticos para el, 473
origen del, 471-475
propiedades del, 471
reglas de selección para el, 474
y agujeros, 472-473
y la determinación de la carga atómica, 476-477
y los experimentos de Moseley, 475-476
Rayos X, excitación de los átomos, 408, 471-472
Rayos X, niveles de energía, 473-474
Rayos X, producción de pares por, 494-495, 499-503
sección para la, 494-495, 496
Reacciones nucleares, 646-658
balance de energía en las, 569-572
historia de las, 550-552
medida de los niveles de energía y las, 640-643
notación para, 551
núcleo compuesto, *véase* Interacciones directas en las, reacciones nucleares.
valores Q para las, 569
Reacciones nucleares de núcleos compuestos, 647-655
distribuciones angulares y de energía en las, 654-656
excitación y desintegración de, 648-651
fórmula de Breit y Wigner para las, 654
hipótesis de la anchura aleatoria, 651
independencia de la formación de la desintegración de las, 651
principio de incertidumbre y las, 647
Reactor atómico, 604
Reactores nucleares, 604
Recursión, relación de, 260. 269
Redes de difracción, 117, 153, 154
Reflexión total interna, 236-237
Regla de oro Nº 2, 291
y la aproximación de Born, 514-516
y la desintegración beta, 612-615
y la anchura de los niveles nucleares de energía, 645-646
Reglas de selección, para espectros alcalinos, 415
ejemplo de valuación de las, 451-454
en la antigua teoría cuántica, 139, 140-141
funciones propias inicial y final y las, 451
para el espectro con acoplamiento *JJ*, 432
para el espectro con acoplamiento *LS*, 429-430
para el espectro beta, 619, 621
para el espectro gamma, 633
para el espectro de rayos X, 474
Relación s-m para electrones, 82
Relación masa-energía, 46-47
y las reacciones nucleares, 552
Relación relativista masa-energía, 45-46
y el balance de energía en las reacciones nucleares, 552, 569-571
y la energía de amarre de los electrones atómicos, 412, 566
y la energía de amarre de los núcleos, 571-572
y verificación experimental de la, 571
Relatividad, aplicaciones de la teoría de la, *véase* Relación relativista masa-energía.

www.FreeLibros.me

carencia de radiación en una carga con movimiento uniforme, 53
correcciones a la aproximación de Born, 555
correcciones a la ecuación de Schrödinger, 349-350
efecto Compton, 90
impulso angular spinorial, 335
precesión de Thomas, 336-341, 354
producción de pares, 499-503
teoría de Sommerfeld de la estructura fina, 138
Relatividad, teoría general de la, 49
teoría espacial de la, 17-49
verificación experimental de la teoría de la, 48-49
Relativista, ecuación de onda, 680
Residual, núcleo, 551
Resonancias, 538-539
de muchas partículas contra una sola partícula, 642, 648
de reacciones nucleares, 639-642
en núcleos, 564
en potenciales de pozo cuadrado, 252
para transmisión a través de barreras de potencial, 235-237
y estados virtuales, 539-541
Resonancias en la transmisión, para potenciales de barrera, 234-237
en el efecto Ramsauer, 539
Reversibilidad microscópica, 446
Rotor rígido, niveles de energía del, 142, 323
Rutherford, experimentos de dispersión de, 98-99, 105-106, 112-114, *véase también* Dispersión de Coulomb.
Russel y Saunders, acomplamiento de, *véase* Acoplamiento *LS*.

"S"

Saturación de las fuerzas nucleares, 659-661, 673, 676-677
Schmidt, líneas de, 590
Sección, 482, 490-492, 509
Brelt y Wigner, 654
CM y LAB, 509-511
coulómbica, 541
diferencial, 485, 491
fórmula en la aproximación de Born para la, 516-518.
fórmulas para el corrimiento de fase, 531, 543
fotoeléctrica, 494, 496
interpretación geométrica de la, 483
Klein y Nishina, 489-491
neutrón-prot6n, 669-670, 673
onda s, 536
para los rayos X, 596-597
para el pozo cuadrado, 519, 538, 668
para producción de pares, 494, 496
para un potencial de Gauss, 518
por esfera dura, 535
protón-núcleo, 561
protón-protón, 672-675
Thomson, 482, 485
Sección total, 496, 543, *véase también* Sección
Separación, constante de, 180
Series, atómicas, 118
de Balmer, 119, 126
de Brackett, 119, 126
de Lyman, 119, 126
de Pfund, 119, 126
de Rydberg, 118, 411, 415
Series de Rydberg para los alcalinos, 119, 411, 415
para el hidrógeno, 118
Series radioactivas, 598-601, 605-606
división en las, 606
equilibrio en las, 599-600
Simetría de las funciones propias, para partículas alfa, 363
e impulso angular de spin, 363
para electrones, 361
para mesones, 686
para neutrones, 362
para protones, 363
y comportamiento de los átomos, 363, 407
Simultaneidad, 29-31
Sincronización de los relojes, 29-30, 35-36, 39
Singulete, estado del deuterón, 668
Slater, determinante de, 361
Solución en serie de las ecuaciones diferenciales, 259-260, 301-302
Sombra dispersión, 535-536, 544
Spin de electrón, *véase* Impulso anguiar de spin
Spin, dependencia de las fuerzas nucleares del, 669-676
Spin, factor *g* del, 333-334, 353
Stefan, ley de, 56
Stern y Gerlach, experimento de, 331-332
en átomos de hidrógeno, 332
y spin del electrón, 332
Stokes, ley de, 82
Subcapas, 398
en átomos alcalinos, 410-411

www.FreeLibros.me

en átomos con varios electrones, 398
ordenamiento por la energía, 401-402, 403-404, 407
simetría esférica cuando está llena, 391-392, 404
Superposición de funciones de onda, 149, 150, 153, 172. *véase también* Combinaciones lineales.

"T"

Tabla periódica de los elementos, 399
elementos actínidos, 399
elementos alcalinos, 405
elementos halógenos, 405
elementos de gases nobles, 404-405
elementos de tierras raras, 403, 406
elementos de grupos de transición, 405-406
elementos halógenos, 405
elementos lantánidos, 403, 406
elementos de transuránicos, 406
interpretación en la teoría de Hartree, 400-406
Teoría atómica, de Bohr, *véase* Teoría de Bohr del átomo de Hartree, *véase* Teoría de Hartree del átomo de Schrödinger, *véase* Atomos con un electrón, de Thomas y Fermi, *véase* Teoría de Thomas y Fermi del átomo.
Teoría de Bohr del átomo, 117-142
impulso angular, comparado con la mecánica cuántica, 312
modificación relativista de Sommerfeld, 137-140, 351-352
niveles de energía del, comparados con la mecánica cuántica, 303
postulados de, 120-121, 129, 134-136
postulados de, interpretación de De Broglie, 156-157
predicciones de la, 131-130
radios de las órbitas, comparadas con la mecánica cuántica, 307
Teoría de Hartree del átomo, 389-398, *véase también* Atomos con muchos electrones, en la teoría de Hartree,
y el modelo nuclear de capas, 586
y la teoría de la estructura nuclear, 676
y su verificación mediante medias de rayos X, 394, 488
Teoría de la perturbación dependiente del tiempo, *véase* Teoría de la perturbación en el caso dependiente del tiempo.
Teoría de la perturbación en el caso dependiente del tiempo, 285-291, *véase también* Regla de oro Nº 2,
fórmulas para, 286
y el postulado cuántico de Einstein, 443
y la absorción de radiación electromagnética, 441-445
y la emisión inducida de radiación electromagnética, 445
y regla de oro Nº 2, 286-291
Teoría de los mesones, 679-683
y papel de la teoría de las perturbaciones, 684
Teoría de la perturbación para el caso no degenerado, 269-274
fórmula para la, 273
uso en el caso degenerado, 282-284
precisión de la, 278-279
y el átomo de helio, 368-371
y potencial de lápiz, 369-372
Teoría de perturbación, y teoría mesónica, 684
y la electrodinámica cuántica, 684
Teoría de perturbación para el caso degenerado, 272-276
ejemplo clásico de, 276-279
fórmulas para la, 279-282
tratamiento simplificado de la, 282-283 346-347
y átomos con varios electrones ópticos, 416-418
y el acoplamiento *JJ*, 431
y el acoplamiento *LS*, 418-419, 422-424
y el átomo de helio, 368-375
y el efecto Zeeman, 434-435
y la energía spin-órbita, 346-349
y la corrección relativista a la ecuación de Schrödinger, 349-350
Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica, y el postulado de De Broglie, 169-170
postulados de la, 169-170, 319
y la cuantización de la energía, 182-188
Teoría de Thomas y Fermi del átomo, 386-389
Teoría relativista de Sommerfeld de los átomos, 137-139
y la estructura fina, 137, 335
y la mecánica cuántica, 351-353

www.FreeLibros.me

Teorías de emisión, 28
Tiempo propio, 33
Tierra, edad de la, 600
Transformación de velocidades, clásica, 508
relativista, 39-40
Transformación, de las secciones, CM a LAB, 510-511
de Galileo, 18
de impulso y energía, clásica, 47
relativista, 48
de la velocidad, clásica, 508
relativista, 40
de Lorentz, 38
Transformación galileana, 18
y la mecánica, 17-22
Transformación relativista, de impulso y energía, 47-48
de posición y tiempo, 38
de velocidad, 40
Transiciones cuadripolares eléctricas, 455, 629
Transiciones dipolares eléctricas, 442, 454, 629
Transiciones dipolares magnéticas, 455
Transiciones permitidas, 619
Transiciones prohibidas, 619
Translación uniforme, 18
Tripletes, de niveles de energía, *véase* Estructura fina de las líneas espectrales, 415

"U"

Ultimo nucleón en el núcleo, 578-579
Unicidad de las funciones propias y sus derivadas, 182, 299, 319
Unidad de masa, atómica, 569
equivalente en energía de la, 570-571
Urnsold, teorema de, 311

"V"

Valores de expectación, 204-209
fórmula general, 208
orden de los términos en las integrales, 207, 214
relación con la teoría de la perturbación, 273
Valores propios, 189, 318; *véase también* Niveles de energía.
Vectores axiales, 622
Vectores polares, 622
Velocidad de grupo, 148, 149, 171
Velocidad de la luz, 21
Velocidad de la onda, 147, 148, 149
Velocidad límite, en la relatividad, 29, 39, 40, 49, 54
y alcance de las fuerzas nucleares, 679
Vida media de los estados cuánticos, 456
y anchura de los niveles de energía, 459

"W"

Weizsacker, fórmula para la masa atómica, *véase* Fórmula semiempírica para la masa.
Wien, ley de, 59-60
Wilson y Sommerfeld, reglas de cuantización, 134-135
aplicaciones de las, 134-136
interpretación de De Broglie de las, 157

"Z"

Zeeman, efecto anómalo, 436

www.FreeLibros.me

Esta es una exposición metódica y brillante de Física Moderna que refleja las tendencias actuales en la enseñanza de dicha materia a nivel introductorio. Según el autor, tal curso,en vez de presentar los temas con un enfoque esencialmente empírico, debe desarrollar las bases teóricas y ofrecer al lector la preparación necesaria para un estudio realmente serio del átomo y del núcleo. Para cumplir este propósito, el profesor Eisberg desarrolla con bastante amplitud los conceptos principales de la mecánica cuántica y trata de diversos temas que, hace poco, se consideraban demasiado abstractos o difíciles para los estudiantes de licenciatura.

Aparte de su enfoque moderno, el libro se destaca también por una presentación fácil, poco común en obras de tan alto valor científico. El autor explica los antecedentes históricos de cada tema y, luego, lo aborda utilizando los argumentos que están al alcance de cualquier lector que ya ha tomado los cursos de física elemental y cálculo. Además, el grado de dificultad se eleva, conforme se desarrolla el texto, de modo que el libro puede adaptarse a los diversos cursos de la materia que se imparten a nivel de licenciatura a posgraduado, en las carreras de física, química, matemáticas e ingeniería. El libro también ofrece material suficiente para un curso semestral de introducción a la mecánica cuántica.

ÁREA: FÍSICA
ISBN 968-18-0418-X
9 789681 804183

e-mail: limusa@noriega.com.mx
www.noriega.com.mx

www.FreeLibros.me