

Introducción a la física moderna

Mauricio García Castañeda
Jeannine Ewert De-Geus



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA

Tercera edición

Introducción a la Física Moderna

Tercera Edición

**Mauricio García Castañeda
Jeannine Ewert De-Geus**
Profesores del Departamento de Física
Universidad Nacional de Colombia.

Universidad Nacional de Colombia

539 García Castañeda, Joaquín Mauricio, 1949-
G216 Introducción a la física moderna, 3a. ed. / Mauricio García Castañeda,
Jeannine Ewert De-Geus – Bogotá: Universidad Nacional de Colombia, 2003.
xxiv, 355 p.
ISBN 958-701-266-6
1. Física moderna 2. Teoría cuántica I. Ewert De-Geus, Jeannine, 1940
Universidad Nacional de Colombia.
División Bibliotecas

INTRODUCCIÓN A LA FÍSICA MODERNA

© Universidad Nacional de Colombia

© Mauricio García Castañeda
Jeannine Evert De-Geus
Profesores Facultad de Ciencias

Tercera edición, 2003

ISBN 958-701-266-6

Diseño de carátula:
Clara I. Bermúdez, cbermudez@latinmail.com

Diseño y diagramación en L^AT_EX:

Omar Ortiz, ortizo@linuxmail.org
Marta Guerra, margue@linuxmail.org

Preparación editorial e impresión:
Universidad Nacional de Colombia
UNIBIBLOS
Correo electrónico: unibiblo@dnic.unal.edu.co
Bogotá, Colombia
2003

Índice General

Introducción	xxiii
1 Teoría de la relatividad especial	1
1.1 Relatividad	2
1.1.1 Marcos de referencia inerciales y mecánica clásica .	2
1.1.2 Luz, éter y electromagnetismo	5
1.2 Postulados de la teoría de la relatividad especial	12
1.3 Cinemática relativista	12
1.3.1 Dilatación del tiempo	12
1.3.2 Contracción de la longitud	15
1.3.3 Relatividad de la simultaneidad de eventos	18
1.4 Transformaciones de Lorentz	20
1.4.1 Sincronización de relojes	21
1.5 Dinámica relativista	26
1.5.1 Cantidad de movimiento relativista	26
1.5.2 Energía Relativista	31
1.5.3 Equivalencia masa-energía	34
1.5.4 Partículas de masa en reposo cero	36
2 Radiación del cuerpo negro	43
2.1 Espectro de la radiación electromagnética	43
2.2 Radiación térmica	45
2.3 Radiación del cuerpo negro	47
2.4 Teoría cuántica de la radiación del cuerpo negro	53
3 Propiedades corpusculares de la radiación	61
3.1 Efecto fotoeléctrico	61
3.1.1 Descubrimiento del efecto fotoeléctrico	61
3.1.2 Resultados experimentales del efecto fotoeléctrico .	62
3.1.3 Explicación clásica del efecto fotoeléctrico	65
3.1.4 Explicación cuántica del efecto fotoeléctrico	67
3.1.5 Notas adicionales sobre el efecto fotoeléctrico . . .	70
3.2 Efecto Compton	72

3.2.1	Descubrimiento del efecto Compton	72
3.2.2	Teoría cuántica del efecto Compton	74
4	Espectroscopía y modelos atómicos	83
4.1	Espectroscopía	83
4.1.1	Espectros atómicos	83
4.1.2	Espectro atómico de emisión	86
4.1.3	Espectro atómico de absorción	87
4.1.4	Series espetrales del átomo de hidrógeno	88
4.2	Modelos atómicos	91
4.2.1	Historia del átomo	91
4.2.2	Modelo atómico de Thomson	93
4.2.3	Modelo atómico de Rutherford	95
4.2.4	Modelo de Bohr para el átomo de hidrógeno	99
4.3	Experimento de Franck-Hertz	104
4.4	Principio de correspondencia de Bohr	109
5	Rayos X	113
5.1	Descubrimiento y propiedades de los rayos X	113
5.2	Emisión y espectro de rayos X	114
5.3	Determinación de la carga nuclear	120
5.4	Absorción de rayos X	121
6	Propiedades ondulatorias de la materia	127
6.1	Ondas de materia	127
6.1.1	Postulado de De Broglie	127
6.1.2	Ondas de materia	129
6.2	Experimento de Davisson-Germer	132
6.3	Principios de incertidumbre de Heisenberg	137
6.3.1	Partícula y paquete de onda	137
6.3.2	Principio de incertidumbre $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$	140
6.3.3	Principio de incertidumbre energía-tiempo	141
7	Mecánica cuántica ondulatoria	145
7.1	Mecánica Cuántica Ondulatoria	146
7.1.1	Interpretación estadística de la función de onda	146
7.1.2	Ecuación de Schrödinger	149
7.2	Operadores Mecanocuánticos	151
7.2.1	Valor esperado de una variable dinámica	153
7.2.2	“Deducción” de la ecuación de Schrödinger	155
7.3	Aplicaciones de la ecuación de Schrödinger	157
7.3.1	Escalón de potencial	157

7.3.2	Caja de potencial unidimensional	164
7.3.3	Caja de potencial tridimensional	168
7.3.4	Potencial de fuerzas centrales	171
7.3.5	Barrera de potencial	173
8	Oscilador armónico	177
8.1	Oscilador armónico clásico	177
8.2	Oscilador armónico cuántico	180
8.2.1	Solución de la ecuación de Schrödinger	180
8.2.2	Energía de un oscilador armónico cuántico	183
8.2.3	Densidad de probabilidad	185
9	Teoría cuántica de los átomos hidrogenoides	189
9.1	Descripción cuántica de los átomos hidrogenoides	190
9.1.1	Solución de la ecuación de Schrödinger	190
9.1.2	Energía de un átomo hidrogenoide	195
9.1.3	Función de onda para átomos hidrogenoides	196
9.1.4	Números cuánticos	197
9.1.5	Densidad de probabilidad radial	199
10	Momentos angulares	205
10.1	Momento angular orbital	205
10.1.1	Operador de momento angular orbital	205
10.1.2	Cuantización del espacio	206
10.1.3	Reglas de selección	211
10.2	Efecto Zeeman	212
10.3	Momento angular de spín	218
10.4	Momento angular total	221
11	Elementos de la física nuclear	227
11.1	Conceptos básicos	227
11.1.1	Componentes del núcleo	227
11.1.2	Unidad de masa atómica	230
11.1.3	Fuerza nuclear y energía de enlace	231
11.2	Radiactividad natural	234
11.2.1	Descubrimiento de la radiactividad natural	234
11.2.2	Isótopos y estabilidad isotópica	235
11.2.3	Determinación de la masa isotópica y abundancia .	238
11.2.4	Vida media y vida promedio	243
11.2.5	Series radiactivas	248
11.3	Radiactividad artificial	251
11.3.1	Reacciones nucleares	251
11.3.2	Descubrimiento de radiactividad artificial	254

11.4 Fisión y fusión nuclear	257
11.4.1 Fisión nuclear	257
11.4.2 Fusión nuclear	261
12 Elementos de la física del estado sólido	269
12.1 Qué es el estado sólido	269
12.1.1 Sólidos cristalinos	270
12.2 Elementos de cristalográfia	272
12.2.1 Caracterización cristalina	272
12.2.2 Sistemas cristalinos	274
12.2.3 Direcciones y planos cristalográficos	278
12.3 Difracción de rayos X en los cristales	282
12.4 Imperfecciones cristalinas	288
12.5 Tipos de fuerzas que se presentan en los cristales	289
12.5.1 Enlace iónico	290
12.5.2 Enlace covalente	292
12.5.3 Enlace de Van der Waals	293
12.5.4 Enlace metálico	294
12.6 Propiedades eléctricas de los sólidos	294
12.6.1 Conductividad eléctrica en los metales	295
12.7 Comportamiento de los electrones en los cristales	300
12.8 Vibraciones de la red cristalina	309
12.8.1 Modelo de la cadena monoatómica	310
12.8.2 Modelo de la cadena biatómica	312
12.8.3 Fonones	315
Apéndices	
A Transformaciones de Lorentz	317
B Una nota sobre ecuaciones diferenciales	321
C Solución de la ecuación diferencial de Hermite	325
D Solución de la ecuación para átomos hidrogenoides	329
E Demostración de la expresión $F(E)$ para el modelo de Kronig-Penney	339
F Tabla periódica de los elementos	343
G Constantes físicas	347
Bibliografía	349

Índice de Figuras

1.1	Dos marcos de referencia inerciales S y S' . S' se mueve hacia la derecha en dirección x , con velocidad relativa constante u .	3
1.2	Dos barcos van a recorrer la misma distancia en un río cuya corriente tiene una velocidad u con respecto a la orilla.	8
1.3	Ilustración para el movimiento de los dos barcos.	9
1.4	Esquema del interferómetro utilizado por Michelson y Morley.	10
1.5	Reloj de luz.	13
1.6	Recorrido de la luz cuando el reloj está en movimiento	14
1.7	Un reloj de luz moviéndose paralelamente a su longitud, mostrado en tres instantes diferentes. La señal emitida por el reloj se produce cada vez que la luz llega al espejo de la izquierda.	15
1.8	Mesón μ moviéndose con respecto a un observador en la tierra. Visto desde el marco de referencia de la tierra.	18
1.9	Misma situación anterior (mismo fenómeno físico) descrita ahora desde el sistema de referencia del mesón.	18
1.10	En el instante en que las naves se cruzan, para el observador, se encienden simultáneamente dos luces	19
1.11	Para el observador B no hay simultaneidad. La simultaneidad resulta relativa al marco de referencia.	19
1.12	Sincronización de relojes.	22
1.13	Posición de los relojes que se van a observar.	24
1.14	Posición de los relojes cuando la nave avanza en un tiempo Δt .	25
1.15	Relojes en movimiento vistos por el observador en la nave.	25
1.16	Colisión inelástica observada desde dos sistemas de referencia con movimiento relativo.	27
1.17	Dependencia con respecto a la velocidad de la cantidad de movimiento y la masa relativista.	30

1.18	Velocidad de una partícula cargada en función del voltaje acelerador	30
1.19	Variación de la energía cinética con la velocidad.	33
1.20	Representación gráfica de las relaciones entre E , E_0 , K y p	34
1.21	División de una partícula inicialmente en reposo.	35
1.22	Colisión frontal de dos partículas.	38
1.23	Problema 3.	41
1.24	Cubo moviéndose respecto a el observador S. Problema 4. .	41
2.1	Representación de una onda electromagnética donde \vec{E} es el campo eléctrico, \vec{B} es el campo magnético y \vec{n} es la dirección de propagación.	43
2.2	Espectro de la radiación electromagnética (figura no hecha a escala).	44
2.3	Resistencia de una estufa eléctrica.	46
2.4	Curvas típicas de la radiación térmica.	47
2.5	Esquema de un reflector perfecto y un cuerpo negro. .	48
2.6	Curvas del espectro de la radiación del cuerpo negro. .	49
2.7	Resultado teórico de Wien y curva experimental para la radiación del cuerpo negro.	50
2.8	Curva teórica de Rayleigh-Jeans y curva experimental para la radiación del cuerpo negro.	51
2.9	Resultados teóricos y curva experimental para la radiación del cuerpo negro.	52
2.10	Energía promedio en función de la frecuencia para un oscilador.	54
2.11	Representación de la energía de un oscilador.	56
3.1	Representación esquemática del efecto fotoeléctrico. . . .	62
3.2	Esquema del arreglo experimental para observar un efecto fotoeléctrico.	63
3.3	Fotocorriente en función del voltaje acelerador.	64
3.4	Dependencia del contravoltaje con la frecuencia para diferentes materiales.	65
3.5	Lámina de potasio irradiada por una fuente de luz. . . .	69
3.6	Esquema del dispositivo experimental para observar el efecto Compton.	72
3.7	Corrimiento de Compton para diferentes ángulos de dispersión.	73
3.8	Esquema de la colisión entre un fotón y un electrón. . .	74
3.9	Diagrama vectorial para el análisis de la conservación de la cantidad de movimiento.	75

4.1	Líneas de Fraunhofer en el espectro solar.	84
4.2	Esquema de la detección de un espectro de línea.	86
4.3	Esquema de un espectro de bandas.	86
4.4	Espectro de emisión.	87
4.5	Espectro de absorción.	88
4.6	Esquema de la serie de Balmer para el átomo de hidrógeno.	89
4.7	Modelo atómico propuesto por J.J.Thomson.	93
4.8	Esquema del arreglo experimental para observar la dispersión de partículas α	94
4.9	Modelo atómico propuesto por Rutherford.	95
4.10	Trayectoria de una partícula α dispersada por un núcleo atómico.	97
4.11	Esquema de las trayectorias de una partícula α dispersada por un núcleo atómico para diferentes parámetros de impacto.	98
4.12	Dispersión de una partícula α por un núcleo cuando el parámetro de impacto es cero (incidencia frontal).	98
4.13	Esquema de un átomo de hidrógeno ($Z=1$).	100
4.14	Niveles de energía y algunas energías importantes.	101
4.15	Niveles de energía y series espectrales del átomo de hidrógeno.	103
4.16	Diagrama del experimento de Franck-Hertz.	104
4.17	Sistema de dos partículas que giran alrededor de su centro de masa (CM).	106
4.18	Diagrama de algunos niveles de energía para los átomos de Helio ionizado e hidrógeno, sin tener en cuenta la masa nuclear.	108
5.1	Esquema de un tubo de rayos X.	115
5.2	Espectro de rayos X.	115
5.3	Capas electrónicas de un átomo de varios electrones.	118
5.4	Esquema de la emisión de rayos X característicos.	119
5.5	Variación de la intensidad de un haz de rayos X en función del espesor del material que atraviesa.	122
6.1	Esquema del dispositivo experimental para observar la difracción de electrones.	133
6.2	Corriente eléctrica producida por los electrones dispersados.	134
6.3	Patrón de difracción producido por electrones de alta energía que pasan a través de una lámina metálica.	135
6.4	Difracción sobre los planos de un cristal.	136
6.5	Esquema de una onda plana.	138

6.6	Construcción de paquetes de onda.	139
7.1	Aspecto de la función de onda.	146
7.2	Norma al cuadrado de la función de onda.	147
7.3	Esquema de una función de onda y su partícula asociada.	148
7.4	Ejemplos gráficos de funciones matemáticas que no son funciones de onda adecuadas para resolver problemas mecanocuánticos.	149
7.5	Escalón de potencial.	157
7.6	Diagrama de energías involucradas en el problema de una partícula que incide sobre un escalón de potencial con $E < V_0$	158
7.7	Escalón de potencial con $E < V_0$	161
7.8	Diagrama de energías en el problema de una partícula que incide sobre un escalón de potencial con $E > V_0$	161
7.9	Escalón de potencial con $E > V_0$	163
7.10	Caja de potencial unidimensional de ancho a	164
7.11	Niveles de energía de una partícula en una caja de potencial unidimensional.	166
7.12	Funciones de onda y densidades de probabilidad para una partícula en una caja de potencial unidimensional.	167
7.13	Caja de potencial en tres dimensiones	168
7.14	Niveles de energía y estados degenerados para una partícula en una caja de potencial tridimensional de lados iguales .	170
7.15	Curva de energía potencial en función de la distancia radial r para fuerzas centrales conservativas.	171
7.16	Potencial de fuerzas centrales.	172
7.17	Barrera de potencial de ancho a y altura V_0	173
7.18	Barrera de potencial con $E < V_0$	174
7.19	Potencial.	176
8.1	Esquema de una partícula que realiza un movimiento armónico simple de amplitud A bajo la acción de la fuerza recuperadora F	178
8.2	Curva de la energía potencial del oscilador armónico en función de la posición de la partícula.	179
8.3	Funciones de onda del oscilador armónico para $n = 0$ hasta $n = 5$. Las líneas punteadas son los límites clásicos de oscilación	183
8.4	Diagrama de energías para el oscilador armónico cuántico.	184
8.5	Energía potencial y algunos niveles de energía para el oscilador armónico.	185

8.6	Distribución de la densidades de probabilidad cuántica y clásica de un oscilador armónico con $n = 1$	186
8.7	Densidades de probabilidad del oscilador armónico clásico y cuántico para $n=2, 3$ y 10 . $\pm A$ es la amplitud de la oscilación clásica	186
9.1	Esquema de un átomo hidrogenoide cuyo núcleo tiene una carga eléctrica $+Ze$	190
9.2	Coordenadas esféricas y las correspondientes ecuaciones de transformación	191
9.3	Diagrama de los valores de los números cuánticos para $n = 2$	198
9.4	Densidad de probabilidad radial en función de la distancia $n = 1, 2$ y 3 ($Z = 1$). Las líneas punteadas corresponden al radio calculado apartir del modelo atómico de Bohr. La unidad de la escala vertical es arbitraria.	200
9.5	Función de onda radial en función de la distancia $n = 1, 2$ y 3 ($Z = 1$). Las líneas punteadas corresponden en cada caso al radio de Bohr correspondiente. La escala vertical es arbitraria.	201
10.1	Vectores de posición, cantidad de movimiento y momento angular de una partícula en movimiento.	205
10.2	Diagrama vectorial de la cuantización del espacio para $\ell = 2$	209
10.3	Transiciones permitidas entre estados con valores de momento angular orbital mostrados.	212
10.4	Momento angular orbital y momento magnético orbital del electrón en un átomo.	213
10.5	Precesión del momento angular orbital alrededor de la dirección del campo magnético \vec{B}	215
10.6	Esquema de transiciones típicas debidas al efecto Zeeman.	217
10.7	Posibles orientaciones del spín del electrón en el espacio.	219
10.8	Posibles orientaciones relativas de los vectores \vec{L} y \vec{S} para formar el vector \vec{J}	221
11.1	Esquema y ecuación de la transmutación de nitrógeno en oxígeno.	228
11.2	Esquema y reacción de la obtención de un neutrón.	229
11.3	Curva de energía de enlace por nucleón en función del número de masa.	233
11.4	Gráfica de N en función de Z para los núcleos. La gráfica se aleja de la recta $Z = N$ para $Z > 20$	237

11.5	Esquema del espectrógrafo de masa de Aston y de un espectro de masa.	238
11.6	Especrómetro de masa de Dempster.	239
11.7	Comportamiento de la desintegración radiactiva en el tiempo	243
11.8	Serie radiactiva de tres elementos.	246
11.9	Esquemas de las desintegraciones de las cuatro series radiactivas.	249
11.10	Esquema de las deformaciones sucesivas de un núcleo al aumentar su energía de excitación.	258
11.11	Energía potencial del núcleo en función de la distancia entre sus fragmentos de fisión.	259
11.12	Esquema de una reacción en cadena.	260
11.13	Esquemas de los ciclos.	263
12.1	Sólido bidimensional.	270
12.2	Cristal en dos dimensiones y su celda unitaria. El área sombreada contiene todas las características del cristal. .	273
12.3	Definición de los vectores base.	273
12.4	Vectores unitarios, magnitudes y ángulos en una celda unitaria general.	274
12.5	Sistema cúbico con sus tres estructuras.	275
12.6	Sistema cristalino tetragonal.	275
12.7	Sistema ortorrómbico.	276
12.8	Sistema monoclínico.	276
12.9	Sistema triclínico.	277
12.10	Sistema trigonal.	277
12.11	Sistema hexagonal.	277
12.12	Sistema de referencia arbitrario en un cristal cúbico simple.	279
12.13	Las líneas punteadas son todas paralelas y unen siempre la diagonal principal de los cubos, independientemente del origen del sistema de referencia.	280
12.14	Un plano cristalino cualquiera, y los vectores \vec{a} , \vec{b} y \vec{c} . .	280
12.15	Plano cristalino en un cristal cúbico.	281
12.16	Algunos planos cristalinos y sus índices de Miller en estructuras cúbicas.	282
12.17	Dispersión de una onda electromagnética por un átomo cuya distribución electrónica se supone uniforme y constante.	282
12.18	Familia de planos cristalinos en un cristal cúbico simple. En el detalle la celda unitaria.	283
12.19	Dispersión de rayos X por una capa de átomos en una cierta familia de planos en un cristal.	283

12.20 Esquema de un espectrómetro de rayos X.	284
12.21 Espectro característico de rayos X.	285
12.22 Conjunto de planos cristalinos diferentes que intervienen en la difracción de Bragg.	285
12.23 Patrón de difracción del oro (Departamento de Física Universidad Nacional de Colombia).	286
12.24 Patrón de difracción de rayos X de YSr_2SbO_6 , indicando algunos planos reflectores. Grupo de Física de Nuevos Materiales, Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia.	286
12.25 Difracción de una muestra cristalina.	287
12.26 Diversos tipos de defectos puntuales.	288
12.27 Dislocaciones.	289
12.28 Estructura cúbica centrada en las caras del $NaCl$	290
12.29 Curva de energía potencial para un sistema cristalino estable	291
12.30 Enlace covalente.	292
12.31 Estructura cristalina del diamante.	293
12.32 Movimiento de una partícula en un gas sin excitación externa.	295
12.33 Al aplicar un campo eléctrico, los electrones aunque se dispersen logran un desplazamiento neto.	296
12.34 Potencial cristalino periódico unidimensional en el modelo de Kronig-Penney.	301
12.35 Aspecto general de la función $F(E)$. Se muestran los límites +1 y -1 impuestos por la ecuación (12.26) y los valores de E con sentido físico.	303
12.36 Bandas de energía en el modelo de Kronig-Penney cuando $V_0 = 8\text{ eV}$, $b = 0.05 a_0$ y $c = a_0$ (a_0 es el radio de Bohr).	303
12.37 Bandas de energía electrónicas.	304
12.38 (a) Banda de energía continua para una partícula libre; (b) dependencia de la energía con la cantidad de movimiento en el modelo de Kronig-Penney y las bandas permitidas y prohibidas así como su ancho energético.	305
12.39 Posibles configuraciones en las bandas de energía electrónicas. BC= banda de conducción; BV= banda de valencia.	306
12.40 Brecha de energía prohibida.	306
12.41 Brecha de energía para materiales semiconductores.	307
12.42 Mecanismo para la fotoconductividad en materiales semiconductores.	308

12.43	Banda de conducción semillena para materiales conductores.	308
12.44	Recubrimiento de las bandas de valencia y de conducción.	309
12.45	Todos los átomos del plano sombreado de la derecha tienen la misma coordenada y , y su desplazamiento respecto al punto de equilibrio está dado por U_n . Todo el plano sombreado de la izquierda tiene una elongación U_{n-2}	310
12.46	Cadena monoatómica lineal. Las masas sombreadas representan las posiciones de equilibrio. La constante de red es a , y la constante de acoplamiento es β	311
12.47	Frecuencias permitidas en la red cristalina en función de k	312
12.48	Vibraciones en un cristal cúbico centrado en el cuerpo. Los planos con átomos ■ tienen menor densidad que los planos con átomos ○.	313
12.49	Modelo mecánico para una cadena biatómica con constante de red a y constante de acoplamiento β	313
12.50	Oscilaciones acústicas y ópticas en un sólido cúbico centrado en el cuerpo.	314
A.1	Expansión de una esfera de luz vista por dos observadores inerciales 0 y $0'$	318

Índice de Tablas

2.1	Principales fuentes de radiación electromagnética	45
4.1	Series espectrales del átomo de hidrógeno.	90
7.1	Algunos operadores mecanocuánticos.	153
8.1	Polinomios de Hermite y funciones de onda para el oscilador armónico con $n = 0, 1, 2$ y 3	182
9.1	Polinomios de Legendre, Laguerre y sus fórmulas de recurrencia.	195
9.2	Números cuánticos y sus posibles valores.	197
10.1	Estados de momento angular orbital del electrón	222
10.2	Estados de momento angular orbital.	223
11.1	Ejemplo de algunos núcleos.	230
11.2	Distribución de los isótopos estables de acuerdo con la paridad de Z , N y A	237
11.3	Masas isotópicas calculadas mediante la ecuación (11.13) y sus correspondientes masas medidas.	242
11.4	Períodos de semidesintegración de las series radiactiva y sus productos finales	248
11.5	Elementos radiactivos presentes en la naturaleza. Se transforman en un elemento estable.	250
12.1	Sistemas y estructuras cristalinas.	278
12.2	Algunas propiedades de los metales.	299
F.1	Tabla periódica de los elementos.	344
F.1	Tabla periódica de los elementos (continuación).	345
F.2	Estructura electrónica de los elementos.	346
G.1	Algunas constantes físicas.	347

Prólogo a la tercera edición

La necesidad de contar con un texto guía para algunas de las materias que dicta el Departamento de Física de la Universidad Nacional de Colombia para las facultades de Ciencias e Ingeniería, ha justificado la tercera edición del texto “Introducción a la física moderna”, cuya primera entrega data ya de más de quince años.

Otro aspecto, no menos importante, es la adopción de herramientas y formatos que permita el acceso no sólo al ejemplar en papel sino a los modernos formatos en hipertexto para la consulta remota de los estudiantes.

Con lo anterior en mente se resolvió realizar la revisión total del texto y la dispendiosa labor de trascribirlo empleando el poderoso procesador de texto científico `LATEX`.

En consecuencia, la totalidad de las gráficas se rehicieron y varias partes del texto se modificaron buscando mayor claridad para la presentación de los conceptos de la física moderna. Se mantuvo la distribución por capítulos de las anteriores ediciones y en algunos apartes se aprovechó la oportunidad para poner a tono con desarrollos recientes algunas de las instancias en las cuales los elementos que se introducen con la “física moderna”, pueden llegar a convertirse en asuntos de la vida cotidiana con los desarrollos de alta tecnología.

Es necesario, en este punto, agradecer la colaboración recibida para la concreción de éste texto. En primer lugar, al Departamento de Física y a la Facultad de Ciencias de la Sede de Bogotá de la Universidad Nacional de Colombia por el respaldo incondicional que proporcionan a éste tipo de actividades. UNIBIBLOS, la unidad de publicaciones de nuestra Universidad, siempre estuvo pendiente del desarrollo del proyecto editorial. Omar Ortiz y Marta Lice lis Guerra con diligencia levantaron la versión en `LATEX`. A todos ellos muchas gracias.

A pesar de las lecturas cuidadosas que se hicieron en el proceso editorial algunos errores pueden haber quedado en la versión final. Desde luego, la responsabilidad al respecto, es nuestra.

Los Autores

Bogotá, febrero de 2003

Introducción

A finales del siglo XIX se tenía el convencimiento casi total de que el comportamiento de la naturaleza era plenamente entendido por el hombre. Sólo quedaban algunos cabos sueltos, pero se presumía que esto se podría superar al efectuar mediciones experimentales cuidadosas que proporcionaran resultados más precisos.

Esa convicción no era de manera alguna gratuita. Existían teorías físicas tan claramente formuladas que era posible no solamente reproducir casi la totalidad de los fenómenos de la materia y la radiación, sino también el uso de aplicaciones tecnológicas realmente impresionantes. En efecto, el auge de la revolución industrial se logró debido a la utilización de la máquina de vapor, lo cual se consiguió gracias al entendimiento de teorías como la termodinámica y la mecánica. La electricidad ya se empleaba en el alumbrado público a finales del siglo XIX así como pequeños generadores electromagnéticos.

La ciencia estaba tan orgullosa de su adelanto, que por ejemplo, fue posible la predicción de la existencia del planeta Neptuno solamente por el estudio de ciertas anomalías en el movimiento orbital del planeta Urano. Poco tiempo después fue posible su observación directa.

La mecánica celeste fue la disciplina científica que permitió tal éxito, merced al entendimiento cabal de la cinemática y de la dinámica cuyas leyes fundamentales fueron formuladas por Newton dos siglos antes.

No es de extrañar, por tanto, la reacción y la sorpresa cuando a partir de la última década del siglo XIX se principiaron a observar hechos inexplicables por las teorías existentes. Fue necesario sugerir ideas tan novedosas que los conceptos de espacio, tiempo, energía y trayectoria, entre otros, se modificaron drásticamente y sólo hasta los años 20 del siglo XX se logró consolidar un cuerpo teórico estable para explicar tales hechos.

Como se verá, 1900 fue el año que marcó un hito en la historia de la ciencia. La física de antes de ese año se ha denominado “física clásica”. En contraposición, a las teorías que pretenden explicar el comportamiento de la naturaleza a partir de ese momento se las ha llamado “física moderna”. Esta última parte es el tema de lo que estudiaremos en el presente libro.

Capítulo 1

Teoría de la relatividad especial

El nacimiento de la teoría de la relatividad especial tuvo su origen en los experimentos realizados para determinar la naturaleza de la luz.

Al principio se pensó que esta teoría podía ser una parte de la Teoría Electromagnética y fue Einstein quien se dio cuenta de que en realidad su teoría era mucho más general: agrupa el comportamiento de todos los fenómenos naturales. La razón por la cual históricamente existe una asociación entre la relatividad y las propiedades de la luz es que los efectos relativistas sólo se pueden observar cuando los objetos se mueven a grandes velocidades y en el siglo XIX lo único conocido que se movía con suficiente rapidez y además tenía propiedades que podían ser examinadas, era la luz.

Al principio de este siglo, los fenómenos relativistas eran desconocidos y fue solamente a través del comportamiento de la luz como se obtuvieron los primeros indicios de que algo no era correcto acerca de las nociones de espacio y tiempo.

Hoy en día los efectos relativistas son observables con electrones, protones y otras partículas que pueden alcanzar grandes velocidades en los aceleradores de partículas.

En esta parte veremos cómo al cambiar el concepto de espacio y de tiempo, hubo necesidad de cambiar también otros conceptos físicos, ya que estas dos variables intervienen en la medición de cualquier propiedad física de un evento.¹

¹Por evento se debe entender un acontecimiento que para su especificación es necesario establecer *dónde* y *cuando* ocurre.

1.1 Relatividad

1.1.1 Marcos de referencia inerciales y mecánica clásica

Primero que todo, recordemos que cuando hablamos de movimiento queremos decir movimiento con respecto a algo. Este algo, llamado marco de referencia puede ser un árbol, un camino, el sol, un sistema de ejes, etc., pero en cada caso es necesario especificarlo.

La primera ley de Newton para el movimiento establece que todo cuerpo conserva su estado de movimiento uniforme rectilíneo o de reposo siempre que sobre él no actúen fuerzas. Esta ley se conoce como *ley de inercia*. Para verificarla es necesario escoger un marco de referencia con respecto al cual se van a realizar las medidas correspondientes y tener los instrumentos adecuados para efectuarlas, como un reloj y una regla. Una vez eliminadas todas las fuerzas que puedan actuar sobre el cuerpo, podremos comprobar que se mueve en línea recta recorriendo distancias iguales en intervalos de tiempo iguales.

Pero si no se escoge el marco de referencia adecuado, es muy posible que no se verifique la ley de inercia. Por ejemplo, si escogemos un marco de referencia fijo a un observador que se está meciendo en un columpio, éste verá que el objeto no se mueve con velocidad constante como se esperaba y, por lo tanto, para él no se cumple la ley de inercia. Entonces, podríamos decir que para ciertos observadores la primera ley de Newton no es válida.

Newton aseguraba que existían ciertos marcos de referencia en los cuales se cumple la ley de inercia y un marco de referencia con esta propiedad se llamó marco de o *sistema inercial de referencia*.

La segunda ley de Newton establece que la aceleración de un objeto y la fuerza neta que actúa sobre él están relacionados por medio de su masa, siendo la expresión: $\vec{F} = m \vec{a}$.² Nuevamente, esta ley no es válida para cualquier observador. El observador del columpio verá que el movimiento del objeto es acelerado (o desacelerado) sin que exista una fuerza responsable para ello; en cambio, para un observador en un sistema de referencia inercial la ley siempre se cumple.

Entonces, de acuerdo con Newton, hay un número infinito de marcos de referencia inerciales a partir de los cuales se puede estudiar el mundo mecánico con la ayuda de sus dos leyes. Es decir, *todos los marcos de referencia inerciales que se muevan con velocidad constante los unos respecto a los otros*.

El paso siguiente es encontrar una manera de relacionar los resul-

²En caso en que la masa sea constante. Recuérdese que la segunda ley se define por medio de la expresión $\vec{F}_{ext} = \frac{d}{dt} \vec{p}$, con \vec{p} la cantidad de movimiento lineal de la partícula.

tados de mediciones obtenidos, para el mismo fenómeno físico, por dos observadores inerciales, que se muevan con velocidad constante relativa.

Un evento físico es algo que ocurre en un punto del espacio y en un instante determinado. Se describe mediante sus coordenadas con respecto a un sistema de ejes, en este caso el marco de referencia, que fija su posición en el espacio y el tiempo en que tuvo lugar. La posición dependerá del marco de referencia del observador como veremos a continuación.

Sean dos sistemas de ejes de coordenadas rectangulares S y S' , S' en movimiento con respecto a S , con velocidad constante u en dirección x (fig. 1.1).

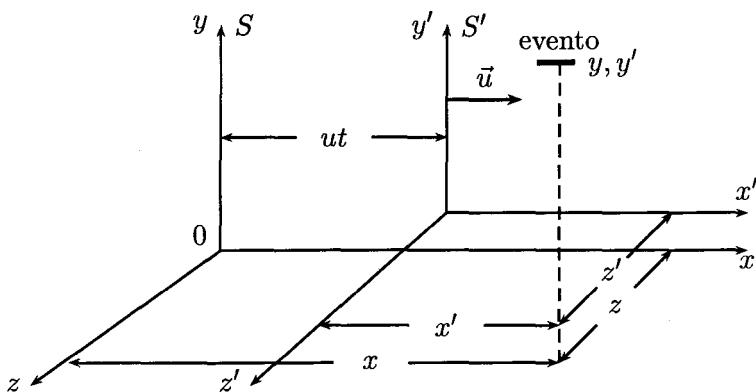


FIGURA 1.1. Dos marcos de referencia inerciales S y S' . S' se mueve hacia la derecha en dirección x , con velocidad relativa constante u .

En el instante $t = t' = 0$ los orígenes coinciden. Después de un intervalo de tiempo $t = t'$, ocurre un evento físico que en el sistema S estará descrito por las coordenadas x, y, z, t y en el sistema S' por las coordenadas x', y', z', t' . De acuerdo con la figura 1.1, la relación entre las coordenadas de posición y tiempo, para velocidades pequeñas, es:

$$\begin{aligned} x' &= x - ut \\ y' &= y \\ z' &= z \\ t' &= t \end{aligned} \tag{1.1}$$

La expresión $t = t'$ recoge la concepción absoluta del tiempo que introdujo Newton en su formulación de la mecánica. Además, no existe, por ahora, ningún argumento para suponer que el flujo temporal varie a causa de los movimientos relativos.

Estas ecuaciones se conocen con el nombre de *transformaciones de Galileo*. Nótese que sólo cambia la coordenada en la dirección del movimiento relativo de los sistemas de referencia.

De acuerdo con estas transformaciones, el espacio y el tiempo son nociones completamente distintas que nunca se confunden y no influyen sobre el comportamiento de los objetos materiales.

Para Newton y la dinámica newtoniana, el espacio y el tiempo son absolutos; es decir, su propiedades no dependen de ninguna manera del observador o de su estado de movimiento. Estos criterios son intuitivamente ciertos ya que no hay razón alguna para creer que el mecanismo de un reloj o la longitud de una regla se pueden afectar por observaciones hechas desde dos marcos de referencia inertiales en movimiento relativo constante uno respecto al otro.

Las transformaciones de Galileo nos permiten, además, hallar *la velocidad de un objeto en movimiento* dentro de un marco de referencia inercial, en función de su velocidad vista desde otro marco de referencia, también inercial. Las componentes de la velocidad están dadas por las relaciones:³

$$\begin{aligned} v_x &= \frac{dx}{dt} \\ v_y &= \frac{dy}{dt} \\ v_z &= \frac{dz}{dt} \end{aligned} \tag{1.2}$$

y las componentes de la velocidad en el sistema primado serán:

$$\begin{aligned} v'_x &= \frac{dx'}{dt'} = \frac{d}{dt'}(x - ut) \\ &= \frac{d}{dt}(x - ut) = v_x - u \\ v'_y &= \frac{dy'}{dt'} = \frac{dy}{dt} = v_y \\ v'_z &= \frac{dz'}{dt'} = \frac{dz}{dt} = v_z \end{aligned} \tag{1.3}$$

Estas son las ecuaciones de transformación para la velocidad. El resultado para la componente x de la velocidad se conoce como la *regla clásica de adición de velocidades*.

Al derivar respecto al tiempo las ecuaciones (1.3) obtendremos las

³Veáse la figura 1.1

ecuaciones de transformación para la aceleración:

$$\begin{aligned} a'_x &= a_x \\ a'_y &= a_y \\ a'_z &= a_z \end{aligned} \tag{1.4}$$

lo cual nos dice que la aceleración de un objeto es la misma en cualquier marco de referencia inercial y como la masa del objeto es constante, el producto $m\vec{a}$ también lo será. Por lo tanto, si $\vec{F} = m\vec{a}$ es una ley fundamental de la naturaleza que puede ser usada por cualquier observador inercial, toda fuerza que cumpla la relación anterior será la misma en cualquier marco de referencia inercial. Entonces, la segunda ley de Newton es invariante bajo transformaciones de Galileo, lo cual significa que la dependencia funcional de las ecuaciones que describen un fenómeno físico serán las mismas para todos los observadores iniciales que hayan utilizado dichas transformaciones para comparar sus observaciones. Esto es, si se necesitan espacios, tiempos, velocidades, etc., para describir un fenómeno físico, las mediciones de un observador inercial estarán en completo acuerdo con las de otro cuando use las transformaciones adecuadas; en este caso las de Galileo.

Además, las leyes de conservación de energía mecánica, cantidad de movimiento y momento angular son consecuencia de las leyes de Newton. Entonces, podemos decir que las leyes de la mecánica clásica y, en general, de toda la física son las mismas en cualquier marco de referencia inercial. Esto se conoce con el nombre de *principio clásico de relatividad*.

Como bien se sabe, las leyes de Newton, las transformaciones de Galileo y en general toda la mecánica clásica proporcionan una excelente descripción del movimiento de los objetos. Científicos e ingenieros las han utilizado durante siglos en un sin número de situaciones. Pero a finales del siglo XIX, cuando los estudios de la luz y del electromagnetismo se desarrollaron, se comenzó a notar hechos contradictorios que implicaban que algo no estaba correctamente establecido en los conceptos físicos del momento, como veremos a continuación.

1.1.2 Luz, éter y electromagnetismo

Durante el siglo XIX, muchos físicos creían, para entender las ondas de luz, que el universo estaba lleno de una substancia llamada *éter*. Las razones fundamentales para creer en su existencia fueron las siguientes:

- Siendo la luz una onda, necesitaría de un medio en el cual se propagara, como lo necesitan las ondas de sonido y de agua.

- b) El éter en reposo definía el marco de referencia con respecto al cual la velocidad de la luz es aproximadamente $3 \times 10^8 \text{ m/s}$ (c).

La segunda razón significa que si un observador se encuentra en movimiento con respecto al éter, medirá una velocidad de la luz mayor o menor que c según la dirección de su movimiento (ver ecuación (1.3)), como ocurre con las demás ondas. Como las razones anteriores eran tan obvias nadie se preocupó por tratar de medir alguna propiedad física de este éter.

Por otro lado, en la segunda mitad del siglo XIX Maxwell había desarrollado completamente su teoría electromagnética en la que lograba unificar en una sola teoría, la electrodinámica, las teorías eléctricas y magnéticas que se habían venido estableciendo en los dos siglos anteriores. La electrodinámica queda fundamentada en un conjunto de ecuaciones llamadas ecuaciones de Maxwell, las cuales en una región del espacio libre de cargas eléctricas y de corrientes eléctricas se expresan en su forma diferencial, de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= 0 \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial}{\partial t} \vec{B} \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0 \\ \nabla \times \vec{B} &= \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} \end{aligned} \tag{1.5}$$

donde:

\vec{E} = Campo eléctrico

\vec{B} = Campo magnético

ϵ_0 = Constante de permitividad del vacío

μ_0 = Constante de permeabilidad del vacío

A partir de estas ecuaciones se obtiene la ecuación de propagación de la onda electromagnética en el vacío:

$$\nabla^2 \vec{E} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E} \tag{1.6}$$

donde la constante es precisamente igual al inverso del cuadrado de la velocidad de la luz:

$$\mu_0 \epsilon_0 = \frac{1}{c^2} \tag{1.7}$$

Si la ecuación (1.6) es correcta, significa una de dos cosas:

- a) que la velocidad de la luz es igual para cualquier observador.
- b) que la ecuación de onda sólo es válida en un marco de referencia especial y, por lo tanto, no es invariante bajo transformaciones de Galileo.

Esto se puede verificar notando que al pasar de un marco a otro con velocidad relativa u , cuando se realiza la operación con el laplaciano ∇^2 aparece un término adicional proporcional a u .⁴

La situación a que se enfrenta la física al final del siglo pasado es la siguiente: las leyes de la mecánica son invariantes bajo transformaciones de Galileo pero las ecuaciones de Maxwell no lo son. Entonces, hay tres posibles explicaciones para esta situación:

- a) El principio de relatividad (clásico) es válido para la mecánica, pero no lo es para la teoría electromagnética;
- b) las ecuaciones de Maxwell no son correctas;
- c) existe un sólo principio de relatividad para la mecánica y el electromagnetismo. (En este caso, las leyes de Newton no serían correctas).

La única forma de decidir cuál de las tres posibilidades es la correcta, es realizar los experimentos necesarios. Se trató, en primer lugar, de medir alguna propiedad física del éter.

Un efecto conocido como aberración de la luz, fue importante en la investigación que se llevaría a cabo sobre el éter. En este efecto, interpretado de acuerdo con la teoría ondulatoria de la luz, el éter era estacionario y al moverse la tierra a través de él debe crear un viento de éter de la misma manera que lo hace un carro que se desplaza sobre una carretera en un día sin viento.

En 1887 los físicos Michelson y Morley realizaron un experimento cuyo objetivo era tratar de detectar el viento de éter. Observando efectos de interferencia de luz esperaban poder medir la velocidad de este viento, o lo que es igual, la velocidad de la tierra respecto al éter. Antes de hablar del experimento veamos un ejemplo similar que ayudará a entender el problema.

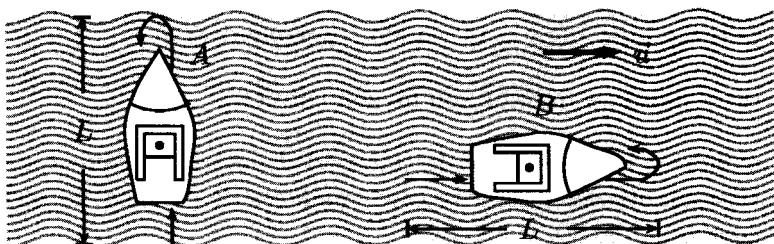
Dos barcos, A y B , van a recorrer la misma distancia con igual velocidad v en un río cuya corriente tiene una velocidad \vec{u} con respecto a la orilla. Uno lo hará perpendicularmente a la corriente y el otro lo

⁴Esto se ve más fácil al escribir (1.6) en una dimensión. En efecto, $\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}$ y recordando que $x' = x - ut$, la transformación (1.1).

hará paralelamente a ella. La distancia que van a recorrer es dos veces el ancho del río (fig. 1.2) y queremos determinar el tiempo que gastarán cada uno para hacer su recorrido completo.



a. Vista lateral.



b. Vista superior.

FIGURA 1.2. Dos barcos van a recorrer la misma distancia en un río cuya corriente tiene una velocidad u con respecto a la orilla.

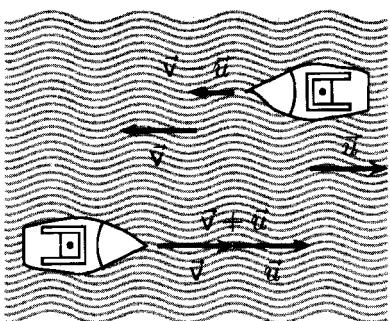
El tiempo gastado en el recorrido completo será en ambos casos:

$$t_{\text{total}} = t_{\text{id}} + t_{\text{reg}} = \frac{L}{v_{\text{id}}} + \frac{L}{v_{\text{reg}}}$$

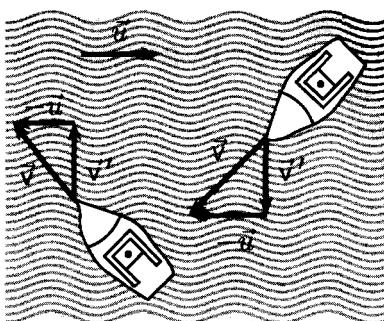
donde v_{id} y v_{reg} son las velocidades del barco con respecto a la orilla. En la figura 1.3 se encuentran los esquemas del movimiento en ambos casos.

Comencemos con el barco B . Primero irá en el sentido de la corriente y luego lo hará en sentido contrario (figura 1.3a.) y dado que el movimiento del barco B es paralelo a la dirección de la corriente, llamaremos este tiempo $t_{\parallel} = t_{\text{||}}$. Teniendo en cuenta que las velocidades de ida y regreso son diferentes debido a la corriente, el tiempo t_{\parallel} necesario para efectuar el recorrido será:

$$t_{\parallel} = \frac{L}{v+u} + \frac{L}{v-u} = \frac{2L/v}{1-(u/v)^2} \quad (1.8)$$



a. Barco B.



b. Barco A.

FIGURA 1.3. Ilustración para el movimiento de los dos barcos.

Ahora veamos qué pasa con el barco *A*. Tanto a la ida como al regreso debe vencer el efecto de la corriente que trata de arrastrarlo río abajo y para que atraviese perpendicularmente el río deberá orientarse en dirección río arriba (figura 1.3b.). Entonces, atravesará el río con una velocidad efectiva, tanto a la ida como al regreso, igual a:⁵

$$v' = \sqrt{v^2 - u^2} = v\sqrt{1 - (u/v)^2}$$

El tiempo gastado en el recorrido perpendicular al río, t_{\perp} , será:

$$t_{\perp} = t_{\text{idá}} + t_{\text{regreso}} = \frac{2L}{v'} = \frac{2L/v}{\sqrt{1 - (u/v)^2}} \quad (1.9)$$

Los resultados anteriores muestran que los barcos necesitan tiempos diferentes para recorrer la misma distancia con la misma velocidad pero en condiciones diferentes (¿Cuál es mayor?).

Si cambiamos los barcos por rayos de luz, el río por el éter, la velocidad de la corriente del río por la velocidad de la tierra que es también la del viento de éter⁶ y la velocidad de los barcos por la velocidad de la luz tenemos el experimento realizado por Michelson y Morley.

Para llevarlo a cabo utilizaron un interferómetro, cuyo esquema se muestra en la figura 1.4, y el procedimiento fue el siguiente. Se hace incidir un rayo de luz sobre un espejo semitransparente (*A*) que lo divide en dos rayos perpendiculares entre sí que a su vez inciden cada uno sobre un espejo (*B* y *C*) donde son reflejados hacia el espejo semitransparente. Allí son nuevamente divididos y una parte llega al telescopio

⁵De esta manera se garantiza que el barco *A* regrese al mismo punto de salida.

⁶O, si se prefiere, la velocidad de la Tierra respecto al éter.

de observación. Uno de los rayos viaja paralelamente al viento de éter; el otro lo hace perpendicularmente.

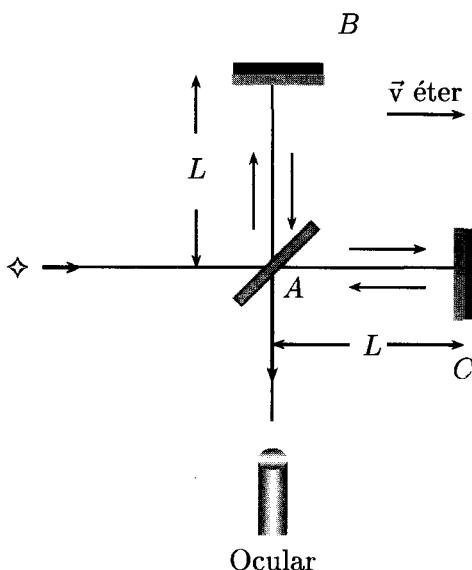


FIGURA 1.4. Esquema del interferómetro utilizado por Michelson y Morley.

Como vimos en el ejemplo de los barcos, los tiempos gastados por cada uno en recorrer la misma distancia no son los mismos y, por consiguiente, los rayos de luz llegarán desfasados al telescopio donde se observará un patrón de interferencia.

En la práctica la luz diverge al viajar entre los espejos, de manera que recorre simultáneamente muchos caminos que difieren un poco en longitud; por esto en el telescopio se ven franjas claras y oscuras en forma alternada, en lugar de una mancha clara u oscura según se tenga interferencia constructiva o destructiva respectivamente.

Como la velocidad de la luz es mucho mayor que la velocidad del viento de éter, el instrumento debe ser muy sensible para poder captar los efectos debidos a la pequeña diferencia de tiempos entre los recorridos. Además, con una sola medida no es posible determinar si los efectos observados se deben al viento de éter, a que los espejos no son perfectamente perpendiculares entre sí o a que la distancia entre ellos no es exactamente la misma. Para obviar lo anterior se hace girar 90° el interferómetro, intercambiando la posición de los brazos con respecto a la dirección del viento de éter. Al efectuar el giro se observará un corrimiento en la posición de la franjas de interferencia con respecto a su posición inicial.

Los cálculos teóricos indican que se debe observar un **corrimiento** de $\frac{1}{25}$ de franja, lo cual era posible con el instrumento utilizado ya que permitía ver un corrimiento de hasta $\frac{1}{100}$ de franja. Para evitar efectos debido a vibraciones, el interferómetro se encontraba sobre una losa de mármol que flotaba en un recipiente con mercurio.

Tomando todas las precauciones posibles, Michelson y Morley realizaron su experimento en julio de 1887, y los resultados fueron negativos. No pudieron observar un corrimiento en la posición de las franjas de interferencia. Pensando que no era el momento del año adecuado lo repitieron seis meses después y a diferentes alturas sobre la tierra. Sin embargo, el resultado siempre fue el mismo: no había corrimiento en la posición de las franjas de interferencia y por lo tanto no se pudo medir la velocidad del viento de éter. Ni siquiera detectarlo. Lo mismo ocurrió con otros experimentos ideados con el mismo fin.

Una explicación posible al resultado negativo del experimento fue que la velocidad de la luz es la misma en cualquier dirección, independiente del estado de movimiento del observador, pero esto no era admisible para los físicos de la época. Surgieron muchas otras explicaciones, todas imposibles de comprobar experimentalmente, por lo que fueron descartadas.

Una de ellas tendría sentido 18 años más tarde. Los físicos Lorentz y Fitzgerald sugirieron que los objetos en movimiento a través del éter se contraían en la dirección de su movimiento, en un factor tal que en el caso del interferómetro la distancia entre los espejos *A* y *C* se reducía en la cantidad necesaria para eliminar la diferencia de tiempos en los recorridos y, por lo tanto, el corrimiento de las franjas de interferencia. Como no se podía demostrar experimentalmente, tampoco fue aceptada esta explicación.

En vista de que no se pudo medir alguna propiedad física del éter surgió la posibilidad de que no existiera. De ser así desaparecía el marco de referencia con respecto al cual el valor de la luz es *c*.

Por otra parte, la teoría electromagnética no resultaba invariante bajo transformaciones de Galileo y además indicaba que en el vacío, la velocidad de la luz también es *c*.

Entonces los físicos de la época trataron de modificar las teorías existentes para solucionar el problema de la incompatibilidad entre la teoría electromagnética y el principio clásico de relatividad; pero, lo único que lograron fue complicar todavía más el problema.

Finalmente en 1905, Albert Einstein enuncia una nueva teoría que soluciona el problema de la existencia o no existencia del éter y la no invariancia de las ecuaciones de Maxwell.

1.2 Postulados de la teoría de la relatividad especial

En 1905 A. Einstein enuncia su teoría de la relatividad especial en la cual regresa a la antigua idea que el espacio es vacío (no existe el éter) y formula dos postulados:

1. Las leyes de la física son las mismas en cualquier marco de referencia inercial (*Principio de Relatividad*).
2. La velocidad de la luz en el vacío tiene el mismo valor c en cualquier marco de referencia inercial (*Principio de la constancia de la velocidad de la luz*)

Los postulados de Einstein son mucho más generales que el principio de relatividad clásico porque abarcan toda la física. Veamos su significado.

El primer postulado, lo mismo que el postulado clásico, implica que el movimiento en línea recta y a velocidad constante sólo es observable si se compara con algo; en otras palabras, no existe un marco de referencia absoluto con respecto al cual se pueden comparar todos los movimientos. Entonces, cualquier sistema de referencia inercial es bueno para describir cualquier fenómeno físico. Incluso, los fenómenos electromagnéticos.

El segundo postulado contradice las transformaciones de Galileo y confirma los resultados experimentales de Michelson y Morley: si la velocidad de la luz es constante, no hay diferencia de tiempo entre los dos recorridos de la luz y no puede haber corrimiento de las franjas de interferencia al girar el interferómetro. Además, también nos dice que la velocidad de la luz es independiente del movimiento de la fuente o del observador.

Estos postulados, que conducen a ciertos efectos de los cuales hablaremos a continuación, hacen que las transformaciones de Galileo no sean válidas en este caso, así como tampoco las leyes de Newton. Deberemos encontrar un nuevo conjunto de ecuaciones de transformación que dejen invariante la velocidad de la luz y también una nueva mecánica que resulte consistente con lo anterior.

1.3 Cinemática relativista

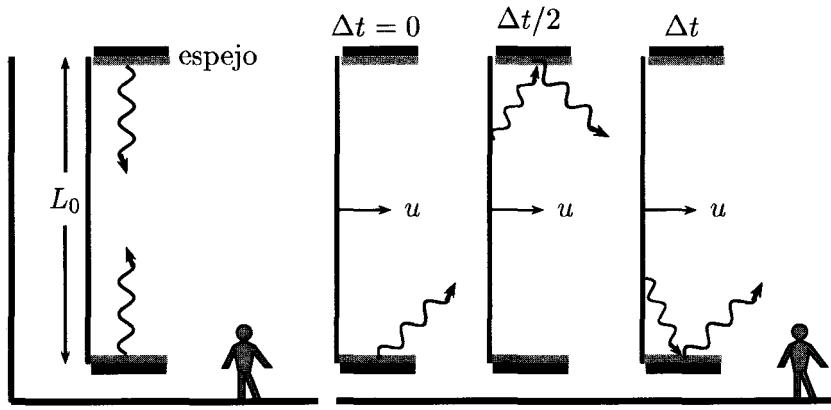
1.3.1 Dilatación del tiempo

El primer efecto debido a los postulados de la relatividad especial, concretamente al segundo, es la llamada *dilatación del tiempo*, lo que significa que un reloj en reposo con respecto a un observador inercial mide

intervalos de tiempo mayores que otro reloj en movimiento uniforme **con** respecto al mismo observador y para el mismo evento físico. En **otras** palabras, relojes en movimiento andan más despacio.

Para demostrarlo construimos un reloj especial: en cada extremo de una barra de longitud L_0 colocamos sendos espejos y hacemos que un haz de luz viaje entre ellos (figura 1.5a.). Cada vez que la luz haga un recorrido completo de ida y vuelta entre los espejos, el reloj emitirá una señal y el intervalo de tiempo entre dos señales consecutivas, que también es el tiempo necesario para que la luz efectúe su recorrido completo entre los espejos, está dado por la relación:

$$\Delta t_0 = \frac{2L_0}{c} \quad (1.10)$$



a. En reposo con respecto al observador.

b. En movimiento con respecto al observador en tres instantes.

FIGURA 1.5. Reloj de luz.

Ahora consideraremos el mismo reloj en movimiento uniforme con una velocidad relativa u con respecto a nosotros (figura 1.5b.). Nuevamente queremos determinar el intervalo de tiempo entre dos señales consecutivas, pero ahora para esta nueva condición. Supongamos que es igual a una cantidad Δt . De este tiempo la luz gastará la mitad para llegar al espejo superior y el resto para regresar al espejo inferior y emitir la señal. Pero mientras la luz viaja de un espejo a otro, el reloj (barra y espejos) se ha desplazado hacia la derecha y por consiguiente la luz deberá recorrer una mayor distancia que cuando el reloj se encontraba en reposo con respecto a nosotros (figura 1.6). Entonces, si durante el

intervalo de tiempo Δt el reloj se ha desplazado una distancia $u\Delta t$, por el teorema de Pitágoras se cumple que:

$$\left(\frac{1}{2}c\Delta t\right)^2 = L_0^2 + \left(\frac{1}{2}u\Delta t\right)^2$$

de donde:

$$\Delta t = \frac{2L_0/c}{\sqrt{1-u^2/c^2}} \quad (1.11)$$

Pero el numerador de la ecuación anterior es precisamente el intervalo de tiempo entre dos señales consecutivas cuando el reloj se encuentra en reposo con respecto a nosotros. Entonces:

$$\Delta t = \frac{\Delta t_0}{\sqrt{1-u^2/c^2}} \quad (1.12)$$

Como el denominador de la ecuación anterior es menor que la unidad,

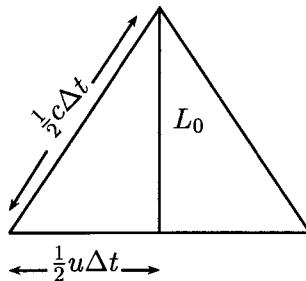


FIGURA 1.6. Recorrido de la luz cuando el reloj está en movimiento

Δt es mayor que Δt_0 . Por lo tanto, el reloj anda más despacio cuando está en movimiento con respecto a nosotros.

El intervalo de tiempo medido por un reloj que se encuentra en reposo con respecto al marco de referencia (en este caso el observador o nosotros), Δt_0 , se llama *tiempo propio*.

Es importante notar tres cosas respecto al resultado anterior:

1. Hemos utilizado el segundo postulado de la relatividad especial cuando consideramos que la velocidad de la luz es c estando el reloj en reposo o en movimiento con respecto al observador.
2. La velocidad relativa u del reloj con respecto al observador es del mismo orden de magnitud que la velocidad de la luz, pero nunca

igual a ella.⁷ Si u es mucho menor que c (caso clásico), no existe el efecto de la dilatación del tiempo, ya que u/c tiende a cero.

3. El tiempo no es absoluto.

1.3.2 Contracción de la longitud

Otro efecto debido a los postulados de la relatividad especial es la llamada *contracción de la longitud* o contracción de Lorentz-Fitzgerald lo que significa que las dimensiones de los objetos paralelas a la dirección del movimiento relativo se contraen.

Para demostrar la contracción de Lorentz-Fitzgerald vamos a usar el reloj de luz construido para observar la dilatación del tiempo, pero ahora se moverá paralelamente a la longitud de la barra. Nuevamente consideraremos tres posiciones diferentes a medida que se desplaza hacia la derecha (figura 1.7). Recuérdese que la barra tiene una longitud

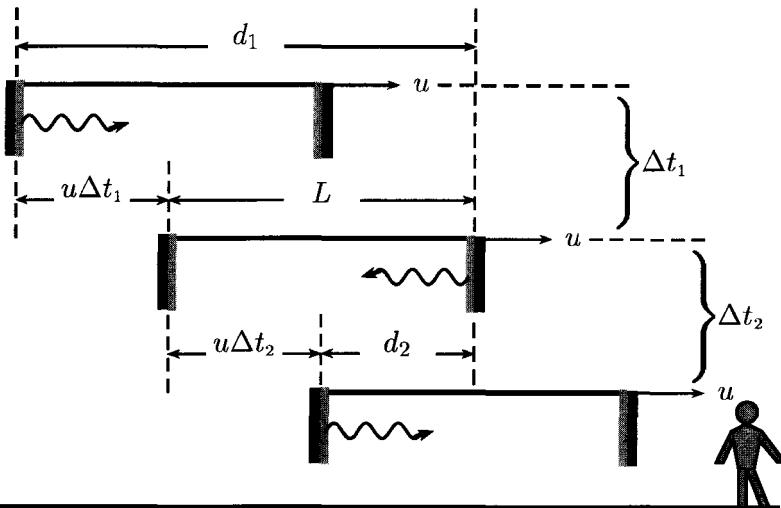


FIGURA 1.7. Un reloj de luz moviéndose paralelamente a su longitud, mostrado en tres instantes diferentes. La señal emitida por el reloj se produce cada vez que la luz llega al espejo de la izquierda.

L_0 cuando se encuentra en reposo con respecto a nosotros. Sean L su longitud observada cuando se encuentra en movimiento y Δt el intervalo de tiempo durante el cual se la observa. Llamando Δt_1 el intervalo de tiempo necesario para que la luz llegue al espejo de la derecha y Δt_2 el

⁷Este hecho se explicará más adelante

intervalo de tiempo necesario para que regrese al espejo de la izquierda, se tendrá que: $\Delta t = \Delta t_1 + \Delta t_2$.

De la figura 1.7 se tiene que las distancias recorridas por la luz en los intervalos de tiempo considerados se pueden expresar de la siguiente manera:

$$d_1 = c\Delta t_1 = u\Delta t_1 + L$$

y

$$d_2 = c\Delta t_2 = L - u\Delta t_2$$

De las ecuaciones anteriores se tiene que $d_1 + d_2$ y $d_1 - d_2$ son respectivamente iguales a:

$$c\Delta t = u(\Delta t_1 - \Delta t_2) + 2L$$

y

$$c(\Delta t_1 - \Delta t_2) = u\Delta t$$

y combinando estos resultados se obtiene:

$$c\Delta t = \frac{u^2}{c}\Delta t + 2L \quad (1.13)$$

Entonces, el intervalo de tiempo necesario para que la luz efectúe un recorrido completo es:

$$\Delta t = \frac{2L/c}{1 - u^2/c^2} \quad (1.14)$$

Pero, Δt es también el intervalo de tiempo observado entre dos señales consecutivas del reloj cuando está en movimiento (ecuación (1.12)). Reemplazando la expresión para Δt y haciendo las simplificaciones necesarias, el valor de la longitud observada de la barra del reloj es:

$$L = L_0 \sqrt{1 - u^2/c^2} \quad (1.15)$$

Como el factor que multiplica a L_0 es menor que la unidad, L es menor que L_0 . Así, la longitud de la barra se ha contraído al estar en movimiento con respecto a nosotros. Observen que la contracción tiene lugar sólo en la dirección del movimiento.

La longitud de un objeto en reposo con respecto a un observador, L_0 , se llama *longitud propia*.

En forma análoga a lo anotado para el caso de la medición de tiempos, para la medición de longitudes se tuvo en cuenta el segundo postulado de la relatividad especial; que la velocidad relativa u es del orden de magnitud de la velocidad de la luz pero no igual a ella y cuando es mucho menor no se percibe el fenómeno de la contracción; y que, finalmente, el espacio no es absoluto.

De lo expuesto en los numerales 1.3.1 y 1.3.2 vemos, como resultado de la teoría especial de la relatividad que:

La medición de longitudes o intervalos de tiempo de eventos físicos se encuentra afectada por el movimiento relativo de los observadores que realizan dichas medidas.

Ejemplo 1.1.

Entre las partículas de alta energía existe una llamada mesón μ . Estas partículas se crean en la alta atmósfera por acción de los rayos cósmicos que llegan a ella procedentes del espacio y alcanzan el nivel del mar en cantidades detectables. El mesón μ se desintegra en un electrón 2×10^{-6} segundos después de ser creada (tiempo de vida o vida media) y viaja a la velocidad de $0,998c$.

Si calculamos la distancia que puede recorrer durante su tiempo de vida, a la velocidad de $0,998c$, se obtiene:

$$L = 0.998 \times 3 \times 10^8 \frac{m}{s} \times 2 \times 10^{-6} s = 600 m$$

Lo cual no concuerda con lo observado en la realidad porque el mesón μ comienza a existir a una altura diez veces mayor.

La explicación a esta paradoja se encuentra en la dilatación del tiempo y en la contracción de la longitud. Veamos que ocurre.

En su propio marco de referencia inercial, la partícula vive 2×10^{-6} s; entonces para un observador en la tierra este tiempo es mayor puesto que, para él, el mesón μ se encuentra en movimiento.

Por lo tanto:

$$\Delta t_{tierra} = \frac{\Delta t_{mesón}}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} = 31.7 \times 10^{-6} s$$

Durante este intervalo de tiempo la partícula recorre una distancia de:

$$L = u\Delta t_{tierra} = 9500 m$$

En su propio marco de referencia el mesón μ , mientras vive 2×10^{-6} s, ve que la tierra se le acerca a una velocidad de $0,998c$; y durante este

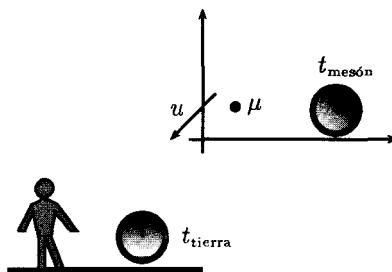


FIGURA 1.8. Mesón μ moviéndose con respecto a un observador en la tierra.
Visto desde el marco de referencia de la tierra.

tiempo recorre una distancia:

$$L' = u\Delta t_{mesón} = 600 \text{ m}$$

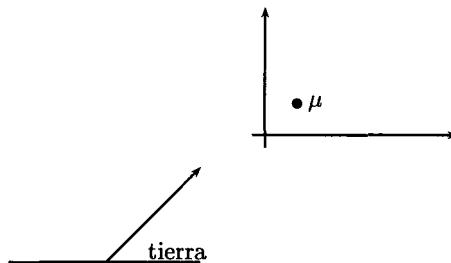


FIGURA 1.9. Misma situación anterior (mismo fenómeno físico) descrita ahora
desde el sistema de referencia del mesón.

Pero para el observador en la tierra esta distancia está contraída y por lo tanto él mide:

$$L = \frac{L'}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} = 9500 \text{ m}$$

Entonces, los dos puntos de vista conducen al mismo resultado y se entiende por qué se detecta el mesón μ al nivel del mar. □

1.3.3 Relatividad de la simultaneidad de eventos

Otra consecuencia de los postulados de la relatividad especial es el que dos eventos que son simultáneos en un marco de referencia inercial pueden no serlo en otro y viceversa.

Consideremos el siguiente ejemplo:

Ejemplo 1.2.

Nos encontramos en una nave espacial y en un momento dado dos naves idénticas a la nuestra se cruzan frente a nosotros (figura 1.10). Las dos naves se mueven a la misma velocidad relativa uniforme (respecto a nosotros) y en el instante del cruce encendemos una señal luminosa en los extremos de las naves.

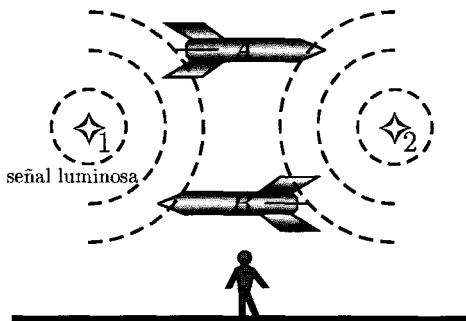


FIGURA 1.10. En el instante en que las naves se cruzan, para el observador, se encienden simultáneamente dos luces

Para nosotros las luces se encienden simultáneamente; ¿pero los observadores en las naves también lo verán así?

Supongamos que cada observador se encuentra en el centro de su nave y veamos qué pasa según el punto de vista de cada uno.

Para el observador A, mientras la luz de las señales se propaga hacia él, su nave se está desplazando hacia el punto 2. Por consiguiente, primero verá la señal luminosa del punto 2 y luego la del punto 1. Para el observador B ocurre algo similar: su nave se desplaza hacia la el punto 1 por lo cual verá primero esta señal luminosa y luego la del punto 2 (figura 1.11).

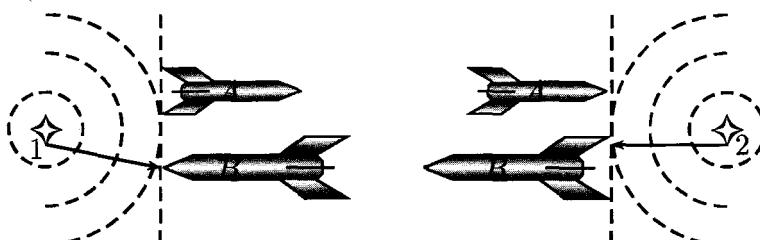


FIGURA 1.11. Para el observador B no hay simultaneidad. La simultaneidad resulta relativa al marco de referencia.

Entonces, para los observadores A y B no hay simultaneidad de eventos, aunque para nosotros sí la haya. ¿Cuál es la respuesta correcta? Las tres lo son, de acuerdo con cada observador. La simultaneidad de eventos también es relativa al marco de referencia inercial escogido. \square

1.4 Transformaciones de Lorentz

Después de haber observado las consecuencias que los postulados de la teoría de la relatividad especial tienen sobre medidas de tiempo y de longitudes, es claro que las transformaciones de Galileo ya no son adecuadas y necesitamos nuevas ecuaciones de transformación que mantengan la velocidad de la luz constante.

Lo anterior implica, ni más ni menos, que tendremos que modificar también las expresiones de las leyes físicas que no sean invariantes bajo ellas.

Un hecho que no se puede olvidar es que las transformaciones de Galileo y las leyes de Newton son válidas cuando los objetos gobernados por estas leyes se mueven a velocidades pequeñas comparadas con la velocidad de la luz. Sólo fallan cuando la velocidad de los objetos es muy grande o comparable con la velocidad de la luz.

Entonces, basta multiplicar las transformaciones de Galileo por algún factor para obtener unas nuevas transformaciones adecuadas al problema e imponerle al factor la condición que para velocidades pequeñas comparadas con la velocidad de la luz, sea igual a la unidad. Esto hace que las nuevas ecuaciones de transformación sean generales y se puedan aplicar en cualquier caso.

Las transformaciones, que por razones históricas se denominaron transformaciones de Lorentz (recuerden una de las posibles explicaciones a los resultados negativos en el experimento de Michelson y Morley), tienen la siguiente forma para la misma situación descrita en el caso de las ecuaciones de Galileo⁸ (figura 1.1):

$$x' = \frac{x - ut}{\sqrt{1 - u^2/c^2}}; y' = y; z' = z; t' = \frac{t - xu/c^2}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (1.16)$$

Las variables no primadas en función de las primadas se denominan transformaciones inversas de Lorentz. Para obtenerlas basta cambiar las coordenadas primadas por no primadas, las coordenadas no primadas

⁸En el apéndice A se encuentra su derivación

por primadas y u por $-u$:

$$x = \frac{x' + ut'}{\sqrt{1 - u^2/c^2}}; y = y'; z = z'; t = \frac{t' + x'u/c^2}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (1.17)$$

Estas transformaciones nos muestran que el espacio y el tiempo no son independientes como lo consideraban Newton y Galileo. Nuevamente, sólo cambia la coordenada en la dirección del movimiento.

Al derivar con respecto al tiempo las ecuaciones 1.16, se obtienen las ecuaciones de transformación para las componentes de la velocidad:

$$v_{x'} = \frac{v_x - u}{1 - v_x u/c^2} \quad (1.18)$$

$$v_{y'} = \frac{v_y \sqrt{1 - u^2/c^2}}{1 - v_x u/c^2} \quad (1.19)$$

$$v_{z'} = \frac{v_z \sqrt{1 - u^2/c^2}}{1 - v_x u/c^2} \quad (1.20)$$

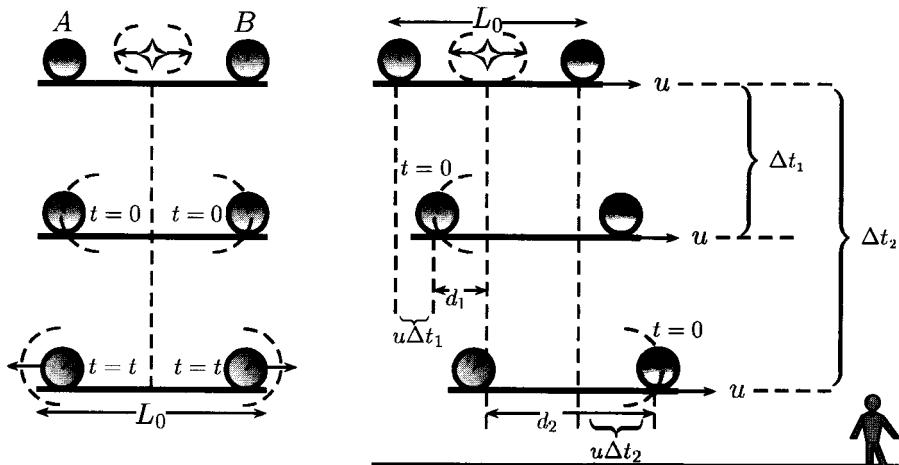
Las ecuaciones de transformación inversa se obtienen de la misma forma como se obtienen las de coordenadas. Si $u \ll c$, las ecuaciones (1.16) a (1.20) conducen a las ecuaciones de transformación de Galileo. Es fácil comprobar que las ecuaciones (1.18) a (1.20) dejan invariante la velocidad de la luz.

A partir de las ecuaciones de transformación de Lorentz se puede deducir también la dilatación del tiempo y la contracción de la longitud.

1.4.1 Sincronización de relojes

En general se necesita más de un reloj para efectuar mediciones de tiempos. Supongamos que ocurren dos eventos en diferentes lugares y tenemos dos relojes que registran el momento en que tienen lugar. Para que los resultados de la medición se puedan comparar, es indispensable que los relojes comiencen a funcionar al mismo tiempo y marchen exactamente igual. Esto es, *deben estar sincronizados*.

Para sincronizar los relojes colocamos una señal luminosa en el punto medio entre ellos y si tienen un mecanismo que los pone en marcha cuando les llega la señal de luz, lo harán simultáneamente (figura 1.12a.). Suponemos que estos relojes no se atrasan ni adelantan. Relojes sincronizados en un marco de referencia con respecto al cual están en reposo lo seguirán estando a medida que pasa el tiempo; pero, esto no significa que para otro observador inercial también estén sincronizados. Veamos que ocurre en este caso.



- a. Dos relojes en reposo con respecto al observador.

- b. Dos relojes en movimiento con respecto al observador, mostrado en tres instantes diferentes.

FIGURA 1.12. Sincronización de relojes.

Consideremos ahora dos relojes con las anteriores características separados una cierta distancia y en movimiento uniforme con respecto a nosotros. En un momento dado se prende una señal de luz en el punto medio entre los dos relojes y los observaremos cuando les llegue la luz y comiencen a funcionar (figura 1.12b.).

Sea L la separación observada entre los relojes y Δt_1 y Δt_2 los intervalos de tiempo que necesita la luz para llegar a cada reloj. El intervalo de tiempo que transcurre entre el instante en que comienza a funcionar el reloj A y el instante en que lo hace B será igual a $\Delta t = \Delta t_2 - \Delta t_1$. De la figura 1.12b. se tiene que las distancias d_1 y d_2 que recorre la luz en los intervalos de tiempo Δt_1 y Δt_2 se pueden expresar como:

$$d_1 = c\Delta t_1 = \frac{1}{2}L - u\Delta t_1$$

y

$$d_2 = c\Delta t_2 = \frac{1}{2}L - u\Delta t_2$$

Procediendo en forma análoga al caso de la contracción de la longitud, de la suma y de la resta de las distancias anteriores se obtiene:

$$c(\Delta t_1 + \Delta t_2) = Lu\Delta t$$

y

$$c\Delta t = u(\Delta t_1 + \Delta t_2)$$

de donde:

$$\Delta t = \frac{Lu/c^2}{1 - u^2/c^2} \quad (1.21)$$

Pero sabemos que relojes en movimiento andan más despacio en el factor $(1 - u^2/c^2)^{-1/2}$; esto es, para relojes en movimiento el intervalo de tiempo anterior solamente será de :

$$\Delta t_{\text{mov}} = \Delta t(1 - u^2/c^2)^{1/2} = \frac{Lu}{c^2}(1 - u^2/c^2)^{-1/2} \quad (1.22)$$

La cantidad $L(1 - u^2/c^2)^{-1/2}$ no es más que la distancia entre los relojes cuando están en reposo con respecto a nosotros; entonces el intervalo de tiempo entre dos relojes en movimiento separados una distancia L_0 (en reposo) es:

$$\Delta t_{\text{mov}} = \frac{L_0 u}{c^2} \quad (1.23)$$

Por consiguiente, relojes que han sido sincronizados cuando están en reposo con respecto al observador ya no lo estarán si se encuentran en movimiento uniforme con respecto al mismo observador.

Nótese que cuando el reloj B comienza a funcionar, el reloj A estará indicando un tiempo mayor en la cantidad dada por la ecuación (1.23); esta diferencia de tiempos se mantendrá a medida que los relojes se desplacen con respecto al observador: el reloj que persigue (en este caso el reloj A) siempre indicará un tiempo mayor que el que se encuentra delante en la cantidad $L_0 u/c^2$.

De esta manera, terminamos la parte correspondiente a la cinemática relativista cuyos resultados podemos resumir de la siguiente manera:

1. Reloj en movimiento se atrasan en el factor: $\sqrt{1 - u^2/c^2}$.
2. Objetos en movimiento se contraen en la dirección de su movimiento, en el factor $\sqrt{1 - u^2/c^2}$.
3. Un reloj que persigue a otro indicará un tiempo mayor en la cantidad $L_0 u/c^2$ donde L_0 es la distancia que separa los relojes cuando están en reposo con respecto al observador.

Ejemplo 1.3.

Una nave de 100 m de longitud en reposo, se mueve a una velocidad de $4c/5$ con respecto a un observador en tierra. En la nave se colocan dos relojes sincronizados (D y E) y en la tierra otros tres, (A , B , C) también sincronizados e igualmente espaciados entre sí como se muestra en la figura 1.13. Cuando el Reloj D pasa frente al reloj B ambos indican $t = 0$ (origen de los tiempos). Hallar los tiempos indicados por los relojes cada vez que dos de ellos se cruzan.

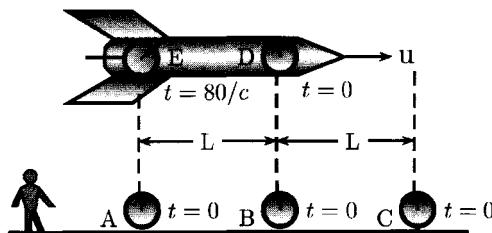


FIGURA 1.13. Posición de los relojes que se van a observar.

Como los relojes A , B y C están sincronizados, A y C también están indicando $t = 0$. El reloj E persigue al reloj D ; por lo tanto indicará un tiempo mayor que el reloj D en la cantidad:

$$t_E = t_D + \frac{L_0 u}{c^2} = \frac{80}{c} s$$

Los tiempos indicados por los 5 relojes cuando D pasa frente a B (vistos por el observador en tierra) son entonces:

$$t_A = t_B = t_C = t_D = 0 s \quad t_E = \frac{80}{c} s$$

La nave sigue avanzando y el reloj D pasa frente al reloj C , el reloj E pasa frente al reloj B (figura 1.14). Para esto la nave ha recorrido una distancia igual a su longitud contraída:

$$L = L_0 \sqrt{1 - u^2/c^2} = 60 m$$

y para ello transcurre un intervalo de tiempo

$$\Delta t = \frac{L}{u} = \frac{75}{c} s$$

Los relojes en tierra estarán indicando:

$$t_A = t_B = t_C = 0 + \Delta t = \frac{75}{c} s$$

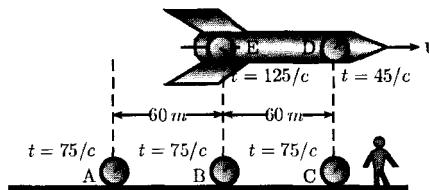


FIGURA 1.14. Posición de los relojes cuando la nave avanza en un tiempo Δt .

Pero en la nave los relojes andan más despacio (para el observador en tierra) en la cantidad $\frac{1}{2}(1 - u^2/c^2) = \frac{3}{5}$. Por consiguiente el intervalo de tiempo transcurrido según los relojes de la nave visto por el observador en tierra es:

$$\Delta t_{\text{nave}} = \Delta t_{\text{tierra}} \sqrt{1 - u^2/c^2} = \frac{45}{c} \text{ s}$$

y los relojes de la nave mostrarán:

$$t_D = 0 + \frac{45}{c} = \frac{45}{c} \text{ s} \quad t_E = \frac{80}{c} + \frac{45}{c} = \frac{125}{c} \text{ s}$$

Agrupando los resultados obtenidos, el observador en tierra obtuvo las siguientes respuestas:

E pasa frente a A:	$t_E = 80/c \text{ s}$	$t_A = 0 \text{ s}$
E pasa frente a B:	$t_E = 125/c \text{ s}$	$t_B = 75/c \text{ s}$
D pasa frente a C:	$t_D = 45/c \text{ s}$	$t_C = 75/c \text{ s}$

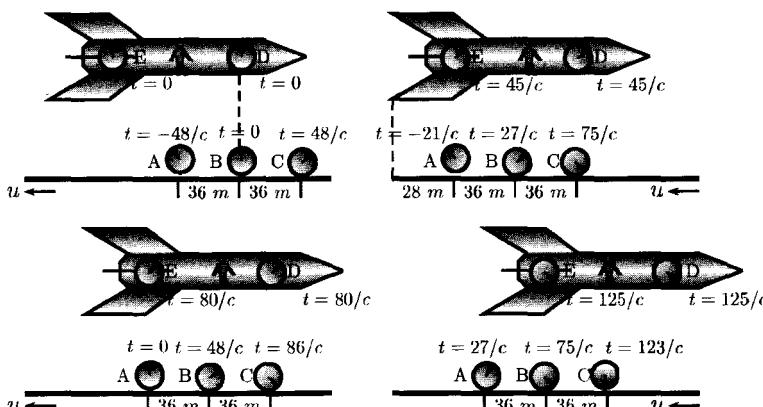


FIGURA 1.15. Relojes en movimiento vistos por el observador en la nave.

En forma análoga se resuelve el problema desde el punto de vista de un observador en la nave: él y su nave estarán en reposo con respecto a la tierra y ésta se moverá hacia la izquierda.(el origen de los tiempos no cambia) ¡Hágalo!

Los resultados para el observador en la nave son los siguientes:

$$C \text{ pasa frente a } D: \quad t_C = 75/cs \quad t_D = 45/cs$$

$$A \text{ pasa frente a } E: \quad t_A = 0 \text{ s} \quad t_E = 80/cs$$

$$B \text{ pasa frente a } E: \quad t_B = 75/cs \quad t_E = 125/cs$$

Comparando los resultados de los dos observadores las respuestas son las mismas! Entonces, de este ejemplo se puede concluir que:

El tiempo indicado por relojes en el instante en que se cruzan será el mismo para cualquier observador inercial, independiente del marco de referencia.

En la figura 1.15 se muestran los pasos necesarios para llegar a las respuestas del segundo caso considerado. □

1.5 Dinámica relativista

Acabamos de ver en el numeral anterior cómo fue necesario reemplazar las transformaciones de Galileo por unas transformaciones nuevas, debido a las consecuencias de los postulados de la relatividad especial de Einstein. Ahora debemos considerar los procesos dinámicos y encontrar cómo se deben modificar las expresiones de las leyes correspondientes para que sean invariantes bajo transformaciones de Lorentz, es decir, para que resulten consistentes con la relatividad especial. La dinámica busca explicar las causas del movimiento y para ello necesita definir ciertas cantidades como fuerza, energía y cantidad de movimiento, entre otras, que permitan establecer relaciones que muestran qué hace, por ejemplo, que un objeto material alcance una velocidad determinada.

Las variables dinámicas tienen la característica de ser una combinación de distintas variables cinemáticas y ya se vio el efecto que sobre ellas tiene la relatividad especial. Entonces, es necesario volver a definir las variables dinámicas de manera que sean invariantes bajo transformaciones de Lorentz para lograr una formulación que satisfaga los postulados de la relatividad especial.

1.5.1 Cantidad de movimiento relativista

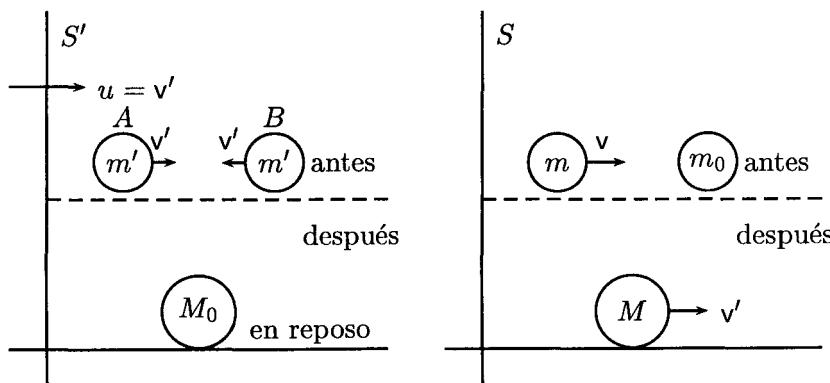
La cantidad de movimiento lineal, $\vec{p} = m\vec{v}$, es una cantidad definida en la mecánica clásica que se conserva en sistemas aislados. Entonces, es

necesario que en relatividad también lo haga en las misma circunstancias. Esto nos lleva a imponerle a la expresión relativista correspondiente dos condiciones:

1. Debe conservarse de la misma manera que lo hace clásicamente.
2. La nueva expresión debe ser tal, que para velocidades pequeñas comparadas con la velocidad de la luz, reproduzca la expresión clásica.

La forma de averiguar si cierta cantidad física se conserva es considerar, por ejemplo, un proceso de colisión entre dos objetos, ya que podemos comparar las cantidades antes y después del choque para ver si cambiaron o no.

Consideremos una colisión totalmente inelástica entre dos partículas idénticas A y B que en reposo con respecto al observador tienen la misma masa, y se mueven una hacia la otra con la misma velocidad. La colisión tiene lugar en un marco de referencia inercial S' en movimiento relativo con velocidad constante u con respecto a otro marco de referencia inercial S , desde donde observaremos también la colisión (figura 1.16a.). Para simplificar los desarrollos matemáticos, la velocidad de las partículas y la velocidad relativa del sistema S' serán iguales ($u = v'$).



a. Vista por un observador en S' .

b. Vista por un observador en S .

FIGURA 1.16. Colisión inelástica observada desde dos sistemas de referencia con movimiento relativo.

Para el observador en el sistema S' se cumple la conservación de la cantidad de movimiento:

$$m'v' + m'(-v') = 0$$

Al observar la misma colisión desde el marco de referencia S , no podemos asegurar que las masas de las partículas en movimiento siguen siendo las mismas ya que sus velocidades son diferentes.

Entonces, sean m y M las masas de las partículas en movimiento y m_0 la masa de la partícula en reposo (figura 1.16b.). La partícula A se mueve con una velocidad v y la partícula resultante después de la colisión se moverá con la velocidad v' .

La conservación de la cantidad de movimiento requiere que se cumpla:

$$mv = Mv' \quad (1.24)$$

donde, de acuerdo con las transformaciones para velocidades:

$$v = \frac{v' + v}{1 + v'^2/c^2} = \frac{2v'}{1 + v'^2/c^2} \quad (1.25)$$

Noten que cuando $v \ll c$, $v = 2v'$.

Además, por consideraciones de la conservación de masa tenemos que:

$$m + m_0 = M \quad (1.26)$$

y dividiendo la ecuación (1.24) por la ecuación (1.26) se obtiene:

$$m = \left(\frac{v'}{v - v'} \right) m_0 \quad (1.27)$$

expresión que permite encontrar cómo depende la masa de la partícula A de su velocidad v cuando se exprese v' en función de v . De la ecuación (1.25) se obtiene una ecuación de segundo grado para v' cuya solución es:

$$v' = \frac{c^2}{v} \left(1 \pm \sqrt{1 - v^2/c^2} \right) \quad (1.28)$$

Puesto que v' debe ser igual a $v/2$ cuando las velocidades involucradas son pequeñas comparadas con la velocidad de la luz, el signo apropiado en la ecuación (1.28) es el signo negativo.⁹ Entonces:

$$v' = \frac{c^2}{v} \left(1 - \sqrt{1 - v^2/c^2} \right) \quad (1.29)$$

⁹Para $v \ll c$; $\left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{1/2} = 1 - \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2}$

Reemplazando este resultado en la ecuación (1.27):

$$m = \left[\frac{c^2/v(1 - \sqrt{1 - v^2/c^2})}{v - c^2/v(1 - \sqrt{1 - v^2/c^2})} \right] m_0$$

obteniéndose finalmente para la masa:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (1.30)$$

Lo cual se interpreta como:

Un objeto al moverse con respecto a un observador aumenta su masa en una cantidad que depende de su velocidad.

El resultado anterior es una consecuencia de exigir la conservación de la cantidad de movimiento en la teoría de la relatividad especial. La masa m se denomina *masa relativista* y la masa m_0 *masa en reposo*. Nótese que es la masa en reposo (m_0), y no la masa relativista (m), la que es un invariante relativista. Además, la velocidad relativa entre los sistemas de referencia ya no aparece, *sólo queda la velocidad del objeto con relación al marco de referencia respecto al cual se realizan las mediciones*.

Como se mencionó anteriormente, si la velocidad del objeto es pequeña comparada con la velocidad de la luz, la ecuación (1.30) conduce al resultado clásico $m = m_0$, y si la velocidad del objeto fuera igual a la velocidad de la luz, la masa sería infinita. Esta es una de las razones por la cual decimos que ningún objeto material puede moverse a la velocidad de la luz, ya que es físicamente imposible hacer que alcance esta velocidad. Por consiguiente, c es una velocidad límite en la naturaleza.

De acuerdo con el resultado obtenido para la masa, la expresión clásica de la cantidad de movimiento será válida si se reemplaza en ella la masa por la masa relativista. Esto es:

$$\vec{p} = m\vec{v} = \frac{m_0\vec{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (1.31)$$

donde \vec{v} es la velocidad del objeto.

Como la cantidad de movimiento es una cantidad vectorial, sus componentes con respecto a un sistema de ejes x, y, z serán:

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{m_0 v_x}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \\ p_y &= \frac{m_0 v_y}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \\ p_z &= \frac{m_0 v_z}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \end{aligned} \quad (1.32)$$

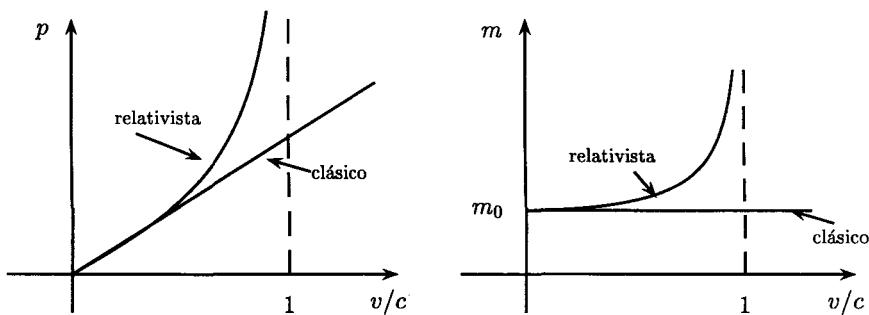


FIGURA 1.17. Dependencia con respecto a la velocidad de la cantidad de movimiento y la masa relativista.

donde

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \quad (1.33)$$

En la figura 1.17 se puede observar cómo dependen la cantidad de movimiento y la masa relativista con la velocidad y cómo lo hacen las correspondiente cantidades clásicas.

El que una partícula material no pueda alcanzar la velocidad de la luz se demostró experimentalmente, acelerando una partícula cargada mediante una diferencia de potencial V , lo cual hace que adquiera una energía cinética $K = e \cdot V = \frac{1}{2}m_0v^2$. Los resultados mostraron que una vez alcanzado cierto voltaje, la velocidad de la partícula ya no depende del la diferencia de potencial (figura 1.18).

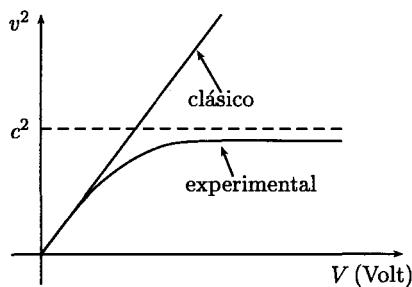


FIGURA 1.18. Velocidad de una partícula cargada en función del voltaje acelerador

Con lo explicado es fácil entender ahora porqué la curva experimental se aleja de la recta que predice la teoría clásica. Sólo coinciden para valores pequeños del voltaje acelerador, lo cual es equivalente a pequeñas

velocidades. La razón es que a medida que la partícula adquiere energía, aumenta su velocidad y por consiguiente se incrementa su masa.

1.5.2 Energía Relativista

Como es de esperarse, la ecuación para la energía cinética no puede ser la misma expresión clásica $\frac{1}{2}mv^2$. Ahora procederemos a derivar su expresión relativista así como la de la energía total.

En mecánica clásica definimos la energía cinética K de una partícula, como el trabajo hecho por una fuerza externa para aumentar su velocidad desde cero hasta un determinado valor final v . Esto es:

$$K = \int_0^v \vec{F} \cdot d\vec{l} \quad (1.34)$$

donde $\vec{F} \cdot d\vec{l}$ es el trabajo hecho por la fuerza para desplazar la partícula una distancia $d\vec{l}$.

La misma definición nos sirve para hallar la energía cinética relativista, siempre y cuando usemos la expresión relativista para la fuerza, la que se obtiene fácilmente a partir de la expresión general de la segunda ley de Newton:

$$\vec{F}_{\text{clas}} = \frac{d}{dt}(\vec{p}_{\text{clas}}) = \frac{d}{dt}(m_0 \vec{v}) = m_0 \vec{a}$$

donde m_0 es la masa clásica, considerada constante en la expresión anterior.

La fuerza relativista también será la derivada con respecto al tiempo de la cantidad de movimiento, pero ahora relativista:

$$\vec{F}_{\text{rel}} = \frac{d}{dt}(\vec{p}_{\text{rel}}) = \frac{d}{dt}(m_0 \vec{v}) = m \frac{d\vec{v}}{dt} + \vec{v} \frac{dm}{dt}$$

donde m es la masa relativista que depende de la velocidad.

Entonces, en una dimensión, tendremos la siguiente expresión para la energía cinética:

$$K = \int_0^v F dx = \int_0^v \frac{d}{dt}(mv) dx \int_0^v d(mv) \frac{dx}{dt} \quad (1.35)$$

$$= \int_0^v d(mv)v = \int_0^v (v^2 dm + m v dv)$$

expresión en la cual tanto m como v son variables. Estas cantidades están relacionadas la una con la otra a través de la definición de la masa relativista: $m = m_0 / (\sqrt{1 - v^2/c^2})$.

Elevando al cuadrado esta expresión y diferenciándola se obtiene:

$$mv dv + v^2 dm = c^2 dm \quad (1.36)$$

que es precisamente el factor que se encuentra debajo del signo de integración en la ecuación (1.35). Por consiguiente:

$$K = \int c^2 dm = c^2 \int_{m_0}^m dm = mc^2 - m_0 c^2 \quad (1.37)$$

Al reemplazar m en función de m_0 obtenemos otra expresión para la energía cinética relativista:

$$K = (m - m_0)c^2 \quad (1.38)$$

$$= m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - 1 \right)$$

La ecuación (1.37) muestra la relación que existe entre la energía cinética y la variación de la masa de una partícula debido al cambio en su velocidad. Además, muestra que la relatividad especial le asigna una energía a la masa. La cantidad $m_0 c^2$ que no depende de la velocidad de la partícula se denomina *energía de reposo*, E_0 , y es la energía que tiene una partícula por el sólo hecho de tener una masa diferente de cero. Clásicamente esta energía se considera nula. Así mismo, mc^2 representa la energía que tiene la partícula cuando está en movimiento y se llama *energía total relativista*, E . Por lo tanto la ecuación (1.37) también se puede escribir como:

$$E = E_0 + K \quad (1.39)$$

La expresión relativista para la energía cinética es muy diferente a la correspondiente expresión clásica, pero para velocidades pequeñas comparadas con la velocidad de la luz se reduce a ella.

Escribiendo la ecuación (1.38) en la siguiente forma:

$$K = m_0 c^2 \left[(1 - v^2/c^2)^{-1/2} - 1 \right]$$

cuando v^2/c^2 es muy pequeño comparado con la unidad se puede expandir $(1 - v^2/c^2)^{-1/2}$ en serie de potencias del factor v^2/c^2 utilizando

el teorema binomial:

$$K = m_0 c^2 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{v^2}{c^2} \right) + \frac{3}{8} \left(\frac{v^2}{c^2} \right)^2 + \dots - 1 \right]$$

De la serie sólo se conservan los dos primeros términos ya que los demás son despreciables comparados con la unidad. Así, se reproduce la expresión clásica, $K = \frac{1}{2} mv^2$.

En la figura 1.19 se puede observar la variación de la energía cinética relativista y clásica en función de la velocidad.

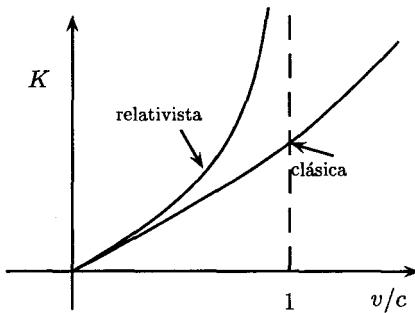


FIGURA 1.19. Variación de la energía cinética con la velocidad.

Es importante notar dos cosas acerca de la expresión relativista de la energía cinética:

1. Cuando $v \rightarrow c$ la energía tiende a infinito, lo cual significa que se necesitaría hacer una cantidad infinita de trabajo para acelerar la partícula hasta alcanzar la velocidad de la luz!. Nuevamente encontramos que la velocidad de la luz es la máxima velocidad en la naturaleza y que objetos que tienen masa en reposo no nula nunca podrán moverse a esa velocidad.
2. En segundo lugar, no se puede usar en relatividad la expresión clásica para la energía cinética reemplazando la masa en reposo por la masa relativista. No siempre se puede reemplazar solamente la masa clásica por la relativista cuando se generaliza una fórmula clásica a una relativista.

Muchas veces necesitamos una expresión relativista que relacione energía total y cantidad de movimiento de una partícula. Combinando las ecuaciones de energía total y cantidad de movimiento para eliminar entre ellas la velocidad, obtenemos:

$$E^2 = (m_0 c^2)^2 + (pc)^2 \quad (1.40)$$

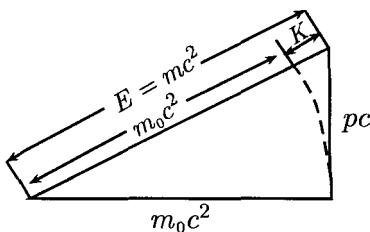


FIGURA 1.20. Representación gráfica de las relaciones entre E , E_0 , K y p .

La ecuación anterior tiene la forma de la expresión del teorema de Pitágoras; entonces, una manera fácil para recordar las fórmulas deducidas en este numeral es utilizar los lados de un triángulo rectángulo para representarlas como se muestra en la figura 1.20.

1.5.3 Equivalencia masa-energía

La más conocida de las predicciones de la teoría de la relatividad especial, y también la más espectacular, es la que dice que la masa es una forma de energía. Este resultado aparece por primera vez en el numeral anterior.

Una manera sencilla de ver la equivalencia masa-energía es considerar nuevamente una colisión inelástica, en la cual sabemos que se conserva la cantidad de movimiento y la energía total, pero no la energía cinética.

Supongamos que una partícula en reposo de masa M_0 se divide en dos partículas idénticas de masas en reposo m_0 .¹⁰ Clásicamente se cumple que $M_0 = 2m_0$ por el principio de conservación de masa; pero como ya sabemos, las leyes clásicas son aproximaciones de las correspondientes leyes relativistas y es muy posible que ahora esta igualdad no se cumpla, más aún teniendo en cuenta la equivalencia masa-energía.

El proceso anterior ocurre realmente en la naturaleza. Por ejemplo, la partícula llamada mesón \mathcal{K} se divide espontáneamente en dos partículas idénticas llamadas mesones π , en más o menos 10^{-10} segundos. La ecuación del proceso es:

$$\mathcal{K}^0 \rightarrow \pi^0 + \pi^0 \quad (1.41)$$

Veamos qué ocurre desde el punto de vista relativista. Las masas en reposo de las partículas involucradas en el proceso son M_0 y m_0 . Después

¹⁰La desintegración de una partícula en dos partes también es un proceso de colisión inelástica

de la división, las partículas finales se encuentran en movimiento, con igual velocidad pero en sentido opuesto, y sus masas serán relativistas (figura 1.21). Durante el proceso de división se conserva la cantidad de

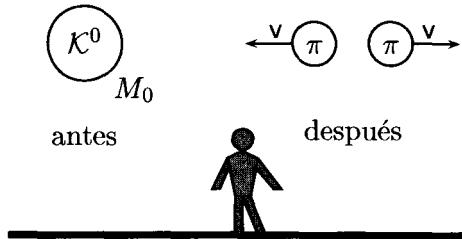


FIGURA 1.21. División de una partícula inicialmente en reposo.

movimiento y la energía total del sistema. Entonces, por conservación de energía total:

$$E_{\text{antes}} = E_{\text{después}} \quad (1.42)$$

De acuerdo con la figura 1.21, las energías totales antes y después de la división son:

$$E_{\text{antes}} = M_0 c^2 \quad (1.43)$$

$$E_{\text{después}} = 2 \left[m_0 c^2 + m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - 1 \right) \right]$$

lo cual conduce al siguiente resultado:

$$M_0 = \frac{2m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (1.44)$$

Entonces, ¡las masas en reposo inicial y final del sistema no son las mismas!. Antes de la división la masa era mayor; esto es, durante el proceso se perdió masa.

Ya que la masa no puede desaparecer o aparecer porque sí, algo más se transformó. En este caso particular cambió la energía cinética: inicialmente era nula y al final tiene un valor diferente de cero. Por consiguiente, la masa se transformó en energía cinética. Pueden comprobarlo al calcular los cambios de energía cinética ($\Delta K = K_f - K_i$) y de masa ($\Delta M = M_0 - 2m_0$); encontrarán que $\Delta K = \Delta M c^2$.

En general la masa se puede transformar en cualquier otra manifestación de energía y viceversa. Esta clase de situaciones llevó a Einstein a concluir que la masa es otra forma de energía; esto es, existe una equivalencia entre la masa y la energía.

Observen que la conservación de energía total implica la conservación de la masa relativista.

Clásicamente teníamos dos leyes de conservación: una para la energía y otra para la masa. Ahora, en la teoría de la relatividad especial estas dos leyes se transforman en una sola y se llama *ley de conservación de masa-energía* cuya expresión matemática es la conocida ecuación:

$$E = mc^2 \quad (1.45)$$

La relación anterior implica que la masa se puede expresar en unidades de energía dividida por c^2 . Es común en física atómica expresar la masa en unidades de eV/c^2 (electrónvoltio/ c^2). Por ejemplo, las masas en reposo del electrón, protón y neutrón respectivamente son¹¹:

$$m_0(e) = 0.511 \frac{MeV}{c^2}$$

$$m_0(p) = 938.256 \frac{MeV}{c^2}$$

$$m_0(n) = 939.550 \frac{MeV}{c^2}$$

Lo anterior no quiere decir que la energía y la masa son cantidades numéricamente iguales, sino que son cantidades físicamente equivalentes. En la física clásica también tenemos analogías de este tipo. Por ejemplo, la correspondencia que existe entre la altura de una columna de mercurio y la presión atmosférica.

1.5.4 Partículas de masa en reposo cero

Terminaremos este primer capítulo hablando brevemente de ciertas partículas que no tienen masa en reposo que se denominaron fotones.

En los primeros años del siglo XX se observó que algunos experimentos en los cuales intervenía la luz conducían a resultados que sólo eran explicables si se consideraba la luz formada por unas partículas especiales que se llamaron fotones.

Los fenómenos como la Radiación del cuerpo Negro, el Efecto Foteléctrico y el Efecto Compton, de los cuales hablaremos en los próximos capítulos, mostraron que la energía de un fotón en un haz de luz de frecuencia ν es:

$$E = h\nu \quad (1.46)$$

¹¹El prefijo Mega significa 10^6

donde h es una constante, llamada constante de Planck, cuyo valor es igual a 6.627×10^{-34} J-s.

Puesto que el fotón es luz, se mueve a la velocidad de la luz las ecuaciones para la cantidad de movimiento y masa relativista (1.30 y 1.31) nos dicen que m_0 debe ser nula porque de lo contrario p y m serían infinitas. Por lo tanto, estas ecuaciones no se pueden utilizar cuando la partícula considerada es un fotón. Pero en la ecuación que relaciona energía total y cantidad de movimiento (1.40) no aparece explícitamente la velocidad por lo cual se puede usar con fotones.

Reemplazando $m_0 = 0$ en la ecuación mencionada se obtiene:

$$E = pc \quad (1.47)$$

resultado que ha sido comprobado experimentalmente. Entonces, la cantidad de movimiento de un fotón se puede escribir como:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} \quad (1.48)$$

Además de los fotones existen otras partículas que tienen la misma propiedad de no tener masa en reposo¹². Son llamadas neutrinos y también se mueven a la velocidad de la luz. Estas partículas fueron postuladas por W. Pauli para explicar una aparente violación de la ley de conservación de energía en reacciones nucleares. Son muy difíciles de detectar y esto se logró por primera vez en 1956.

Ejemplo 1.4.

Dos partículas que viajan a gran velocidad van a realizar una colisión inelástica frontal. Una se mueve a una velocidad de $0,8c$ y la otra a $0,6c$ y tienen la misma masa en reposo, m_0 . Hallar las siguientes cantidades en términos de m_0 y c , después de la colisión: a) cantidad de movimiento; b) valor clásico de la cantidad de movimiento; c) energía total; d) masa en reposo; y e) energía cinética.

En la figura 1.22 se muestra el proceso de colisión.

Como la colisión es inelástica, en ella se conservan la cantidad de movimiento y la energía total. Entonces las ecuaciones de conservación son:

$$\frac{m_{0A}v_A}{\sqrt{1 - v_A^2/c^2}} - \frac{m_{0B}v_B}{\sqrt{1 - v_B^2/c^2}} = \frac{M_{0C}v_C}{\sqrt{1 - v_C^2/c^2}} \quad (1.49)$$

¹²Las actuales discusiones acerca de las partículas elementales y la cosmología le asignan a los neutrinos una masa en reposo no nula, aun cuando de muy poco valor (comparada, por ejemplo, con la masa en reposo del electrón).

$$\frac{m_{0A}c^2}{\sqrt{1-v_A^2/c^2}} + \frac{m_{0B}c^2}{\sqrt{1-v_B^2/c^2}} = \frac{M_{0C}c^2}{\sqrt{1-v_C^2/c^2}} \quad (1.50)$$

donde: $m_{0A} = m_{0B} = m_0$; $M_{0C} = M_0$; $v_A = 0.8 c$; $v_B = 0.6 c$.

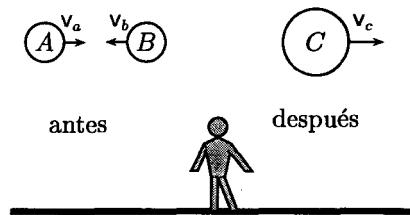


FIGURA 1.22. Colisión frontal de dos partículas.

- a) De la ecuación (1.49), la cantidad de movimiento después de la colisión es igual a:

$$p = \frac{0.8 c m_0}{\sqrt{1 - 0.64}} - \frac{0.6 c m_0}{\sqrt{1 - 0.36}} = \frac{7}{12} m_0 c$$

- b) La cantidad de movimiento clásica es:

$$p = p_A + p_B = m_0 v_A - m_0 v_B = m_0 (0.8 c - 0.6 c) = 0.2 m_0 c$$

- c) De la ecuación (1.50), la energía total después de la colisión es:

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - 0.64}} + \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - 0.36}} = \frac{35}{12} m_0 c^2$$

- d) Para determinar la masa en reposo después de la colisión, primero debemos encontrar su velocidad. De las ecuaciones (1.49) y (1.50) y las partes a) y b) tenemos que:

$$\frac{E}{p} = \frac{M_{0C}c^2}{M_{0C}v_C} = \frac{c^2}{v_C} = \frac{35 m_0 c^2}{7 m_0 c} = 5c$$

de donde:

$$v_C = \frac{c}{5}$$

Reemplazando este valor en cualquiera de las ecuaciones (1.49) o (1.50), se obtiene para la masa en reposo después de la colisión:

$$M_0 = \frac{34.3}{12} m_0$$

- e) La energía cinética después de la colisión se obtiene **directamente** a partir de su definición y de los resultados anteriores:

$$K = E - E_0 = E - M_0 c^2 = \frac{0.17}{12} m_0 c^2 \quad (1.51)$$

□

Ejemplo 1.5.

La vida media de un mesón μ en reposo es de 2.3×10^{-6} s. Una medida de su tiempo de vida en el laboratorio da como resultado 6.9×10^{-6} s.

a) ¿Cuál es la velocidad del mesón μ en el laboratorio?, b) Si la masa en reposo del mesón es igual a $207 m_e$ (m_e = masa en reposo del electrón), ¿cuál es su masa cuando se mueve a la velocidad calculada en la parte a)?, c) ¿Cuál es la cantidad de movimiento y la energía cinética del mesón?

- a) Los datos suministrados en el enunciado del problema son el tiempo propio de la partícula y el tiempo observado cuando está en movimiento con respecto al observador. Entonces, de la expresión para la dilatación del tiempo se tiene que su velocidad es:

$$v = \frac{c}{\Delta t} \sqrt{\Delta t^2 - \Delta t_0^2} = 0.942 c$$

- b) Conocida su velocidad, su masa relativista es:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{m_0 \Delta t}{\Delta t_0} = 621 m_e$$

Como pueden observar, no es indispensable conocer explícitamente la velocidad de la partícula (en este caso particular) para determinar su masa relativista.

- c) La cantidad de movimiento y la energía cinética son respectivamente:

$$p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{m_0 v \Delta t}{\Delta t_0} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ Kg} - \text{m/s}$$

$$K = m c^2 - m_0 c^2 = (621 - 207) m_e c^2 = 414 m_e c^2 = 212 \times 10^6 \text{ eV}$$

□

Preguntas

1. ¿Puede una partícula moverse a través de un medio con una velocidad mayor que la de la luz en ese medio? Explique.
2. ¿Dos observadores, uno en el Polo Norte y el otro en el Polo Sur, estarán de acuerdo con respecto a la dirección hacia arriba y hacia abajo? ¿Con cuál definición de estos términos estarán de acuerdo?
3. Un evento A precede a otro evento B en el mismo sistema de referencia inercial. En otro sistema de referencia inercial: ¿ A precederá a B ? ¿El intervalo de tiempo entre los eventos será el mismo? Explique sus respuestas.
4. De acuerdo con la teoría de la relatividad especial, ¿todo es relativo o hay cosas invariantes permitidas por esta teoría? Esto es, ¿existen hechos que serán los mismos para cualquier observador inercial?
5. ¿Se puede sustituir simplemente m_0 por m en una ecuación clásica para obtener la correspondiente ecuación relativista? Dé ejemplos.
6. ¿Es correcta la expresión $\vec{F} = m\vec{a}$ en relatividad? Si no lo es, ¿en qué se diferencia de la expresión clásica?
7. ¿Es correcto que una partícula que tiene energía, también debe tener cantidad de movimiento? ¿Qué pasa si su masa en reposo es nula?
8. Si los fotones tienen una velocidad c en un marco de referencia inercial, ¿se puede hallar otro marco de referencia inercial en el cual estarán en reposo?
9. Explique la diferencia entre masa variable en física clásica y la variación de masa en relatividad.
10. Una unidad que se emplea en la relatividad para la cantidad de movimiento lineal es MeV/c . Explique por qué y exprese $1MeV/c$ en el sistema internacional de unidades.

Problemas

1. La longitud medida de una nave en movimiento es igual a la mitad de su longitud propia. a) ¿Cuál es la velocidad de la nave relativa a un observador en la tierra? b) ¿Cuál es la dilatación de la unidad de tiempo de la nave? R/: a)=($\sqrt{3}/2$) c ; b) $2t_0$.

2. Un reloj que se mueve a la velocidad $c/2$ indica $t' = 0$ cuando el reloj del observador en reposo indica $t = 0$. Usando las transformaciones de Lorentz, encuentre el tiempo indicado por el reloj en reposo cuando el reloj en movimiento indica $t = 10\text{ s}$. R/: $20/\sqrt{3}$

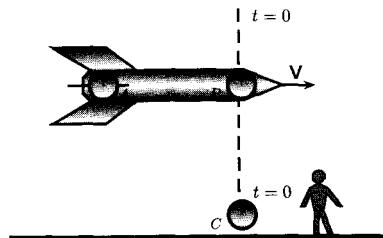


FIGURA 1.23. Problema 3.

3. Una nave que en reposo mide 100 m , se mueve con respecto a la tierra con una velocidad de $3c/5$. En la nave hay dos relojes sincronizados, como lo muestra la figura. Un observador en la tierra también tiene un reloj y en el momento que la parte delantera de la nave cruza frente a él, tanto el reloj en la nave como el del observador indican $t_B = t_C = 0$.
- En el instante $t = 0$, ¿Qué tiempo marca el reloj que se encuentra en la parte trasera de la nave?
 - ¿Cuánto tiempo se requiere para que la parte trasera de la nave pase frente al observador?
 - En ese instante, ¿qué tiempo indicarán los relojes en la nave?

R/: a) $\frac{600}{c}\text{ s}$; b) $\frac{1333}{c}\text{ s}$; c) $\frac{1067}{c}\text{ s}$ y $\frac{1667}{c}\text{ s}$.

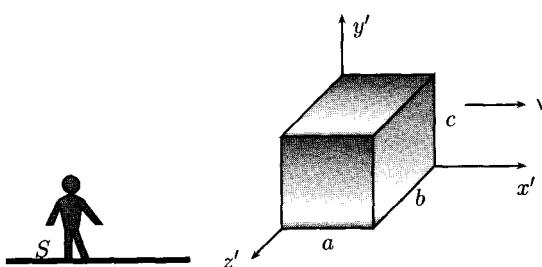


FIGURA 1.24. Cubo moviéndose respecto a el observador S. Problema 4.

4. Un cubo de lados a , b , c , volumen V_0 , masa en reposo m_0 , y densidad $\rho_0 = m_0/V_0$, se mueve hacia la derecha con velocidad v

(ver figura 1.24). Para el observador en el sistema S , ¿cuáles son: a) el volumen; b) la masa; c) la densidad y d) la densidad si $v \ll c$. del cubo? R/: a) $V_0 \sqrt{1 - v^2/c^2}$; b) $m_0 / \sqrt{1 - v^2/c^2}$; c) $\rho_0 (1 - v^2/c^2)^{-1}$; d) ρ_0 .

5. ¿Cuál es la velocidad de un electrón cuya energía cinética es igual a su energía en reposo? R/: $\sqrt{3} \frac{c}{2}$.
6. Dos partículas A y B , de masa en reposo m_0 y M_0 respectivamente, se mueven con velocidades $v_A = 3c/5$ y $v_B = 4c/5$ en sentidos opuestos para realizar una colisión frontal completamente inelástica. Exprese M_0 en función de m_0 . R/: $\frac{9}{16}m_0$.
7. Una partícula de masa en reposo m_0 se mueve con velocidad de $0,6c$ y va a realizar una colisión inelástica con otra partícula idéntica que se encuentra en reposo. a) ¿Cuál es la masa en reposo de la partícula resultante? b) ¿Cuál es su velocidad?
R/: a) $2.1m_0$; b) $\frac{c}{3}$.
8. Dos partículas iguales de masa en reposo m_0 se mueven con velocidad de $0,6c$ en sentidos opuestos para realizar una colisión frontal inelástica. La partícula resultante tiene una masa en reposo M_0 . Exprese M_0 en función de m_0 . R/: $2.5m_0$.
9. Un mesón π en reposo decae en un neutrino (ν) y un mesón μ . Encuentre la energía cinética del neutrino y del mesón μ . Masas en reposo de las partículas: $m_{o\pi} = 273 m_e$; $m_{o\mu} = 207 m_e$; $m_{o\nu} = 0$ (m_e es la masa en reposo del electrón) R/: $K_\mu = 4.07 \text{ MeV}$ y $K_\nu = 29.64 \text{ MeV}$.

Capítulo 2

Radiación del cuerpo negro

2.1 Espectro de la radiación electromagnética

Entre 1850 y 1870 J.Maxwell desarrolló la teoría electromagnética la que condujo a la predicción y posterior descubrimiento de las llamadas ondas electromagnéticas. A la emisión de esta clase de ondas se le da el nombre de *radiación electromagnética*. Una onda electromagnética se caracteriza por las vibraciones de su campo eléctrico \vec{E} y su campo magnético \vec{B} , que oscilan en planos mutuamente perpendiculares. La dirección de propagación, y por lo tanto su velocidad de propagación, es perpendicular a las direcciones de los dos campos, tal como se ilustra en la figura 2.1.

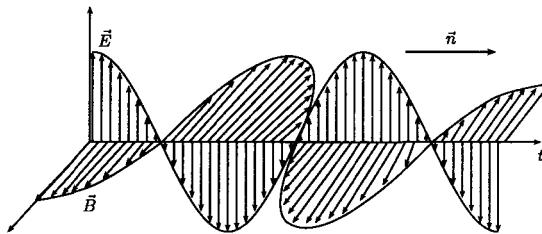


FIGURA 2.1. Representación de una onda electromagnética donde \vec{E} es el campo eléctrico, \vec{B} es el campo magnético y \vec{n} es la dirección de propagación.

Una característica espacial de la onda electromagnética es su longitud de onda λ y su frecuencia de oscilación ν . Como para las demás ondas, el producto de su frecuencia por su longitud de onda es igual a su velocidad de propagación, que para la onda electromagnética en el vacío es:

$$\lambda \nu = c \quad (2.1)$$

donde c tiene el valor de $3 \times 10^8 \frac{m}{s}$, lo que corresponde, nuevamente, a la velocidad de la luz en el vacío.

Si se supone una onda electromagnética viajando en el vacío en la dirección x , se puede recurrir a la siguiente expresión general:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \operatorname{sen}(kx - \omega t + \phi) \quad (2.2)$$

con $k = 2\pi/\lambda$, $\omega = 2\pi\nu$ y ϕ un ángulo de fase arbitrario. \vec{E}_0 representa la amplitud.

Por consiguiente, la relación entre frecuencia y longitud de onda es inversa: a mayor frecuencia menor longitud de onda y viceversa. La longitud de onda (o frecuencia) de una onda electromagnética puede tomar cualquier valor dentro de un rango dado. Al conjunto de posibles valores de la longitud de onda (o frecuencia) llamamos *espectro de la radiación electromagnética* (figura 2.2).

Con el nombre de *espectro* designamos, en general, la distribución de valores que puede tomar cualquier cantidad física.

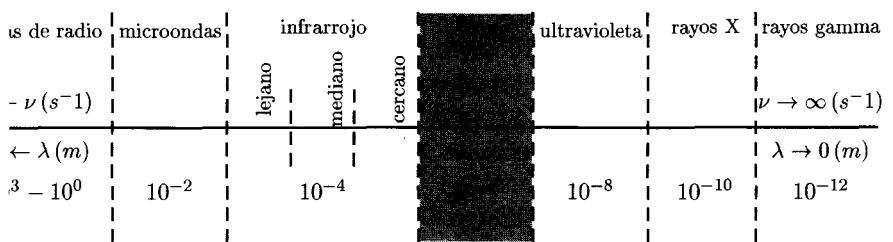


FIGURA 2.2. Espectro de la radiación electromagnética (figura no hecha a escala).

Las ondas electromagnéticas más conocidas son las que ocupan una región muy pequeña del espectro, denominada *región visible*, que corresponde a las frecuencias (o longitudes de onda) que puede resolver el ojo humano y que llamamos colores. El rango de valores de la longitud de onda en esta región va desde $7 \times 10^{-7} m$ (rojo) hasta $4 \times 10^{-7} m$ (violeta). Cuando vemos un arco iris estamos observando la parte visible del espectro electromagnético.

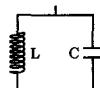
A ambos lados de la región visible del espectro se encuentran otras regiones. A medida que la longitud de onda disminuye ($\lambda \rightarrow 0$) encontramos primero la región *ultravioleta*, luego la región de los *rayos X* y finalmente la región de los *rayos gama* (γ) cuya longitud de onda es del orden de $10^{-12} m$.

A la izquierda de la región visible ($\lambda \rightarrow \infty$) se encuentra **primero** la región del *infrarrojo*, que se divide en tres subregiones: *infrarrojo cercano, mediano y lejano*; luego está la región de las *microondas* y al final del espectro está la región de las ondas de radio cuyas longitudes de onda son del orden de 10^3 m .

En la figura 2.2 se muestran estas regiones o bandas como también suelen llamarse. En el espectro de las ondas electromagnéticas no es posible separar una región de otra. Por ejemplo, en el arco iris no podemos decir exactamente en qué punto termina un color y comienza el siguiente. Un espectro con esta característica se denomina espectro continuo; todos los valores de la cantidad física que se emplea para describir el espectro son posibles.

Cada una de las regiones antes mencionadas tiene diferente origen y aplicabilidad. De acuerdo con la fuente que produce la radiación electromagnética, ésta tendrá una longitud de onda que se localizará en alguna de las regiones del espectro.

TABLA 2.1. Principales fuentes de radiación electromagnética

	ondas de radio	microondas	infrarrojo	visible y UV	rayos X	rayos γ
FUENTES	 osciladores eléctricos	osciladores de electrones dentro de una cavidad. (klystron) magnetrón	transiciones electrónicas en moléculas	transiciones electrónicas en átomos.	cargas eléctricas bruscamente desaceleradas. (radiación de frenado).	transiciones en el núcleo atómico o radiación emitida por nucleos atómicos.
			radiación emitida por moléculas y átomos		transiciones electrónicas profundas.	

En la tabla 2.1 se encuentran las principales fuentes de radiación electromagnética y la región en la cual se encontrará la radiación correspondiente.

Finalmente, para terminar este breve repaso sobre la radiación electromagnética, hay que recordar que una onda electromagnética transporta energía y una medida de ésta es el denominado *vector de Poynting*. Además, la intensidad de una onda electromagnética es proporcional a la amplitud de oscilación, como en cualquier movimiento ondulatorio.

2.2 Radiación térmica

El análisis de la radiación térmica es uno de los temas importantes en la física ya que su estudio crítico llevó a la necesidad de postular nuevos

conceptos que a su vez abrieron el camino hacia la física moderna. Para comprender esta radiación se va a utilizar un ejemplo claro y sencillo.

Consideremos una estufa eléctrica común: una resistencia por la que pasa una corriente cuya intensidad aumenta según la posición del interruptor (bajo, medio y alto). Sabemos que al pasar corriente por la resistencia se disipa en ella energía en forma de calor figura(2.3).

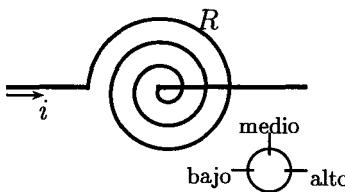


FIGURA 2.3. Resistencia de una estufa eléctrica.

Cuando el interruptor se coloca en bajo, después de cierto tiempo se puede notar fácilmente que la resistencia se ha calentado; es decir, se encuentra a una temperatura que llamaremos T_b . Al pasar el interruptor a la segunda posición (medio), se aumenta la corriente que pasa por la resistencia y se disipa más calor que en el caso anterior. Además, la resistencia toma un color rojizo. Entonces, la resistencia se encuentra a una temperatura T_m , $T_m > T_b$, y hay emisión de luz en el rango visible.

Al pasar a la última posición (alto), la corriente en la resistencia es todavía mayor y, por lo tanto, también lo es la cantidad de calor disipado. Ahora la resistencia se encuentra a una temperatura T_a , $T_a > T_m > T_b$, y toma un color rojo amarillento que significa que la luz emitida es de mayor frecuencia que en los casos anteriores. Si la resistencia permitiera el paso de una corriente todavía mayor, sin quemarse, observaríamos que además de la disipación de calor la resistencia tomaría un color azuloso tendiendo a blanco.

Resumiendo los resultados obtenidos en nuestro experimento, vemos que al aumentar la intensidad de la corriente que pasa por la resistencia aumenta la temperatura de la misma y la frecuencia de la luz a la cual se emite radiación. En realidad se está emitiendo radiación cuya distribución es continua. La manifestación de lo “caliente” que se pone la resistencia de la estufa, es una clara demostración de emisión en el infrarrojo. También se encontrará emisión por encima del visible. Esto es, al calentar un cuerpo hay emisión de radiación electromagnética cuya frecuencia aumenta al aumentar la temperatura.

En el primer paso de nuestro experimento no se ve emisión de luz; pero esto se debe a que la frecuencia de la radiación emitida se encuentra en la región del infrarrojo y no la podemos ver (pero si detectar).

Al gráficar la intensidad de la luz emitida en función de la frecuencia para cada temperatura considerada, se obtienen curvas como las mostradas en la figura 2.4. Como el ojo humano discrimina solamente el color más intenso presente en una radiación de varios colores, en el experimento sólo vemos un color a una temperatura dada; pero con el instrumento adecuado se la puede descomponer en las diferentes frecuencias presentes, obteniéndose las curvas continuas mostradas en la figura.

Se puede concluir, entonces, que los cuerpos materiales a una temperatura diferente de 0 K^1 emiten ondas electromagnéticas. Tal emisión se denomina *radiación térmica*.

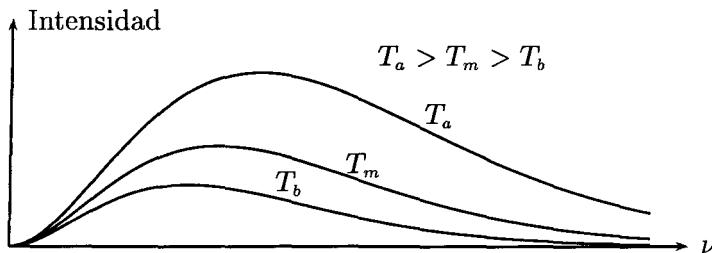


FIGURA 2.4. Curvas típicas de la radiación térmica.

2.3 Radiación del cuerpo negro

Durante la segunda mitad del siglo XIX, se estudió extensamente la radiación emitida por cuerpos calientes y para ello se utilizó cierta clase de objetos que tienen la propiedad de emitir la misma radiación térmica cuando se encuentran a la misma temperatura, independientemente del material que los compone. A estos objetos se llamó *cuerpos negros* y a la radiación térmica que emiten, *radiación del cuerpo negro*.

El hombre puede ver el color de los objetos porque al incidir sobre ellos luz blanca, reflejan luz de cierta frecuencia. Recuerden que la luz blanca (radiación electromagnética visible) está compuesta por luz de todas las frecuencias posibles que van desde el rojo hasta el violeta. Entonces, un objeto se verá blanco cuando refleja toda la luz que incide sobre él; se verá verde cuando refleja luz cuya frecuencia corresponde a ese color; y cuando absorbe toda la luz que incide sobre él se verá

¹Cero grados Kelvin o al cero absoluto de la temperatura.

negro. Un objeto que absorbe toda la radiación electromagnética que incide sobre él es un “*cuerpo negro*”.

Así como un objeto blanco es un reflector perfecto de luz, un cuerpo negro es un absorbedor perfecto; pero también puede ser un emisor perfecto. Si en un cubo de **cartulina blanca** hacemos un pequeño orificio, éste se verá negro debido a que la radiación electromagnética que entra por él no puede volver a salir; pero el resto del cubo refleja toda la radiación que incide sobre él. Por lo tanto, tenemos al mismo tiempo un absorbedor perfecto (el pequeño orificio) y un reflector perfecto (el resto del cubo de cartulina) (figura 2.5a.).

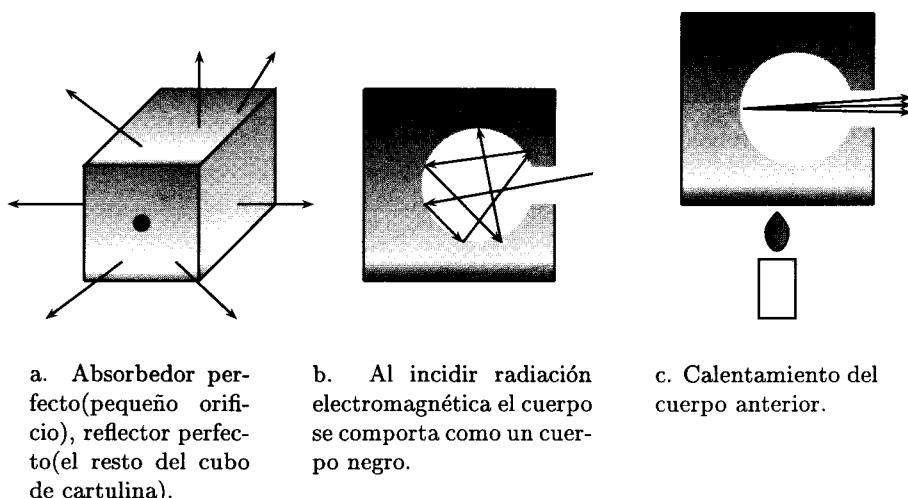


FIGURA 2.5. Esquema de un reflector perfecto y un cuerpo negro.

Ahora consideremos un material cualquiera dentro del cual hay una cavidad conectada al exterior mediante un pequeño orificio, sobre el cual incide un haz de luz (figura 2.5b.). Al entrar la radiación en la cavidad, choca contra su pared y es en parte absorbido por la pared y en parte reflejado hacia otro punto de la cavidad donde nuevamente es en parte absorbido y en parte reflejado. Este proceso se repite hasta que toda la radiación es absorbida por el material. Entonces, el orificio se verá negro porque por él no sale radiación electromagnética, y por consiguiente, se comporta como un cuerpo negro.

Al calentar este mismo material (figura 2.5c.), la cavidad emitirá radiación electromagnética que saldrá por el orificio. Como este se comporta como un cuerpo negro la radiación que sale por él se denomina *radiación del cuerpo negro*.

Necesariamente la cantidad de energía emitida en forma de radiación

electromagnética será igual a la cantidad de energía suministrada al calentar el material. En estas condiciones el sistema está en equilibrio térmico y la radiación emitida sólo dependerá de la temperatura del material.

Al gráficar la densidad de energía (energía por unidad de volumen), $\varrho(\nu)$, en función de la frecuencia se obtienen las curvas típicas de la radiación térmica (figura 2.6).

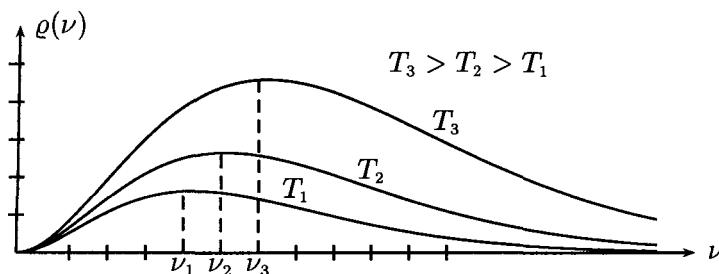


FIGURA 2.6. Curvas del espectro de la radiación del cuerpo negro.

Noten que a medida que aumenta la temperatura del cuerpo, el máximo de la densidad de energía va siendo mayor, tanto en el valor de la densidad de energía emitida, como *en el valor de la frecuencia a la que ocurre el máximo*.

De los resultados experimentales se dedujeron tres leyes empíricas, que son las siguientes:

a) Ley de Stefan-Boltzmann

En 1878 J. Stefan y L.E. Boltzmann, a partir de las curvas experimentales del espectro de la radiación del cuerpo negro, establecieron la siguiente fórmula para calcular teóricamente la energía total radiada por un cuerpo negro, que se encuentra a la temperatura absoluta T , por unidad de área y tiempo:

$$R = \frac{E}{A \cdot t} = \sigma T^4 \quad (2.3)$$

donde σ es la constante de Stefan-Boltzmann y su valor es igual a $5,67 \times 10^{-8} Wtt/(m^2 K^4)$. La energía total radiada por unidad de área y tiempo para cada temperatura es simplemente el área debajo de las curvas correspondientes en la figura 2.6. Esta energía se denomina *ra-*

diancia y su relación con la densidad de energía es:

$$R = \frac{c}{4} \int_0^{\infty} \varrho(\nu) d\nu \quad (2.4)$$

b) Ley del desplazamiento de Wien

Como se puede observar en la figura 2.6, a medida que aumenta la temperatura absoluta del cuerpo negro, el máximo de densidad de energía se va corriendo hacia frecuencias mayores. Esto es, la frecuencia para la cual la densidad de energía radiada es máxima, ν_{\max} , es proporcional a la temperatura absoluta T . Este resultado se conoce como la Ley del desplazamiento de Wien y generalmente se expresa en la siguiente forma:

$$\lambda_{\max} T = \text{constante} \quad (2.5)$$

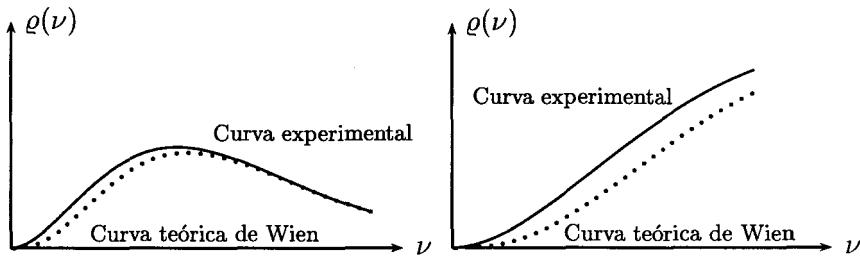
El valor de la constante se determina experimentalmente y es igual a $0,2898 \times 10^{-2} \text{ mK}$.

c) Ley de Wien

En 1893 W. Wien estableció la siguiente relación para calcular la densidad de energía radiada por un cuerpo negro en función de la frecuencia y a una temperatura dada:

$$\varrho(\nu) = \frac{c_1 \nu^3}{e^{c_2 \nu/T}} \quad (2.6)$$

donde c_1 y c_2 son dos constantes arbitrarias que se ajustan de tal manera que la curva teórica y la curva experimental coincidan lo mejor posible.



a. Todo el rango de frecuencias.

b. Bajas frecuencias.

FIGURA 2.7. Resultado teórico de Wien y curva experimental para la radiación del cuerpo negro.

Esta fórmula funciona bastante bien para frecuencias grandes; pero para frecuencias pequeñas la curva teórica se aleja de la curva experimental (figura 2.7b.).

Como ya se dijo, las tres leyes anteriores fueron deducidas empíricamente aunque para la última se utilizaron algunos elementos de la termodinámica.

Pero en 1899 por primera vez se trató de deducir las leyes que rigen el comportamiento de la radiación del cuerpo negro, a partir de las leyes físicas establecidas.

d) Ley de Rayleigh-Jeans

Para deducir la ley que rige el comportamiento de la radiación del cuerpo negro, J.W. Rayleigh y J.H. Jeans partieron de las siguientes consideraciones:

1. La física clásica debe poder describir teóricamente la distribución espectral emitida por un cuerpo negro.
2. El cuerpo negro y la radiación que emite deben estar en equilibrio térmico.
3. Al calentar un cuerpo negro, los electrones de los átomos que lo constituyen, oscilan alrededor de su posición de equilibrio y, de acuerdo con la teoría electromagnética, estas cargas en movimiento emiten radiación electromagnética de igual frecuencia a la frecuencia de oscilación.

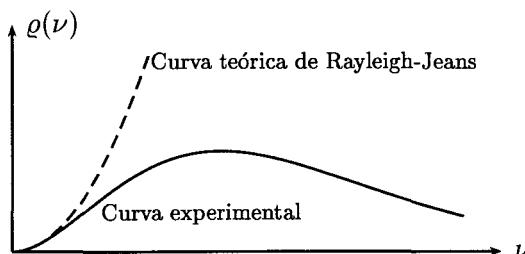


FIGURA 2.8. Curva teórica de Rayleigh-Jeans y curva experimental para la radiación del cuerpo negro.

La ley clásica de la equipartición de la energía dice que la energía promedio, \bar{e} , de cada uno de estos osciladores, mencionados en el aparte 3, que se encuentran en equilibrio térmico dentro del cuerpo negro a una temperatura T , es igual a:

$$\bar{\epsilon} = k_B T \quad (2.7)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann cuyo valor es $1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ y T la temperatura absoluta del cuerpo negro.

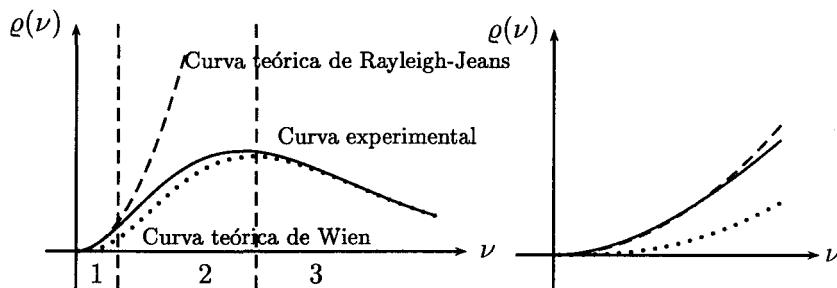
Haciendo un desarrollo matemático y teórico riguroso y teniendo en cuenta la equipartición de la energía, Rayleigh y Jeans encontraron la siguiente relación para la densidad de energía radiada por un cuerpo negro:

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} k_B T \nu^2 \quad (2.8)$$

Como podemos ver fácilmente, la fórmula anterior conduce a un resultado absurdo para frecuencias grandes.

Si la densidad de energía radiada fuera proporcional al cuadrado de la frecuencia a grandes valores de ésta, la densidad de energía sería gigantesca, lo que contradice la realidad, puesto que para $\nu \rightarrow \infty$, se tiene $\rho(\nu) \rightarrow 0$.

El resultado anterior se llama *catástrofe del ultravioleta*. Catástrofe, porque es físicamente imposible producir energías muy grandes a partir de un cuerpo negro, y del ultravioleta porque la ley de Rayleigh-Jeans falla en esa región del espectro electromagnético.



- a. Todo el rango de frecuencias. La región 1 corresponde a bajas frecuencias, la región 2 al ultravioleta, y la región 3 a altas frecuencias.

- b. Para bajas frecuencias.

FIGURA 2.9. Resultados teóricos y curva experimental para la radiación del cuerpo negro.

Como lo muestra la figura 2.8, la curva teórica y la curva experimental sólo coinciden para valores pequeños de la frecuencia; por lo tanto sólo es válida para frecuencias pequeñas.

En la figura 2.9 se encuentran resumidos en forma gráfica los resultados teóricos que se tenían a fines del siglo XIX para la radiación del cuerpo negro.

2.4 Teoría cuántica de la radiación del cuerpo negro

En 1900 Max Planck solucionó la discrepancia que se presentaba entre la teoría y los resultados experimentales para la radiación del cuerpo negro. Para ello introdujo en la física un concepto completamente diferente; acepta la hipótesis de Rayleigh-Jeans de que los electrones se comportan como osciladores armónicos, pero no acepta el principio de la equipartición de la energía para éstos osciladores, en términos de la temperatura.

El nuevo concepto introducido por Planck consta de dos postulados:

1. La energía de un oscilador debe ser siempre un múltiplo entero de una mínima cantidad de energía ϵ_0 :

$$\epsilon = n\epsilon_0 \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

2. Para osciladores de diferentes frecuencias ϵ_0 debe ser proporcional a la frecuencia de la radiación que emiten o absorben.

A partir de sus planteamientos Planck obtiene que la energía promedio de un oscilador está dada por la fórmula:

$$\bar{\epsilon} = \frac{\epsilon_0}{e^{\epsilon_0/k_B T} - 1} \quad (2.9)$$

y la densidad de energía de la radiación del cuerpo negro por la expresión:

$$\varrho(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{\epsilon_0}{e^{\epsilon_0/k_B T} - 1} \quad (2.10)$$

Comparando esta fórmula con la fórmula de la ley de Wien (que es la que más se aproxima a los resultados experimentales), sólo difieren en el factor -1 en el denominador. Si escogemos el valor de $\epsilon_0/k_B T$ de manera que sea igual al argumento de la función exponencial en la fórmula de Wien, esto es $c_2\nu/T = \epsilon_0/k_B T$, entonces:

$$\epsilon_0 = h\nu \quad (2.11)$$

donde h es una constante, llamada constante de Planck, cuyo valor es $6,63 \times 10^{-34} \text{ J s}$.

Este resultado permite entender que la radiación emitida por un cuerpo negro a una temperatura T está conformada por la emisión y absorción de energía de un ensamble grande de osciladores armónicos con frecuencias de oscilación que van desde valores muy pequeños ($\nu \rightarrow 0$) hasta valores muy grandes. Cada oscilador posee una energía proporcional a su frecuencia de oscilación, el mínimo de energía es $h\nu$ y valores mayores sólo pueden ser *múltiplos enteros* ($nh\nu$) de este valor. Al reemplazar ϵ_0 por su expresión en la fórmula de Planck, la densidad de energía toma la forma:

$$\varrho = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad (2.12)$$

La fórmula de Planck para la densidad de energía de la radiación del cuerpo negro predice correctamente los resultados experimentales. Reproduce la ley de Rayleigh-Jeans para frecuencias pequeñas y la de Wien para frecuencias grandes.

También puede reproducir las leyes de Stefan-Boltzmann y del desplazamiento de Wien.

Al reemplazar ϵ_0 por $h\nu$ en la ecuación (2.11) y considerando frecuencias pequeñas, se obtiene nuevamente la expresión clásica para la energía promedio de un oscilador. En la figura 2.10 se puede observar el comportamiento de la energía promedio en función de la frecuencia, desde el punto de vista clásico y de acuerdo con la teoría de Planck.

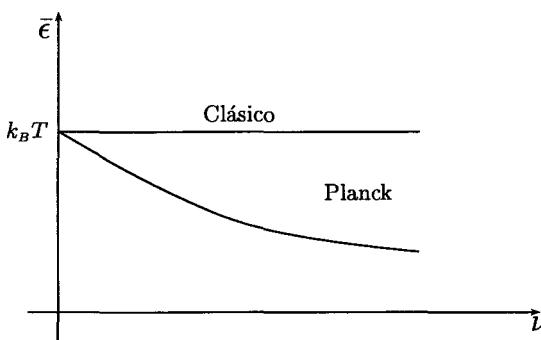


FIGURA 2.10. Energía promedio en función de la frecuencia para un oscilador.

En ocasiones se necesita la densidad de energía para la radiación del cuerpo negro en función de la longitud de onda y no de la frecuencia. Para obtenerla se procede de la siguiente manera. Por definición:

$$\varrho(\lambda)d\lambda = -\varrho(\nu)d\nu \quad (2.13)$$

de donde:

$$\varrho(\lambda) = -\varrho(\nu) \frac{d\nu}{d\lambda}$$

Como $\lambda\nu = c$, tenemos que:

$$\frac{d\nu}{d\lambda} = -\frac{c}{\lambda^2} \quad (2.14)$$

y entonces:

$$\varrho(\lambda) = \varrho\left(\nu = \frac{c}{\lambda}\right) \frac{c}{\lambda^2} \quad (2.15)$$

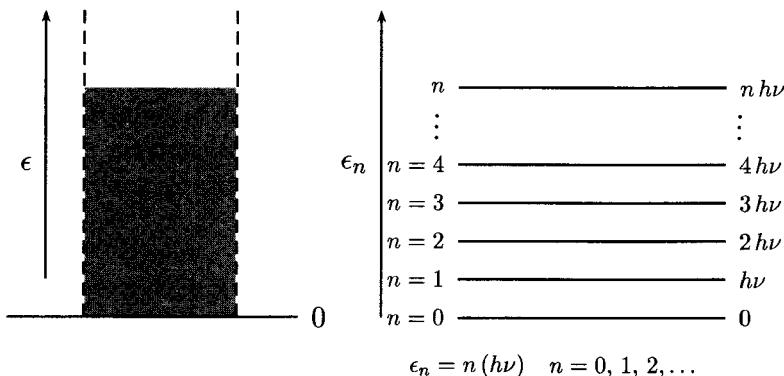
Debe notarse que, no se puede hacer simplemente $\nu = c/\lambda$, y reemplazar esto en la expresión para $\varrho(\nu)$ porque al cambiar de variable aparece un factor adicional: c/λ^2 .

La gran diferencia entre los desarrollos clásico de Rayleigh-Jeans y cuántico de Planck para el problema de la radiación del cuerpo negro, se encuentra en la forma de considerar la energía de los osciladores. Clásicamente un oscilador puede tener cualquier energía a partir de un valor cero, mientras que de acuerdo con Planck sólo puede tener ciertos valores. En el primer caso la energía es continua: todos los valores son posibles. En el segundo caso, la energía es discreta: sólo son posibles algunos valores. Este resultado se denomina *cuantización de la energía*.

Como consecuencia de la cuantización de la energía del oscilador, éste solamente puede emitir o absorber múltiplos enteros de la pequeña cantidad de energía $h\nu$, lo que representa una unidad básica de energía denominada *quantum de energía*, o *paquete de energía* o simplemente *fotón*.

Aunque la energía de un oscilador es cuantizada, en el cuerpo negro hay una cantidad muy grande de osciladores que pueden oscilar con cualquier frecuencia. De ahí que el espectro de la radiación emitida por un cuerpo negro sea un espectro continuo.

Volviendo a la energía de un oscilador, en la figura 2.11 se puede ver un gráfico de ella para los casos clásico y cuántico. Al representar cada valor posible de la energía mediante una línea, en el caso clásico no podremos ver la separación entre una línea y la siguiente ya que todos los valores son posibles (figura 2.11a.); en el caso cuántico (oscilador de Planck) existe una separación definida entre ellas y además, se encuentran igualmente espaciadas (figura 2.11b.). Cada línea representa un *estado energético* o *nivel de energía* permitido para el oscilador y el conjunto de líneas se denomina un *diagrama de niveles de energía*. El número entero n que especifica la energía de un nivel determinado se llama *número cuántico*.



a. Clásico.

b. Cuántico.

FIGURA 2.11. Representación de la energía de un oscilador.

El resultado obtenido en este numeral no tiene equivalente en la física clásica. Ahora, un oscilador (de Planck) que oscila con una frecuencia dada puede tener diferentes energías a partir de una energía mínima, pero siempre múltiplos enteros de la cantidad $h\nu$.

Hoy en día expresamos los postulados de Planck de la siguiente manera:

1. Un oscilador o cualquier sistema similar tiene un conjunto discreto de posibles valores para la energía. Valores de energía intermedios respecto a los permitidos, nunca ocurren. La energía está dada por la relación:

$$\epsilon_n = n(h\nu) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

2. La emisión o absorción de radiación por un oscilador está asociada con transiciones o saltos entre niveles permitidos de energía. La cantidad de energía emitida o absorbida será un múltiplo entero de $h\nu$, donde ν es la frecuencia de oscilación y, por consiguiente, la frecuencia de la radiación emitida.

El postulado de Planck para la cuantización de la energía abrió la puerta a la física moderna, en particular a una teoría desarrollada 25 años más tarde: la mecánica cuántica. Además, sirvió para explicar otros resultados experimentales que no concordaban con lo predicho por la física clásica, como se verá en los próximos capítulos.

Ejemplo 2.1.

En nuestro mundo macroscópico es imposible percibir la cuantización de la energía. Veamos por qué.

Consideremos un sistema formado por una masa y un resorte que oscilan armónicamente con una frecuencia de 0.5s^{-1} . Si la energía de este sistema está cuantizada, la energía de cada nivel permitido es $E_n = n h \nu$; y la diferencia de energía entre dos niveles consecutivos, $n + 1$ y n , será igual a:

$$\begin{aligned} E &= E_{n+1} - E_n = (n + 1)h\nu - nh\nu = h\nu \\ &= 6.63 \times 10^{-34} \times 0.5 \text{ J s s}^{-1} \\ &= 3.31 \times 10^{-34} \text{ J} \end{aligned}$$

Esta cantidad de energía es demasiado pequeña para que podamos detectarla. □

Ejemplo 2.2.

- a) ¿En cuánto disminuirá la masa del sol durante un año, a causa de la radiación electromagnética que emite?
- b) Suponiendo que la radiación del sol es constante, ¿cuánto tiempo tardará la masa del sol en reducirse a la mitad?

La temperatura de la superficie del sol es de 5800 K ; su masa de $1,97 \times 10^{30}\text{ kg}$ y su radio de $6,95 \times 10^8\text{ m}$.

Solución

- a) El sol puede considerarse bajo ciertas circunstancias como un cuerpo negro.

Entonces de acuerdo con la ley de Stefan-Boltzmann la cantidad de energía emitida por el sol es:

$$E = A t \sigma T^4$$

donde A es el área de la superficie solar ($4\pi R^2$) y t el tiempo considerado ($1\text{año} = 3,156 \times 10^7\text{ s}$).

Pero sabemos por la teoría de la relatividad especial, que esta cantidad de energía es equivalente a cierta cantidad de masa: E/c^2 . Por consiguiente, la cantidad de masa que pierde el sol al estar emitiendo energía será:

$$m = \frac{A t \sigma T^4}{c^2}$$

Reemplazando los datos y efectuando los cálculos correspondientes:

$$m = 1.4 \times 10^{17} \text{ Kg}$$

- b) A partir de la ley de Stefan-Boltzmann, también podemos encontrar cuánto tiempo se necesita para que la masa del sol se reduzca a la mitad.

El cambio en la masa es:

$$\Delta m = M - \frac{1}{2} M = \frac{1}{2} M$$

A este cambio de masa le corresponde un energía $E = \Delta m c^2$; entonces:

$$t = \frac{E}{A \sigma T^4} = \frac{\Delta m c^2}{A \sigma T^4}$$

Reemplazando datos y efectuando los cálculos correspondientes:

$$t = 7.21 \times 10^{12} \text{ años}$$

□

Preguntas

1. Muestre que la constante de Planck tiene unidades de momento angular.
2. ¿Cuál debería ser el valor de la constante de Planck para que se pudiera observar en nuestro mundo los efectos cuánticos?
3. ¿Qué es y qué dice la ley de la equipartición de la energía?
4. Cuando un cuerpo se enfriá, ¿qué ocurre con la longitud de onda correspondiente a la máxima energía emitida?
5. De acuerdo con los postulados de Planck, cuando un oscilador armónico emite o absorbe energía ¿qué ocurre?

Problemas

1. Demuestre que para valores pequeños de la frecuencia ($h\nu \ll k_B T$) la fórmula de Planck para la densidad de energía de la radiación del cuerpo negro conduce a la expresión correspondiente de Rayleigh-Jeans.

Muestre también que para valores grandes de la frecuencia conduce a la ley de Wien.

2. A partir de la fórmula de Planck para la densidad de energía, demuestre que la constante de Stefan-Boltzmann es igual a:

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15 c^2 h^3}$$

Ayuda: usar el cambio de variable $x = h\nu/k_B T$ y el resultado:

$$\int_0^\infty x^3(e^x - 1)^{-1} = \frac{\pi^4}{15}$$

3. A partir de la fórmula de Planck para la densidad de energía, demuestre que la longitud de onda para la cual la densidad de energía es máxima, está dada por la solución de la ecuación:

$$1 - \frac{x}{5} = e^{-x}$$

donde $x = hc/(\lambda k_B T)$. El valor de x se determina gráficamente.

Muestre que si $x = 4.9651$, la ley del desplazamiento de Wien es:

$$\lambda_{\max} T = 0.2898 \times 10^{-2} m K$$

Ayuda: el máximo de una función se obtiene igualando a cero su primera derivada. Consulte en una tabla los valores, con cuatro cifras decimales por lo menos, de las constantes involucradas.

4. Una superficie metálica de 10 cm^2 de área, se encuentra a una temperatura de 2500 K y emite durante un minuto una energía térmica de $4 \times 10^4 \text{ J}$. Encuentre: a) la energía emitida por la superficie si fuera un cuerpo negro, y b) la razón de la radiancia de esta superficie a la de un cuerpo negro de igual área y a la misma temperatura. R/: a) $1,33 \times 10^5 \text{ J}$; b) 30.2 %.
5. Se aumenta la temperatura de un cuerpo negro desde 1000 K hasta 3000 K . a) ¿Cuántas veces aumentó su radiancia? b) ¿En cuánto varió la longitud de onda a la cual la energía emitida es máxima? R/: a) 81 veces; b) $\Delta\lambda = 1.93 \mu \text{m}$.

6. La potencia de la radiación de un cuerpo negro es de 10 kW . Encuentre el área de la superficie de este cuerpo, si la longitud de onda a la cual la densidad de energía es máxima es de $7 \times 10^{-5}\text{ cm}$. R/: 6 cm^2 .
7. La temperatura de un cuerpo negro es de 2900 K . Al enfriarlo, la longitud de onda a la cual la densidad de energía radiada es máxima cambia en $9 \times 10^{-6}\text{ m}$. ¿Cuál es la temperatura final del cuerpo? R/: 290 K .
8. Una esfera ennegrecida que está a una temperatura de 27°C , se enfriá hasta alcanzar una temperatura de 20°C . ¿En cuánto variará la longitud de onda a la cual la densidad de energía es máxima? R/: $\Delta\lambda = 0,23\mu\text{m}$.
9. Si solamente el 5% de la energía disipada por un bombillo es irradiada en forma de luz visible, ¿cuántos fotones por segundo son emitidos por un bombillo de 100 W ? Suponga que la longitud de onda de la luz es de 5600\AA . R/: 14×10^{18} .

Capítulo 3

Propiedades corpusculares de la radiación

3.1 Efecto fotoeléctrico

3.1.1 Descubrimiento del efecto fotoeléctrico

Este, uno de los fenómenos más interesantes, y en cierta forma sencillo, es una manifestación del carácter corpuscular de la radiación electromagnética que se presenta cuando hay interacción entre la radiación y la materia.

El efecto fotoeléctrico fue descubierto por H. Hertz (el mismo que demostró la existencia de las ondas electromagnéticas diferentes de la luz visible), en el año de 1887 cuando realizaba ciertos experimentos con descargas eléctricas entre esferas conductoras para producir radiación electromagnética.

Cuando dos esferas conductoras se cargan eléctricamente mediante una fuente de voltaje, se observa cierta distribución de carga alrededor de ellas (figura 3.1a.) de manera que alirlas acercando una a la otra en un momento dado salta una chispa entre ellas. Es decir hay una emisión de radiación electromagnética con la consecuente descarga de las esferas (figura 3.1b.).

Durante uno de estos experimentos, por accidente, una de las esferas fue iluminada con luz ultravioleta y con gran sorpresa Hertz observó que la chispa entre las esferas se producía con mayor facilidad (figura 3.1c.). Este efecto, indeseado para los experimentos que conducía Hertz en ese momento, le impedía la detección de las ondas electromagnéticas producidas. No era necesario acercar tanto las esferas para que ocurriera la descarga eléctrica.

Algún tiempo después se demostró que la luz facilitaba la descarga de las esferas haciendo que fueran emitidos electrones por la superficie conductora sobre la cual incidía.

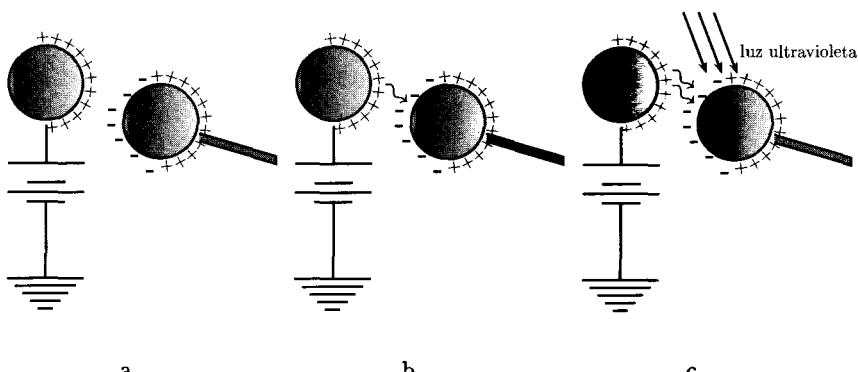


FIGURA 3.1. Representación esquemática del efecto fotoeléctrico.

La emisión de electrones por efecto de la radiación electromagnética sobre la materia se denomina *efecto fotoeléctrico* y los electrones emitidos de esta manera se llaman *fotoelectrones*.

Se necesitó casi veinte años para recolectar una gran cantidad de resultados experimentales, que recopilaron completamente y sin ninguna explicación teórica las características fundamentales de este efecto.

3.1.2 Resultados experimentales del efecto fotoeléctrico

En la figura 3.2 se encuentra un esquema del dispositivo experimental para el estudio del efecto fotoeléctrico.

Dentro de un recipiente de vidrio en el cual se ha hecho el vacío, se colocan una placa metálica M y una segunda placa C que hará de colector de partículas cargadas. Cuando un haz monocromático de radiación electromagnética incide sobre la placa M se produce desprendimiento de electrones de ella. Si existe una diferencia de potencial V entre el colector C y la placa M , siendo positivo el colector, los electrones serán acelerados hacia él y en el galvanómetro G se registrará el paso de una corriente, llamada *fotocorriente* (i).

Pero si se aplica un voltaje negativo al colector, lo cual se consigue al conmutar el interruptor que invierte la polaridad de los electrodos, los fotoelectrones serán repelidos y únicamente llegarán a él aquellos cuya energía cinética sea mayor que eV . Y el galvanómetro registrará el paso de corriente. La dirección de la fotocorriente, (i) en la figura 3.2, sigue la convención del movimiento de las cargas positivas. Aumentando negativamente el potencial acelerador, llegará un momento en que para

un voltaje $-V_0$ los fotoelectrones ya no podrán alcanzar el colector y la photocorriente será nula. Este voltaje se denomina *contravoltaje* o *voltaje de frenado*.

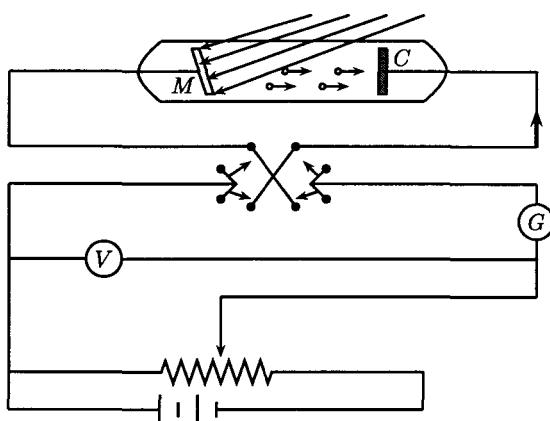


FIGURA 3.2. Esquema del arreglo experimental para observar un efecto fotoeléctrico.

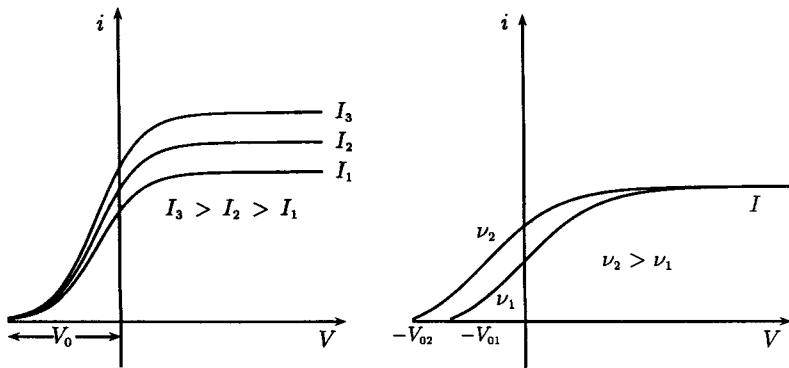
Con el arreglo experimental mostrado en la figura 3.2 se pudo establecer una serie de hechos que veremos a continuación.

- De acuerdo con la clase de material utilizado para la placa M existe una frecuencia mínima ν_0 de la radiación incidente, llamada *frecuencia umbral*, para que se produzca el desprendimiento de electrones de esta placa. Dependiendo del material de la placa M se necesitará que la radiación incidente tenga una frecuencia mínima para que en el galvanómetro se observe el paso de corriente, hecho que indica que tiene lugar el efecto fotoeléctrico. Si la radiación incidente tiene una frecuencia menor que la frecuencia umbral para el material dado, no habrá efecto fotoeléctrico.

Al graficar la photocorriente en función del voltaje acelerador (positivo o negativo) se obtienen las gráficas mostradas en la figura 3.3a. y 3.3b.. En el primer caso la frecuencia de la radiación incidente se mantiene constante y se varía su intensidad I . En el segundo caso, la intensidad de la radiación es constante y se varía su frecuencia.

De estas gráficas se establecieron los siguientes hechos:

- Al incrementar el valor del potencial acelerador V , llega un momento en que la photocorriente alcanza un valor constante que no



a. Radiación incidente de frecuencia constante y diferentes intensidades I .

b. Radiación incidente de diferentes frecuencias pero igual intensidad.

FIGURA 3.3. Fotocorriente en función del voltaje acelerador.

depende del potencial acelerador. Esta corriente es la *corriente de saturación* para una intensidad dada de la radiación incidente (figura 3.3a. y 3.3b.).

- c) La fotocorriente de saturación es proporcional a la intensidad de la radiación incidente; a mayor intensidad, mayor fotocorriente. El contravoltaje, por otra parte, permanece constante, resultado que muestra que *no depende de la intensidad de la radiación* (figura 3.3a.).
- d) El contravoltaje depende de la frecuencia de la radiación incidente: a mayor frecuencia, mayor es el contravoltaje necesario para que la fotocorriente sea nula (figura 3.3b.).

Al graficar los contravoltajes en función de la frecuencia de la radiación incidente, para un material dado, se obtiene una línea recta. Al repetir el experimento para diferentes materiales de la placa M se obtiene una serie de líneas rectas (figura 3.4), *todas con la misma pendiente*. La ecuación de estas líneas es, por lo tanto:

$$|V_0| = a\nu + b \quad (3.1)$$

donde a es la pendiente de las rectas y b un parámetro que depende de cada material como se puede ver de la gráfica.

El punto de corte de cada recta con el eje horizontal es el valor de la frecuencia umbral para cada material.

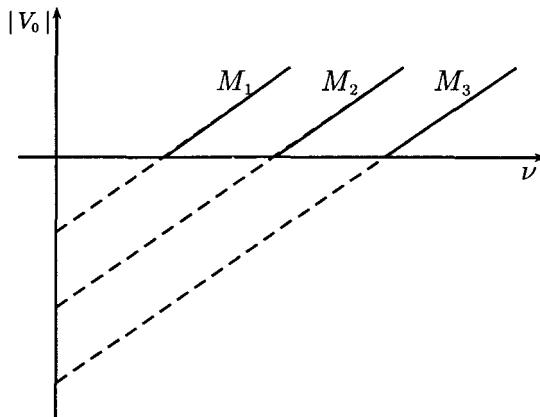


FIGURA 3.4. Dependencia del contravoltaje con la frecuencia para diferentes materiales.

Pero $|V_0|$ es también la medida de la máxima energía cinética de los fotoelectrones emitidos puesto que, para este potencial el campo eléctrico entre los electrodos del tubo es tal que la fuerza que actúa sobre ellos ya no permite que lleguen al colector.

Multiplicando la ecuación (3.1) por la carga del electrón obtenemos una ecuación para la energía cinética máxima de los fotoelectrones emitidos por un material M cuando sobre él incide una radiación electromagnética de frecuencia ν , $\nu > \nu_0$:

$$K_{\max} = \frac{1}{2} mv^2 = e |V_0| = A\nu + B \quad (3.2)$$

- e) El resultado obtenido en la ecuación (3.2) muestra que la energía cinética máxima de los fotoelectrones no depende de la intensidad de la radiación incidente.

3.1.3 Explicación clásica del efecto fotoeléctrico

Antes de ver qué puede o no puede explicar la física clásica, debemos formular un modelo que muestre cómo es la interacción de un campo electromagnético con un material.

Tal modelo nos permitirá discernir de acuerdo con la física clásica cuál es el mecanismo de la interacción entre radiación electromagnética (que no es más que la manifestación ondulatoria de un campo eléctrico y un campo magnético perpendiculares entre sí que oscilan) con las partículas cargadas del material, en este caso electrones.

La teoría ondulatoria requiere que el vector campo eléctrico de la radiación electromagnética aumente en amplitud a medida que aumenta la intensidad de la radiación y la relación entre estas cantidades es:

$$I \propto |\vec{E}_0|^2 \quad (3.3)$$

donde \vec{E}_0 es la amplitud del campo eléctrico oscilante.

La experiencia diaria nos enseña que los electrones no se escapan del material que los contiene. Esto es, si salen de él es porque obtuvieron, de alguna manera, la energía suficiente para hacerlo. Veamos que ocurre.

Al incidir radiación electromagnética sobre un electrón, la teoría electromagnética predice una interacción electrostática entre la carga del electrón y el campo oscilante, la cual se manifiesta por una fuerza que hace oscilar al electrón alrededor de su posición de equilibrio, con una amplitud proporcional a la amplitud de la oscilación de la radiación incidente.

De esta manera el electrón adquiere la energía necesaria para liberarse. Si A_e es la amplitud de oscilación del electrón, entonces:

$$A_e \propto |\vec{E}_0| \propto I^{1/2} \quad (3.4)$$

Como la energía de un oscilador es proporcional al cuadrado de la amplitud de oscilación, tenemos que de acuerdo con la teoría clásica:

$$K \propto I \quad (3.5)$$

Con lo expuesto anteriormente, podemos comprobar si los resultados experimentales confirman o no las predicciones de la física clásica.

Inmediatamente vemos que la física clásica no puede explicar los resultados *d*) y *e*) ya que clásicamente la energía cinética de los fotoelectrones depende de la intensidad de la radiación incidente y *no* de la frecuencia de la misma.

Los resultados *b*) y *c*) tampoco pueden ser explicados clásicamente. La photocorriente es una medida del número de fotoelectrones que por unidad de tiempo llegan al colector. Los resultados empíricos resumidos en *c*) muestran que la photocorriente es proporcional a la intensidad de la radiación incidente, mientras que clásicamente el efecto de la intensidad de la radiación que incide sobre la placa metálica se manifiesta sobre la energía cinética de los fotoelectrones emitidos pero *no* sobre el número de ellos.

El mismo argumento puede emplearse para la saturación de la photocorriente (resultado *b*), puesto que para voltajes aceleradores suficientemente grandes, el número de electrones eyectados por la placa por unidad de tiempo es constante para una intensidad dada de la radiación.

Experimentalmente se evidencia, entonces, una relación entre el número de fotoelectrones con la intensidad de la radiación utilizada.

El resultado *a*) tampoco tiene explicación clásica. Si la frecuencia de la radiación es pequeña, pero su amplitud de oscilación grande, después de un tiempo determinado el electrón habrá adquirido suficiente energía para liberarse. Por lo tanto, clásicamente el efecto fotoeléctrico puede ocurrir para cualquier frecuencia de la radiación incidente, siempre y cuando la intensidad de la misma sea suficientemente grande.

Finalmente, hay otro resultado experimental que no puede explicar la física clásica cual es la emisión instantánea de fotoelectrones al incidir radiación electromagnética sobre el material. Clásicamente debe transcurrir cierto intervalo de tiempo, medible, entre el instante en que incide la radiación sobre el material y la emisión por éste de fotoelectrones.

Debieron pasar casi 20 años antes que se pudiera explicar adecuadamente los resultados experimentales anteriores.

3.1.4 Explicación cuántica del efecto fotoeléctrico

En 1905 A. Einstein logra explicar correctamente los resultados experimentales del efecto fotoeléctrico, al proponer una idea completamente revolucionaria, pero sencilla, de cuál debe ser el comportamiento de la radiación electromagnética.

Einstein adopta la hipótesis de Planck, enunciada para la radiación del cuerpo negro, y la generaliza a toda la radiación electromagnética. Supone que *una radiación electromagnética de frecuencia ν está constituida por pequeños paquetes de energía cada uno de los cuales porta un cuantos de energía (fotón) cuyo valor es proporcional a la frecuencia de la radiación.*

Por consiguiente, en el efecto fotoeléctrico tenemos un proceso de colisión inelástica entre dos partículas, un fotón y un electrón, en el cual el fotón cede toda su energía al electrón. Recuérdese que el electrón está ligado al material.

Si el electrón absorbe un fotón de energía $h\nu$, para poder desprenderse del material debe superar una cierta cantidad de energía que lo mantiene ligado a él, denominada *función de trabajo ϕ_0* . Esta cantidad es propia de cada material.

Entonces, por simples argumentos de conservación de la energía, la máxima energía cinética que puede tener un electrón al salir del material será:

$$K_{\max} = h\nu - \phi_0 \quad (3.6)$$

Comparando las ecuaciones 3.2 y 3.6 se observa que la constante A es igual a la constante de Planck y la constante B es igual a la función

de trabajo del material. Aunque la constante de Planck aparece por primera vez para la radiación del cuerpo negro, es mediante un experimento de efecto fotoeléctrico que se determina su valor.

Con la hipótesis cuántica para la radiación electromagnética se asegura que la intensidad de la radiación será mayor cuanto mayor sea el número de fotones por unidad de volumen que contenga. Así se entiende por qué, cuando la intensidad de la radiación aumenta, es mayor la emisión de fotoelectrones y por lo tanto, la corriente fotoeléctrica (resultado c).

Cuando por efecto de intercambios energéticos entre un fotón y un electrón ligado al material, éste logra desprendérse de la superficie pero queda en reposo (energía cinética nula), el fotón le habrá suministrado una cantidad de energía igual a la función de trabajo del material. Por consiguiente, el fotón tenía una energía mínima:

$$h\nu_0 = \phi_0 \quad (3.7)$$

donde ν_0 se debe haber reconocido como la *frecuencia umbral* (resultado a).

Esta hipótesis también explica la no existencia de un intervalo de tiempo entre la llegada de la radiación sobre el material y la emisión de fotoelectrones, ya que el proceso es simplemente una colisión entre dos partículas como ya habíamos dicho: el fotón choca contra el electrón y lo saca del material, siempre y cuando su energía sea suficiente para que se produzca su emisión.

La generalización de los postulados de Planck a toda la radiación electromagnética hecha por Einstein logró explicar correctamente los resultados experimentales del efecto fotoeléctrico y sentó las bases fundamentales de la física moderna:

La radiación electromagnética manifiesta propiedades corpusculares en donde la energía está cuantizada. Cada cuanto de energía se llama fotón y porta una cantidad de energía igual a $h\nu$ donde ν es la frecuencia del campo electromagnético oscilante.

Ejemplo 3.1.

Una lámina de potasio se encuentra a 3 m de un fuente de luz cuya potencia es de 1 W. Si suponemos que un electrón del metal puede tomar su energía de un área circular alrededor de él, de $0.5 \times 10^{-10} \text{ m}^2$ de radio (radio atómico), desde el punto de vista clásico ¿cuánto tiempo necesitará para absorber la energía suficiente que le permita liberarse? Para sacar un electrón del potasio se necesita una cantidad de energía igual a 1.8 eV.

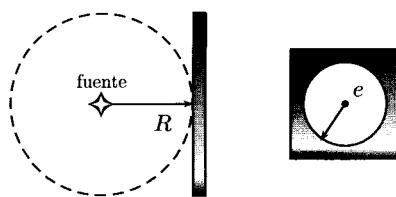


FIGURA 3.5. Lámina de potasio irradiada por una fuente de luz.

Solución

La fuente irradia en todas direcciones y la energía que emite se distribuye uniformemente sobre el frente esférico de la onda. Por consiguiente, la intensidad de la radiación que incide sobre la lámina de potasio es:

$$I = \frac{\text{potencia de la fuente}}{\text{área}} = \frac{P_f}{4\pi R^2}$$

donde el área considerada es la superficie esférica que rodea a la fuente.

La potencia que llega a la superficie de donde el electrón toma la energía que necesita para liberarse es:

$$P_e = I \times \text{área que rodea al electrón} = I\pi r^2 = \frac{P_f r^2}{4R^2}$$

Conocida la cantidad de energía por unidad de tiempo que llega al electrón y la cantidad de energía que debe acumular para liberarse (E), el tiempo que necesitará para ello será:

$$t = \frac{E}{P_e} = \frac{4ER^2}{P_f r^2}$$

Reemplazando datos y efectuando las operaciones se obtiene:

$$t \approx 67 \text{ minutos}$$

□

Ejemplo 3.2.

El contravoltaje en un efecto fotoeléctrico, para una superficie iluminada con luz de longitud de onda de 4910 \AA , es de 0.71 V . Cuando se cambia

la luz incidente el contravoltaje pasa a 1.43 V. ¿Cuál es la nueva longitud de onda de la luz incidente?

Solución

La relación entre el contravoltaje y la longitud de onda en cada caso es:

$$e |V_{0i}| = \frac{hc}{\lambda_i} - \phi_0 \quad \text{y} \quad e |V_{0f}| = \frac{hc}{\lambda_f} - \phi_0$$

siendo la función de trabajo la misma en ambos casos. De este par de ecuaciones se obtiene que:

$$e (|V_{0f}| - |V_{0i}|) = hc \left(\frac{1}{\lambda_f} - \frac{1}{\lambda_i} \right)$$

de donde:

$$\lambda_f = \frac{hc}{e (|V_{0f}| - |V_{0i}|) + hc/\lambda_i}$$

La constante hc es aproximadamente igual 12430 eV-Å. Debe recordarse que para el electrón, su energía en electrón-voltios es numéricamente igual al potencial que lo acelera (definición de la unidad de electrón-voltio). Reemplazando datos y efectuando las operaciones necesarias el resultado es:

$$\lambda_f = 3823 \text{ Å}$$

□

3.1.5 Notas adicionales sobre el efecto fotoeléctrico

En el desarrollo anteriormente realizado sobre el efecto fotoeléctrico hay algunas consideraciones de orden teórico y experimental que es necesario aclarar. Debido a la complejidad del tema, aquí solamente daremos una idea general acerca de ellas.

a) Energía necesaria para liberar un electrón del material

Como es bien sabido, todos los materiales están constituidos de átomos y dependiendo del tipo que tengan se caracteriza el material. Por ejemplo, el cobre está formado por átomos de cobre que se encuentran colocados en sitios muy precisos en el metal, formando lo que se denomina una estructura cristalina. Teniendo

en cuenta que los electrones están ligados a los núcleos atómicos, examinaremos el proceso para que uno de ellos se libere del material.

Cuando un fotón incide sobre el material, le cede a un electrón la energía necesaria para vencer la atracción que sobre él ejerce el núcleo y además, salir a la superficie del material a través de los demás átomos distribuidos espacialmente en él. La primera energía se llama *energía de ionización* y la segunda es propiamente *la función de trabajo*.

Cuando el material es conductor de la corriente eléctrica, existe una gran cantidad de electrones muy débilmente ligados a los núcleos atómicos y por ello son buenos conductores. Si este es el caso, el fotón incidente cede energía al menos en cantidad igual a la función de trabajo. Esta última consideración fue la desarrollada en el texto.

b) *Potencial de contacto*

Cuando dos materiales se juntan o se ponen en contacto el uno cerca al otro, se establece una diferencia de potencial entre ellos llamada *potencial de contacto*, cuyo valor puede estar comprendido entre cero y diez voltios aproximadamente.

Una característica fundamental de todo material es la llamada energía de Fermi. Cuando dos materiales de diferente energía de Fermi están próximos se crea un potencial de contacto. Si no se tiene en cuenta este potencial se estará introduciendo un error sistemático en la medición de la energía máxima de los fotoelectrones. Sin embargo, cuando los materiales de los electrodos (placa *M* y *C* en la figura 3.2) son de la misma substancia, obviamente tendrán la misma energía de fermi y no habrá potencial de contacto. Esta suposición se tuvo en cuenta implícitamente a través de todo el desarrollo en el texto.

c) *Fotocorriente*

La fotocorriente producida en un efecto fotoeléctrico es del orden de $10^{-10} A$, lo cual es una cantidad muy pequeña y por lo tanto difícil de medir desde el punto de vista experimental. Entonces, se introduce un amplificador de corrientes que permite hacer mediciones proporcionales a un factor de 10^6 , por ejemplo. En la figura 3.2 estamos suponiendo que en el galvanómetro hay un amplificador de corriente.

3.2 Efecto Compton

3.2.1 Descubrimiento del efecto Compton

A pesar del éxito de la teoría corpuscular de la radiación para explicar el efecto fotoeléctrico, todavía se dudaba de su generalidad como para ser considerada como una descripción cierta para las ondas electromagnéticas. Además, entre los científicos que no la aceptaban del todo se encontraba Planck, su iniciador.

En 1923 A.H. Compton observó un nuevo fenómeno que vino a ser la prueba definitiva para la confirmación experimental de la naturaleza corpuscular de la radiación electromagnética; por ello se conoce como *efecto Compton*.

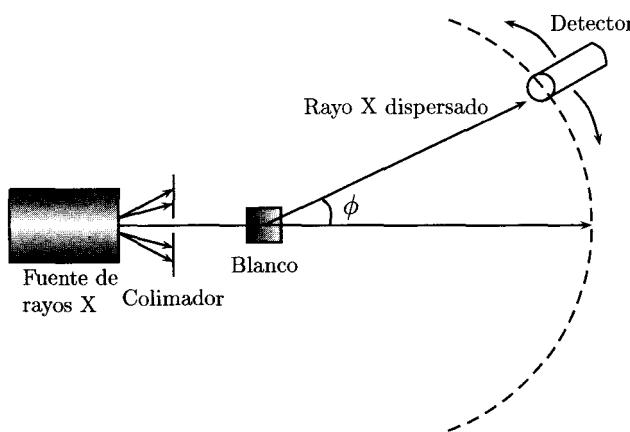


FIGURA 3.6. Esquema del dispositivo experimental para observar el efecto Compton.

El experimento realizado por Compton fue el siguiente: hizo incidir un haz de rayos *X* monocromáticos (radiación electromagnética de gran energía y una sola frecuencia) sobre un blanco de grafito donde era dispersado por él a diferentes ángulos con respecto a su dirección incidente (figura 3.6)¹.

Del experimento se obtuvieron los siguientes resultados:

- a) A pesar de que el haz incidente era monocromático, el haz dispersado presenta dos longitudes de onda (o frecuencias): la original (λ_0) y otra mayor (λ) en la cantidad $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$, llamada *corrimiento de Compton*.

¹El colimador, en la figura 3.6, garantiza la selección de la dirección del haz de rayos *X* incidente en el blanco.

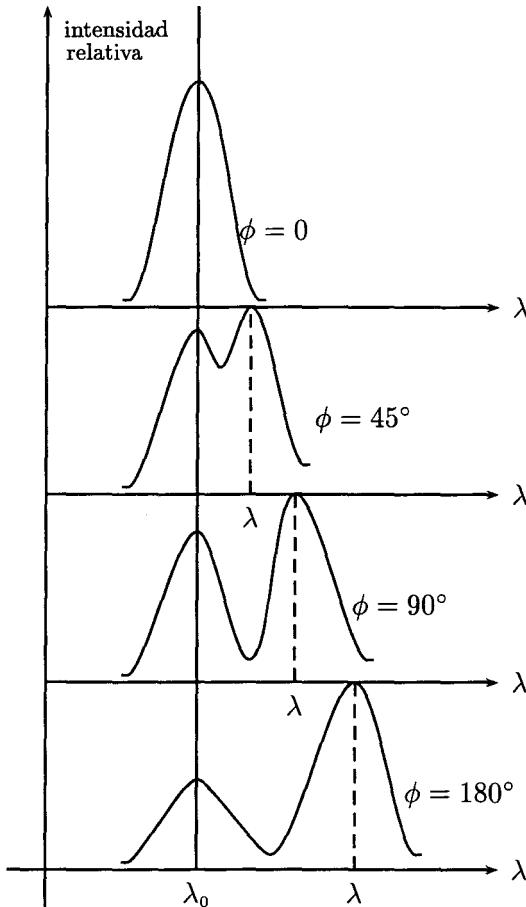


FIGURA 3.7. Corrimiento de Compton para diferentes ángulos de dispersión.

- b) El corrimiento de Compton, $\Delta\lambda$, crece hasta un valor máximo para luego disminuir a medida que el ángulo de dispersión (ϕ en la figura 3.6) aumenta. Es decir, la longitud de onda de la onda dispersada depende del ángulo de dispersión. Este resultado se cumple para cualquier material dispersor. Esto es, la longitud de onda de la onda dispersada no depende del material usado como blanco.

Los resultados anteriores se encuentran representados en la figura 3.7.

La presencia de la segunda longitud de onda, mayor que la inicial, en el haz de rayos X dispersados, *no* se puede explicar a partir de la teoría clásica.

En el numeral anterior vimos que un modelo que de la interacción radiación-materia es poner a oscilar los electrones del material con la

misma frecuencia de la radiación y una amplitud proporcional a la amplitud de la radiación incidente.

Como la partícula que oscila tiene carga eléctrica, la teoría electromagnética nos dice que debe emitir radiación electromagnética de igual frecuencia a la de su oscilación. Por consiguiente, la longitud de onda (o la frecuencia) del haz dispersado por el material debe ser la misma que la del haz incidente, y *no mayor* como se observa en el efecto Compton.

3.2.2 Teoría cuántica del efecto Compton

Desde el punto de vista de la teoría corpuscular de la radiación electromagnética, los rayos *X* son fotones de energía $h\nu$ y cantidad de movimiento $h\nu/c$. Por lo tanto, al incidir los fotones sobre el material blanco se realizan colisiones entre estos y los electrones.

Como consecuencia el fotón cede parte de su energía y emerge con una energía menor, o sea, una longitud de onda mayor. (¿Qué clase de colisión tuvo lugar?)

Como la longitud de onda del fotón dispersado no depende del material utilizado como blanco, Compton supuso que la colisión tenía lugar entre un fotón y un solo electrón libre y en reposo. Esta suposición es aceptable porque la energía de un fotón de rayos *X* es considerablemente mayor que la energía que mantiene unido un electrón al material.

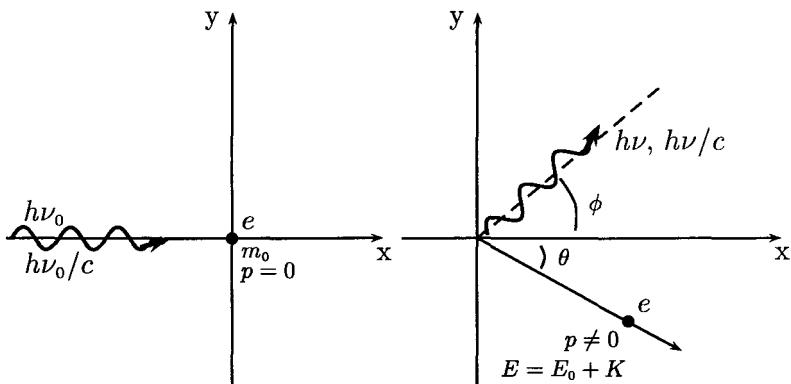


FIGURA 3.8. Esquema de la colisión entre un fotón y un electrón. $h\nu_0$ y $h\nu$ son respectivamente la energía inicial y final del fotón; m_0 es la masa en reposo del electrón, p su cantidad de movimiento y K su energía cinética; θ y ϕ representan los ángulos de dispersión, para el electrón y el fotón, respectivamente.

Consideremos entonces una colisión entre un fotón y un electrón libre inicialmente en reposo. Nuestro objetivo es obtener una expresión que

permite calcular teóricamente el corrimiento de Compton y así comprobar si la hipótesis cuántica de la radiación electromagnética es correcta, al confrontar lo que predice la teoría cuántica con los resultados experimentales. En la figura 3.8 se encuentra el diagrama correspondiente.

Por las leyes de conservación de la cantidad de movimiento y la energía total, tenemos que:

$$\frac{\vec{h\nu_0}}{c} = \frac{\vec{h\nu}}{c} + \vec{mv} \quad (3.8)$$

$$h\nu_0 + m_0 c^2 = h\nu + m c^2 \quad (3.9)$$

donde ν_0 es la frecuencia de los rayos X incidentes y ν la frecuencia de los rayos X dispersados; m_0 es la masa en reposo del electrón y m su masa relativista después de la colisión, durante la cual adquirió una velocidad v . En la figura 3.9 se encuentra el diagrama vectorial para la conservación de la cantidad de movimiento (ecuación (3.8)).

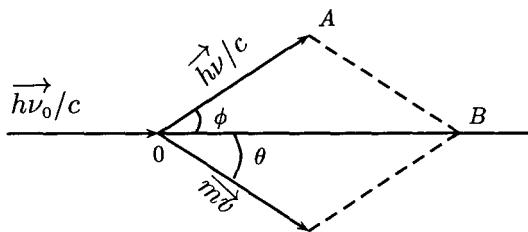


FIGURA 3.9. Diagrama vectorial para el análisis de la conservación de la cantidad de movimiento.

De acuerdo con el diagrama de la figura 3.9, y considerando el triángulo OAB tenemos que:

$$(mv)^2 = \frac{(h\nu_0)^2}{c^2} + \frac{(h\nu)^2}{c^2} - 2 \frac{h\nu_0}{c} \frac{h\nu}{c} \cos \phi \quad (3.10)$$

o, lo que es lo mismo:

$$m^2 v^2 c^2 = h^2 \nu_0^2 + h^2 \nu^2 - 2h^2 \nu_0 \nu \cos \phi \quad (3.11)$$

Elevando al cuadrado la ecuación (3.9):

$$m^2 c^4 = h^2 \nu_0^2 + h^2 \nu^2 - 2h^2 \nu_0 \nu + m_0^2 c^4 + 2hm_0 c^2 (\nu_0 - \nu) \quad (3.12)$$

Restando de la ecuación (3.12), la ecuación (3.11) es más fácil:

$$m^2 c^4 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = m_0^2 c^4 - 2h^2 \nu_0 \nu (1 - \cos \phi) + 2hm_0 c^2 (\nu_0 - \nu) \quad (3.13)$$

Pero el término de la izquierda de la ecuación anterior no es más que $(m_0 c^2)^2$; entonces:

$$c(\nu_0 - \nu) = \frac{h}{m_0 c} \nu_0 \nu (1 - \cos \phi)$$

o su equivalente:

$$\frac{c}{\nu} - \frac{c}{\nu_0} = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \phi) \quad (3.14)$$

Como $c/\nu = \lambda$ y $c/\nu_0 = \lambda_0$, la ecuación anterior es también:

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \phi) \quad (3.15)$$

La cantidad $h/m_0 c$, que tiene dimensiones de longitud, es una constante denominada *longitud de onda de Compton*, λ_c , que para el electrón es igual a 0.02424 Å.

La ecuación (3.15) permite calcular teóricamente el corrimiento de Compton y muestra que efectivamente $\Delta\lambda$ depende solamente del ángulo de dispersión ϕ . Además, muestra que el corrimiento de Compton aumenta con el ángulo de dispersión hasta alcanzar un máximo valor para $\phi = 180^\circ$ y luego disminuye, tal como lo muestra el resultado experimental.

La ecuación para la conservación de la energía total nos da un resultado importante: expresando mc^2 en términos de la energía en reposo y la energía cinética del electrón, después de la colisión, se obtiene que:

$$h\nu_0 - h\nu = K \quad (3.16)$$

Esto es, la energía perdida por el fotón durante la colisión se transforma en energía cinética del electrón.

En 1927 se comprobó experimentalmente el valor de la energía cinética del electrón en movimiento por efecto Compton, el cual se había deducido teóricamente usando la expresión (3.16).

Los resultados anteriores que explican correctamente los resultados experimentales del efecto Compton, y a su vez son una comprobación de la naturaleza corpuscular de la radiación electromagnética, no dicen,

sin embargo, por qué se detecta en el haz dispersado la longitud de onda del haz incidente.

En términos sencillos, la explicación es la siguiente: si el fotón choca contra un electrón muy ligado al núcleo éste ya no es libre y el proceso de colisión ocurre más bien con el átomo. Pero en este caso la masa involucrada es mucho más grande y el corrimiento de Compton es prácticamente nulo; por lo tanto el fotón dispersado emerge con la misma longitud de onda que antes de la colisión. El proceso en el cual los fotones son dispersados sin que se altere su longitud de onda se conoce como *dispersión de Thomson*, quien desarrolló la teoría clásica de la dispersión de los rayos X por átomos y donde se presenta este hecho. La dispersión de Thomson es un caso en que la teoría clásica y la teoría cuántica conducen al mismo resultado.

Ejemplo 3.3.

Cuando un fotón de longitud de onda $\lambda_0 = 0.024 \text{ \AA}$ incide sobre un blanco, el fotón dispersado se detecta para un ángulo de dispersión de 60° . Encuentre:

- La longitud de onda del fotón dispersado.*
- La energía cinética del electrón.*
- Si el blanco es un átomo de carbono, ($^{12}\text{C}_6$; $m = 2 \times 10^{-26} \text{ kg}$), el corrimiento de Compton.*

Solución

- De la ecuación (3.15) tenemos que:*

$$\Delta\lambda = 0.024 \text{ \AA} (1 - \cos 60^\circ) = 0.012 \text{ \AA}$$

y la longitud de onda del fotón dispersado será:

$$\lambda = \Delta\lambda + \lambda_0 = 0.012 \text{ \AA} + 0.024 \text{ \AA} = 0.036 \text{ \AA}$$

- La energía cinética adquirida por el electrón está dada por la relación:*

$$\begin{aligned} K &= h(\nu_0 - \nu) = hc \left(\frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda} \right) = hc \left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0 \lambda} \right) \\ &= hc \left[\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0(\lambda_0 + \Delta\lambda)} \right] \end{aligned}$$

Reemplazando datos y efectuando los cálculos, se obtiene:

$$K = 0.172 \times 10^6 \text{ eV}$$

- c) Si el blanco es un átomo de carbono, la longitud de onda de Compton en este caso es:

$$\lambda_{C'} = \frac{h}{m_C c} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J-s}}{2 \times 10^{-26} \times 3 \times 10^8 \text{ Kg-m/s}} = 11.04 \times 10^{-17} \text{ m}$$

y el corrimiento Compton será igual a:

$$\Delta\lambda = \lambda_{C'}(1 - \cos 60^\circ) = \frac{1}{2} \lambda_{C'} = 5.52 \times 10^{-7} \text{ \AA}$$

Comparando los resultados obtenidos en las partes a) y c), el corrimiento de Compton para esta última es 10^5 veces menor. Por lo tanto, en general, cuando el proceso tiene lugar entre fotones y átomos podemos considerar nulo el corrimiento de Compton.

□

Preguntas

1. ¿Por qué la fotocorriente es proporcional a la intensidad de la radiación electromagnética aún desde el punto de vista clásico?
2. En el efecto fotoeléctrico, al incidir radiación electromagnética sobre un electrón ¿con qué frecuencia oscilará?
3. ¿Qué representa la función de trabajo?
4. ¿Es posible que por medio de un efecto fotoeléctrico un electrón quede en reposo sobre la superficie del metal? Explique.
5. ¿Cómo es la relación entre la frecuencia umbral y la función de trabajo? ¿Cree usted que se está haciendo una pregunta lógica y bien relacionada?
6. Según la teoría cuántica del efecto fotoeléctrico, cómo se explica: a) la frecuencia umbral; b) la independencia de la máxima energía cinética respecto a la intensidad de la radiación incidente; c) la intensidad de la radiación incidente.
7. Si el electrón no estuviese ligado al material, ¿se daría el efecto fotoeléctrico? Explique.
8. Según la teoría cuántica de la radiación electromagnética, ¿cómo es una luz más o menos intensa?

9. Cuando se dice que una radiación es altamente energética, se está afirmando que:
- Contiene un gran número de fotones por unidad de volumen.
 - Viaja con mayor velocidad que la de la luz.
 - Su longitud de onda es grande.
 - Su frecuencia es muy grande.
10. ¿Cuál es la dirección de un electrón dispersado por efecto Compton con la máxima energía cinética, comparada con la dirección del fotón incidente?
11. ¿Esperaría usted observar efecto Compton más fácilmente con blancos cuyos átomos tienen a) alto número atómico? o b) bajo número atómico?
 (bajo [alto] número atómico significa que los átomos se encuentran al principio [final] de la tabla periódica).
12. ¿Por qué en el efecto Compton, $\Delta\lambda$ es independiente del material del blanco? Explique.

Problemas

- Determine: a) la energía; b) la masa relativista y c) la cantidad de movimiento de un fotón, sabiendo que su longitud de onda es de 0.016 \AA . R/: a) $1.24 \times 10^{-13} \text{ J}$; b) $1.3 \times 10^{-30} \text{ kg}$; c) $4 \times 10^{-22} \text{ kg-m/s}$.
- El umbral fotoeléctrico característico de cierto metal es de 2750 \AA . Encuentre:
 - El trabajo necesario para extraer un electrón del metal;
 - la máxima velocidad de los fotonelectrones liberados por luz de longitud de onda de 1800 \AA ;
 - la energía cinética máxima de los fotonelectrones.
 R/: a) 4.52 eV ; b) $9.15 \times 10^5 \text{ m/s}$; c) 2.38 eV .
- Al producirse efecto fotoeléctrico con platino, el contravoltaje resultó ser de 0.8 V . Encuentre:
 - La longitud de onda de la radiación utilizada.
 - La longitud de onda máxima con la cual se puede conseguir efecto fotoeléctrico con este material. La función de trabajo del platino es de 5.3 eV .

R/: a) 2038 Å; b) 2345 Å.

4. Fotones de 4.9 eV de energía liberan electrones de un metal realizando un trabajo de 4.5 eV . Encuentre la máxima cantidad de movimiento que se transmite a la superficie del metal cada vez que se desprende un electrón. R/: $3.41 \times 10^{-25} \text{ kg}\cdot\text{m/s}$.
5. La longitud de onda umbral para la emisión fotoeléctrica en tungsteno es de 2300 Å. ¿Cuál debe ser la longitud de onda de la radiación incidente para que los fotoelectrones tengan una energía cinética máxima de 1.5 eV ? R/: 1801 Å.
6. Cuando se ilumina una superficie metálica con radiación de diferentes longitudes de onda, los contravoltajes de los fotoelectrones emitidos son los siguientes:

$\lambda(10^{-7} \text{ m})$	3.66	4.05	4.36	4.92	5.46	5.79
$ V_0 $ (volt)	1.48	1.15	0.93	0.62	0.36	0.24

Haga una gráfica del voltaje en función de la frecuencia y a partir de ella encuentre:

- (a) La frecuencia umbral;
- (b) la función de trabajo del material;
- (c) la razón h/e ;
- (d) el valor de la constante de Planck.
7. Una celda fotoeléctrica tiene el cátodo de wolframio (placa M en la figura 3.2) y el colector de plata, de manera que entre ellos existe un potencial de contacto de 0.6 V . Si la celda fotoeléctrica se ilumina con radiación de longitud de onda igual a $2.3 \times 10^{-7} \text{ m}$:
- (a) ¿Qué contravoltaje habrá que aplicar entre los electrodos para que la photocorriente sea nula?
- (b) ¿Cuál será la velocidad de los fotoelectrones emitidos si entre los electrodos no se aplica una diferencia de potencial externa?
- (c) Si entre los electrodos se aplica un contravoltaje de 1 V , ¿qué longitud de onda debe tener la radiación incidente para que comience a producirse efecto fotoeléctrico?

La función de trabajo del wolframio es 4.5 eV .

Ayuda: consulte el numeral 3.1.5.

R/: a) 1.5 V ; b) $7.26 \times 10^5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$; c) 2537 Å.

8. Un rayo X de longitud de onda de 0.708 \AA experimenta dispersión de Compton en parafina. ¿Cuál será la longitud de onda del rayo X dispersado cuando el ángulo de dispersión es de: a) 90° y b) 180° ? R/: a) 0.732 \AA ; b) 0.756 \AA .
9. ¿Cuál es la longitud de onda de un rayo X que incide sobre grafito, si después de ser dispersado con un ángulo de 60° la longitud de onda del rayo resultó ser $2.54 \times 10^{-9} \text{ cm}$? R/: 0.242 \AA .
10. (a) Muestre que la energía cinética del electrón dispersado en un efecto Compton, en función de la energía de la radiación incidente y de su ángulo de dispersión, está dada por la expresión:

$$K = h\nu_0 \left[\frac{\alpha(1 - \cos \phi)}{1 + \alpha(1 - \cos \phi)} \right]$$

donde:

$$\alpha = \frac{h\nu_0}{m_0 c^2}$$

- (b) Muestre que el máximo valor de la energía cinética es:

$$K_{\max} = h\nu_0 \left(\frac{2\alpha}{1 + 2\alpha} \right)$$

11. Un fotón que tiene una energía de 10^4 eV realiza una colisión con un electrón en reposo y es dispersado con un ángulo de 60° .

Encuentre: a) la longitud de onda, frecuencia y energía del fotón dispersado y b) la energía cinética, cantidad de movimiento y dirección del electrón después de la colisión. R/: a) 1255 \AA ; $2.39 \times 10^{18} \text{ s}^{-1}$; $9.905 \times 10^3 \text{ eV}$; b) 95 eV ; $5.255 \times 10^{-24} \text{ kg-m/s}$; $60^\circ 31' 3.6''$.

12. Muestre que:

(a)

$$h\nu = \frac{h\nu_0}{1 + \alpha(1 - \cos \phi)}$$

(b)

$$\cot \theta = (1 + \alpha) \tan \left(\frac{1}{2} \phi \right)$$

En ambos casos, $\alpha = h\nu_0/m_0 c^2$

Capítulo 4

Espectroscopía y modelos atómicos

4.1 Espectroscopía

Uno de los métodos de identificación más poderoso que existe para los elementos y compuestos de la naturaleza, es su análisis espectroscópico. En general, cuando una substancia se somete a condiciones tales que la energía total del sistema se incrementa, luego de cierto tiempo posterior a la extinción de la perturbación externa, el sistema regresa a su condición inicial, emitiendo esta energía extra en forma de radiación electromagnética.

Cada sistema lo hace de manera diferente y el análisis del espectro de esta radiación conforma la ciencia de la espectroscopía.

4.1.1 Espectros atómicos

Como es bien sabido, al hacer pasar un rayo de sol a través de un prisma de vidrio la luz es descompuesta en las diferentes longitudes de onda (o colores) que la forman. La imagen que vemos recibe el nombre de arco iris. De esta manera obtenemos el espectro solar (en su parte visible), el cual se conoce desde que el hombre existe y comenzó a ser estudiado desde la época de Newton.

En 1802 el físico W. Wollaston estudió este espectro con más atención y para ello construyó un aparato llamado especlógrafo. Con este aparato, basado en el principio mencionado antes, observó que en el espectro solar aparecían unas líneas oscuras muy nítidas que a simple vista no son observables, y a las que no prestó mayor atención suponiendo que se debían a imperfecciones en el material del prisma que había utilizado para descomponer la luz solar.

Por su lado, en 1814, J. Fraunhofer también estudiaba el espectro solar y especialmente la presencia de estas líneas oscuras. No las pudo explicar, pero llegó a la conclusión que formaban parte de la naturaleza de la luz solar. Entonces, se dedicó a contarlas, ubicar su posición dentro del espectro solar y darle un nombre a las ocho líneas más importantes. Hoy se conocen con el nombre de líneas de Fraunhofer y todavía se las identifica con la nomenclatura dada por él: las letras de *A* hasta *K*. Una de estas líneas es doble y se llama línea *D* (figura 4.1).

Fraunhofer también estudió el espectro de la luz emitida por la llama de un reverbero de alcohol al que se adicionó sal común y encontró que en él aparecía una línea doble muy intensa de color amarillo, que ocupaba la misma posición en el espectro que la línea *D* del espectro solar. Algun tiempo después realizó las primeras medidas de la longitud de onda correspondiente a estas líneas según su ubicación en el espectro. Pero no vio la relación que existe entre la línea *D* del espectro solar y las líneas amarillas del espectro de la llama del reverbero de alcohol con sal común.

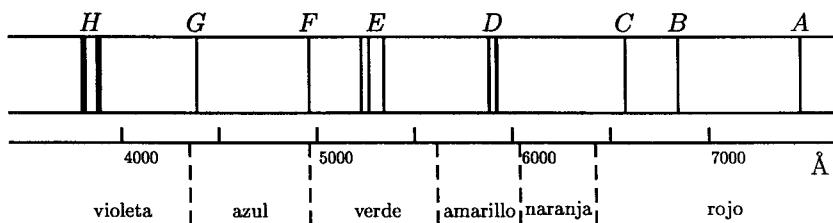


FIGURA 4.1. Líneas de Fraunhofer en el espectro solar.

Durante los primeros cincuenta años del siglo pasado se tomaron los espectros de la luz emitida por los elementos conocidos hasta entonces, observándose que la posición de las líneas en cada espectro era diferente. En otras palabras, *cada elemento tiene su propio espectro*. Sin embargo, los investigadores de la época no entendieron el significado físico de este hecho aunque ya se había establecido que la doble línea amarilla (del espectro de la llama de alcohol con sal) aparecía siempre que la substancia de la cual se tomaba el espectro contenía sodio.

Finalmente en 1856, G. Kirchhoff mostró la importancia de los espectros propios a cada elemento y pudo explicar las líneas de Fraunhofer en el espectro solar. Para ello enunció dos leyes generales de carácter empírico.

La primera ley se refiere a la emisión y absorción de radiación elec-

tromagnética:

- Una substancia que emite radiación de una determinada longitud de onda (línea en el espectro correspondiente) debe, a la misma temperatura, absorber radiación de igual longitud de onda.

La segunda ley se refiere a los espectros:

- Todo elemento tiene su propio espectro que permite identificarlo.

El espectro de un elemento es su tarjeta de identidad y ninguna línea que pertenezca a un elemento determinado (ubicación dentro del espectro electromagnético) aparecerá en el espectro de cualquier otro elemento. Este hecho permitió descubrir nuevos elementos e identificar la composición química de cualquier substancia, ya que bastaba comparar su espectro con los espectros patrón de los elementos conocidos para saber qué contenía.

Kirchhoff también propuso la teoría de que el sol estaba rodeado por capas gaseosas que actúan como pantalla, que absorbe algunas longitudes de onda de la radiación electromagnética emitida por su superficie caliente. Entonces, en la radiación que llega a la Tierra, faltan estas longitudes de onda, y son las que corresponden a las líneas oscuras del espectro solar. La línea *D* indica la presencia de sodio gaseoso en las capas externas del sol, hecho que fue confirmado por el astrónomo P. Janssen en 1868.

La obtención y estudio de los espectros de los elementos se denomina *espectroscopía* y se basa esencialmente en la siguiente idea: todo ente en la naturaleza siempre trata de estar en su estado de menor energía posible, lo cual se cumple también para los átomos. Entonces, si mediante un procedimiento adecuado se hace que un átomo adquiera un exceso de energía, después de un tiempo prudencial regresará a su estado de menor energía emitiendo el exceso en forma de radiación electromagnética.

Al hacer pasar esta radiación a través de un prisma de vidrio será separada en las diferentes longitudes de onda presentes y al colocar un dispositivo adecuado detrás del prisma se podrá observar el espectro obtenido.

El conjunto de prisma y dispositivo que permite obtener el espectro constituye lo que llamamos un *espectrógrafo*. Desde 1870 se utilizan placas fotográficas sobre las cuales queda impresa la luz que le llegue, separada en sus diferentes componentes, resultando una serie de líneas, cada una correspondiente a una longitud de onda presente en la radiación (figura 4.2). Por esto los espectros de los elementos se llaman de *línea* y son espectros *discretos* porque en la radiación emitida por los átomos sólo están presentes *algunas longitudes de onda*.

Los siguientes métodos son los más comunes para suministrar el exceso de energía a los átomos o moléculas de una substancia:

- a) por absorción de radiación electromagnética;
- b) por transformación de energía cinética en colisiones inelásticas entre electrones y átomos;
- c) por excitación térmica, calentando la substancia.

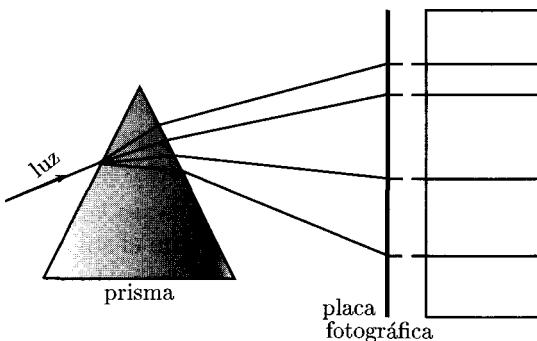


FIGURA 4.2. Esquema de la detección de un espectro de línea.

Dependiendo de la radiación que se estudie, los espectros atómicos pueden ser de *emisión* o *absorción*.

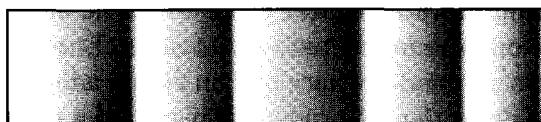


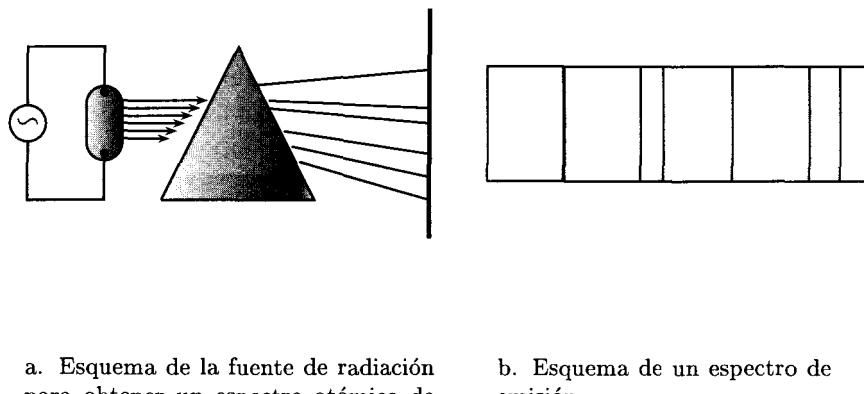
FIGURA 4.3. Esquema de un espectro de bandas.

Cuando la fuente de la radiación está constituida por moléculas, el espectro correspondiente no presenta líneas bien definidas sino bandas más o menos anchas de diferentes intensidades que también corresponden a ciertas longitudes de onda (figura 4.3). En este caso el espectro se denomina *espectro de bandas*.

4.1.2 Espectro atómico de emisión

El espectro atómico de emisión se obtiene a partir de la radiación emitida directamente por los átomos de la substancia que tengan un exceso de

energía.



- a. Esquema de la fuente de radiación para obtener un espectro atómico de emisión.
- b. Esquema de un espectro de emisión.

FIGURA 4.4. Espectro de emisión.

Cuando la substancia es un gas, el exceso de energía se suministra haciendo pasar una corriente eléctrica a través de él (figura 4.4a.) para producir colisiones inelásticas entre los electrones de la corriente y los átomos del gas. En el proceso los electrones ceden su energía a los átomos. El gas de la substancia se encuentra a baja presión de manera que sus átomos están muy separados entre sí, lo cual garantiza que la colisión tiene lugar entre un electrón y un sólo átomo. En el caso de una substancia sólida, el exceso de energía se suministra por excitación térmica lo cual se logra haciendo pasar un arco eléctrico (chispa) entre dos electrodos, uno de los cuales contiene polvo de la substancia que se quiere analizar.

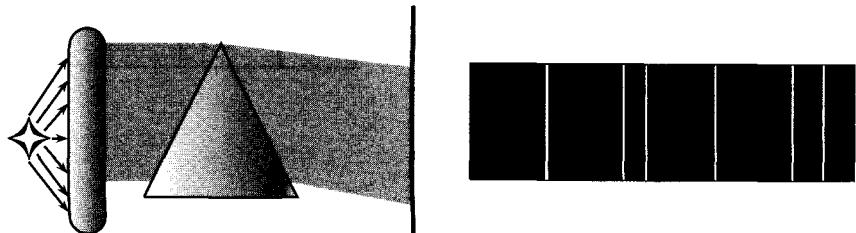
En la fotografía de la radiación emitida se observa una serie de líneas negras (parte impresa de la película en blanco y negro) sobre un fondo claro (parte no impresa de la película) (figura 4.4b.). La cámara fotográfica tiene incluida una escala que permite ubicar la posición de la línea, la cual corresponde a una longitud de onda determinada. Existen tablas en las cuales se encuentra la equivalencia entre la posición de la línea y su correspondiente longitud de onda.

4.1.3 Espectro atómico de absorción

En este caso se coloca detrás de la muestra, generalmente gaseosa o líquida, una fuente de radiación electromagnética de amplio espectro

continuo.

Al incidir la radiación sobre la muestra, ésta absorbe algunas longitudes de onda y el resto de la radiación atraviesa la muestra sin interactuar con ella (figura 4.5a.).



a. Esquema de la fuente de radiación para obtener un espectro atómico de absorción.

b. Esquema de un espectro de absorción.

FIGURA 4.5. Espectro de absorción.

En la fotografía del espectro electromagnética se observa una serie de líneas blancas (parte no impresa de la película) sobre fondo oscuro (parte impresa) que corresponde al espectro continuo que se utilizó (figura 4.5b.). Las líneas blancas corresponden a las longitudes de onda que fueron absorbidas por la sustancia.

Al comparar un espectro de emisión y un espectro de absorción para el mismo elemento, las líneas oscuras del de emisión coinciden con las líneas blancas del absorción. En otras palabras, las longitudes de onda emitidas en el primer caso son las que faltan en el segundo.

La espectroscopía se desarrolló y aplicó casi un siglo antes de que existiera una teoría o un modelo para describir y explicar adecuadamente el carácter atómico de la materia.

4.1.4 Series espectrales del átomo de hidrógeno

Con el desarrollo de la espectroscopía, a finales del siglo XIX se había acumulado una gran cantidad de datos obtenidos del estudio de los espectros atómicos de casi todos los elementos conocidos entonces.

Inicialmente se pensó que la gran cantidad de líneas que aparecen en un espectro atómico se encontraban distribuidas al azar. Sin em-

bargo, en el año de 1883 se observó que a medida que la longitud de onda correspondiente a cada línea se va haciendo menor, su intensidad disminuye y las líneas se van acercando entre sí hasta que es imposible ver la separación entre ellas. Al conjunto de líneas se denominó *seriepectral*.

Uno de los espectros más estudiados en la región visible del espectro electromagnético era el del hidrógeno, por ser un espectro relativamente sencillo, al que sus 14 líneas ya habían sido medidas con cierta precisión desde el comienzo del siglo XIX.

En el año de 1885, J. Balmer dedujo una fórmula matemática empírica que permitía calcular teóricamente la longitud de onda correspondiente a cada línea de la seriepectral del hidrógeno (en la región visible), seriepectral que luego tomaría su nombre.

Esta fórmula era:

$$\lambda = \frac{3647 n^2}{n^2 - 4} \text{ Å} \quad n = 3, 4, \dots \quad (4.1)$$

donde n es el número entero que identifica cada línea de la serie: 1° , 2° , etc., y que se conocen generalmente como líneas H_α ($n = 3$), H_β ($n = 4$), H_γ ($n = 5$), etc. (figura 4.6).

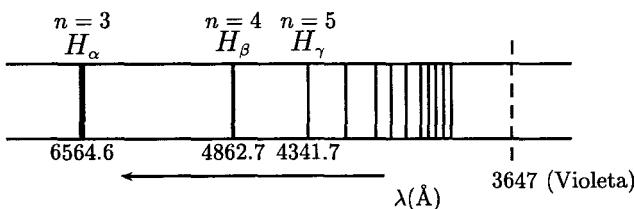


FIGURA 4.6. Esquema de la serie de Balmer para el átomo de hidrógeno.

En 1890, J. Rydberg propuso que la fórmula anterior se escribiera de la siguiente manera:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right] \quad n = 3, 4, \dots \quad (4.2)$$

donde R_H es una constante que se determina experimentalmente. Desde entonces se denomina constante de Rydberg y su valor es $1.09677 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$. La fórmula (4.2) reproduce bastante bien los valores experimentales.

Rydberg también sugirió que si se cambiaba el número 2 en la ecuación (4.2) por 1 ó 3, se obtendrían otras series espectrales para el átomo de hidrógeno, pero imposibles de observar experimentalmente en ese momento.

Con el tiempo las técnicas espectroscópicas se fueron mejorando y se pudieron observar otras series, tal como lo había predicho Rydberg.

Las nuevas series se encuentran en las regiones ultravioleta (una) e infrarrojo (cuatro) del espectro electromagnético. La longitud de onda de cada línea de estas nuevas series se calcula teóricamente a partir de la fórmula de Rydberg cuya expresión general tiene la forma:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] \quad n_2 > n_1 \quad (4.3)$$

donde $n_1 = 1, 2, \dots, 6$ corresponde a cada una de las seis series conocidas y $n_2, n_2 > n_1$, corresponde a la $1^\circ, 2^\circ$, etc., líneas de la serie considerada.

Los espectros de los demás elementos también presentan series espectrales y existen fórmulas que permiten calcular algunas de las longitudes de onda de las líneas correspondientes, pero no son sencillas como en el caso del átomo de hidrógeno.

En la tabla 4.1 se encuentran las series espectrales del átomo de hidrógeno, su localización en el espectro electromagnético, el nombre de la serie (que es el de su descubridor), el año en que se observó por primera vez, y los valores correspondientes de n_1 y n_2 para cada caso. De la última serie solamente se ha podido detectar la primera línea.

TABLA 4.1. Series espectrales del átomo de hidrógeno.

Región del espectro	Descubridor	Año	n_1	n_2
Ultravioleta	Lyman	1916	1	2, 3, ...
Visible	Balmer	1885	2	3, 4, ...
Infrarrojo	Paschen	1908	3	4, 5, ...
Infrarrojo	Brackett	1922	4	5, 6, ...
Infrarrojo	Pfund	1927	5	6, 7, ...
Infrarrojo	Humphrey	1952	6	7, 8, ...

Al perfeccionarse los instrumentos que permiten observar y medir líneas espectrales, se vio que las líneas del hidrógeno son realmente dos líneas muy cercanas entre sí; este hecho también se observó en los espectros de los elementos alcalinos: *Li, Na, K, Rb, Cs y Fc*.

Ahora se conoce que todos los espectros atómicos presentan esta división de líneas que puede ser en dos (dobletes), tres (tripletes), o más líneas. En general todas las líneas tienen el mismo número de componentes en una seriepectral dada y esta división se denomina *estructura fina* del espectro, fenómeno del que volveremos a hablar más adelante.

4.2 Modelos atómicos

4.2.1 Historia del átomo

La historia del átomo tiene orígenes muy remotos. El concepto de átomo como unidad fundamental e indivisible de la materia fue formulado por los griegos hace unos 2500 años. Sin embargo, este concepto era puramente filosófico y no existía entonces evidencia experimental que sustentara tal afirmación. Hace solamente unos 300 años que la hipótesis atómica se transformó en una verdadera teoría científica cuando, a mediados del siglo XVII, R. Boyle introdujo el concepto de elemento químico, tal como se entiende hoy día.

A finales del siglo XVIII se tiene la primera evidencia de la existencia de los átomos cuando J. Berzelius enuncia su ley empírica de las proporciones definidas en combinaciones químicas.

En 1803 aparece la primera teoría atómica enunciada por J. Dalton, cuyos puntos fundamentales fueron los siguientes:

1. Todos los elementos están constituidos por pequeñas partículas llamadas átomos.
2. Todos los átomos de un mismo elemento poseen propiedades idénticas, en particular su peso.
3. Los átomos son las unidades de los cambios químicos, los cuales implican una combinación o una nueva distribución de átomos. Estos no se crean, destruyen o cambian.
4. Cuando los átomos se combinan lo hacen en relaciones fijas de números enteros formando partículas compuestas llamadas moléculas.

La teoría de Dalton explica la ley de proporciones definidas si se acepta que cada elemento está compuesto de átomos de peso definido y si las combinaciones químicas ocurren entre átomos individuales. También implica la conservación de masa.

En 1833 M. Faraday demuestra la existencia de partículas con carga eléctrica en sus experimentos de electrólisis. Midió cuanta electricidad se necesitaba para liberar por medio de corriente un gramo de substancia y halló que la cantidad de electricidad estaba relacionada con el peso atómico de la substancia y sobre todo, con el número de átomos que libera. Esto mostraba la existencia de una unidad fundamental de carga eléctrica asociada a cada átomo.

A partir de 1859 se estudió detalladamente el paso de corriente eléctrica a través de gases, descubriendose la existencia de partículas con carga eléctrica negativa que se llamaron *rayos catódicos*.

En 1897 J.J. Thomson midió la relación entre la carga y la masa de estas partículas mostrando que no eran átomos con carga eléctrica como se creía, sino más bien un fragmento presente en todos los átomos. Por medio de otros experimentos se encontró que la masa de estas partículas con carga negativa era aproximadamente 1/1836 veces la masa del átomo de hidrógeno (considerado entonces la partícula más pequeña) y se la denominó *electrón*. Su carga es la unidad fundamental de carga eléctrica.

Durante los últimos años del siglo XIX se descubrieron dos fenómenos importantes relacionados con átomos. En primer lugar, los átomos de un mismo elemento pueden tener diferentes masas y, sin embargo, sus propiedades químicas siguen siendo iguales. Por ejemplo, el elemento neón es una mezcla de átomos de neón con número atómico 20, 21 y 22 (consulte una tabla periódica). Átomos con las mismas propiedades químicas pero diferentes masas son denominados *isótopos*. Otro descubrimiento fundamental realizado por la época referida fue la de los rayos *X*. Estos se estudiarán en el siguiente capítulo.

En segundo lugar, en 1896 se descubrió que algunos elementos pasados (últimos de la Tabla Periódica) liberan espontáneamente partículas y se transforman en otros elementos.

Este proceso se llama *radioactividad* y los elementos, *radioactivos*. Las partículas emitidas pueden ser de tres clases: a) partículas positivas llamadas partículas α ; b) partículas negativas llamadas partículas β , que son electrones con grandes energías; y c) partículas o radiación γ , que son fotones muy energéticos. Hoy sabemos que las partículas α son núcleos de átomos de helio, de masa aproximadamente 7400 veces mayor que la del electrón y carga eléctrica positiva dos veces mayor que la del mismo.

Después de estos descubrimientos quedó descartada la idea de Dalton que los átomos son indestructible y no cambian. Además, se estableció que un átomo es eléctricamente neutro. La mayor parte de su masa tiene carga positiva y solamente una pequeñísima parte de la misma tiene carga negativa.

El resultado anterior llevó a preguntar cómo es la estructura interna del átomo. Esto es, cuántos electrones hay en un átomo particular y cómo están distribuidas en él las cargas positivas y negativas.

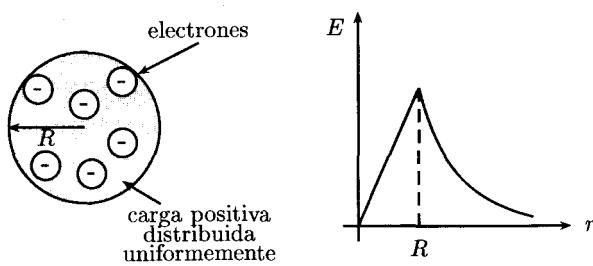
La primera pregunta se respondió muy pronto mediante experimentos de dispersión de rayos *X*, que mostraron que el número de electrones en los átomos ligeros (primeros de la tabla periódica), con excepción del átomo de hidrógeno que sólo tiene uno, era aproximadamente igual a la mitad de su peso atómico.

Para tratar de responder a la segunda pregunta, la estructura atómica se idearon varios modelos entre los cuales se destacaron tres que fueron los modelos de Thomson, el de Rutherford y el de Bohr. A continuación

hablaremos de ellos.

4.2.2 Modelo atómico de Thomson

En 1898, J.J. Thomson propuso el siguientes modelo para la distribución de carga en un átomo. Los electrones se encuentran sumergidos dentro de una esfera de materia de carga positiva, uniformemente distribuida en ella (figura 4.7). Necesariamente la cantidad de carga positiva era igual a la cantidad de carga negativa para que el átomo fuera eléctricamente neutro.



a. Esquema del átomo de Thomson.

b. Comportamiento del campo eléctrico creado por un átomo de Thomson en función de la distancia. R es el radio de la esfera de materia.

FIGURA 4.7. Modelo atómico propuesto por J.J.Thomson.

Los electrones ocupaban ciertas posiciones de equilibrio dentro de la esfera de materia, de manera que las fuerzas electrostáticas estaban equilibradas y el sistema, como un todo, era estable. Además, podían oscilar alrededor de su posición de equilibrio y emitir radiación electromagnética, de acuerdo con lo visto en el capítulo 2.

Este modelo podía explicar los siguientes hechos:

- La existencia de los espectros atómicos aunque no la presencia de una frecuencia límite (clásicamente no existe este límite) ni el carácter discreto de la radiación emitida por un átomo.
- Algunos fenómenos eléctricos como la conductividad y polarización eléctrica.
- Las reacciones químicas bajo el supuesto de intercambio de electrones.

- La periodicidad observada en las propiedades químicas de los elementos.

Pero cuando surge una nueva teoría (o modelo físico) antes de aceptar su validez es necesario comprobarla experimentalmente.

A pesar de que ésta propuesta era atractiva por lo que explicaba, pasaron varios años antes que se realizaran los experimentos correspondientes.

Para ello E. Rutherford sugirió un experimento en el cual se observa el comportamiento de partículas α que realizan colisiones con átomos de una lámina muy delgada de oro. Como estas partículas no las podemos ver, detrás de la lámina se colocó una pantalla de sulfuro de zinc, que permite detectar las partículas α desviadas al atravesar la lámina, por los destellos de luz que se producen cuando hacen impacto sobre la pantalla (figura 4.8).

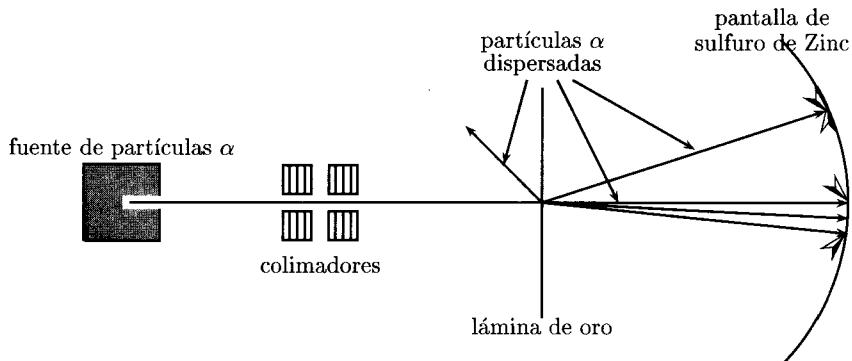


FIGURA 4.8. Esquema del arreglo experimental para observar la dispersión de partículas α .

De acuerdo con el modelo atómico de Thomson, las partículas α serán desviadas con respecto a su trayectoria incidente solamente si atraviesan el átomo. Fuera de este, el efecto del campo eléctrico es muy débil como se observa en la figura 4.7b., ya que la carga positiva del átomo está distribuida uniformemente dentro del volumen de materia; el campo eléctrico en un punto dado dentro de él es débil y su efecto sobre las partículas α será desviarlas un poco con respecto a su dirección incidente.

El experimento fue realizado por H. Geiger y E. Marsden en 1911. La mayoría de las partículas se comportaban como lo predecía el modelo de Thomson, es decir, no eran desviadas o lo eran con ángulos pequeños respecto a su dirección incidente. Pero algunas partículas α eran desviadas con ángulos muy grandes y una de cada 10000 era devuelta por donde venía! La única explicación posible a este resultado es la presencia

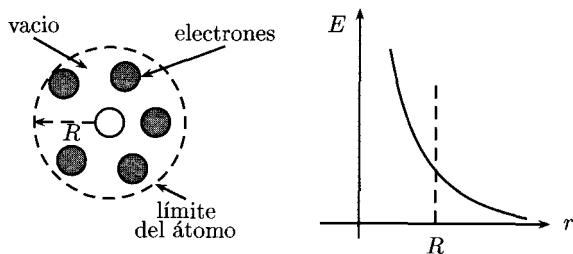
de un campo eléctrico muy fuerte, el cual no se puede justificar a partir del modelo de Thomson. Por consiguiente, este modelo no era adecuado y debió ser descartado a pesar de que podía explicar bastante bien otros fenómenos.

4.2.3 Modelo atómico de Rutherford

A raíz de los resultados obtenidos en el experimento de dispersión de partículas α , E. Rutherford propone un nuevo modelo atómico en el cual el átomo está formado por un pequeño núcleo de materia donde se encuentra concentrada toda su carga positiva y la mayor parte de su masa y, a cierta distancia de él, se encuentran distribuidos los electrones en cantidad tal que la carga neta del átomo es nula (figura 4.9a.).

Al estar concentrada toda la carga positiva en un pequeño volumen se crea a su alrededor un campo eléctrico muy fuerte (figura 4.9b.) de manera que si la partícula α (cuya carga es positiva) pasa en su vecindad la fuerza eléctrica de repulsión que actúa sobre ella hará que se desvíe de su dirección incidente con ángulos grandes si pasa cerca al núcleo y con ángulos pequeños si pasa un poco más lejos.

Además, este modelo explica correctamente los resultados experimentales obtenidos por Geiger y Marsden.



a. Esquema del átomo de Rutherford.

b. Comportamiento del campo eléctrico creado por el núcleo atómico en función de la distancia. R es la distancia límite del átomo.

FIGURA 4.9. Modelo atómico propuesto por Rutherford.

Con este nuevo modelo y los resultados experimentales de la dispersión de partículas α se obtuvo nueva información acerca de los átomos:

- Todos los núcleos de los átomos de un elemento dado tienen la

misma carga eléctrica.

- La carga nuclear es un múltiplo entero del valor de la carga del electrón.
- La carga nuclear de un átomo es igual al número atómico químico, el cual determina su posición en la tabla periódica.

Las cargas positivas del núcleo se llaman *protones* y la carga total del núcleo es Ze , donde Z es el número de cargas positivas en él, llamado *número atómico*. Este número también nos dice cuántos electrones hay en el átomo.

El modelo atómico de Rutherford que parecía correcto resultó no serlo. De acuerdo con la mecánica clásica, el sistema electrón-núcleo sólo será estable si los electrones giran alrededor del núcleo describiendo órbitas circulares (o elípticas) como lo hacen los planetas alrededor del sol.

Pero este hecho presenta un grave problema desde el punto de vista de la teoría electromagnética. Al ser los electrones cargas eléctricas en movimiento acelerado deben emitir radiación electromagnética, es decir, energía. Entonces, durante su movimiento, los electrones van perdiendo continuamente energía, su trayectoria circular se va transformando en una espiral y finalmente llegan al núcleo haciendo que el átomo se desintegre. Esto no ocurre en la naturaleza. Además, el espectro de la radiación emitida por un átomo, con las consideraciones indicadas, sería un espectro continuo y no un espectro discreto como lo muestra la espectroscopía.

Por consiguiente, el modelo atómico de Rutherford no explica la estabilidad de la materia ni la existencia de los espectros atómicos discretos a pesar de haber establecido la existencia del núcleo atómico, paso muy importante en el entendimiento de la materia.

Nuevamente encontramos que la física clásica no puede explicar fenómenos que tienen lugar en el mundo atómico.

4.2.3.1 Teoría de la dispersión de las partículas α

A pesar de que el modelo atómico de Rutherford no era del todo correcto, la teoría para la dispersión de partículas α basada en este modelo sigue siendo válida hoy día.

Rutherford desarrolló esta teoría para demostrar la bondad de su modelo atómico y para ello hizo las siguientes suposiciones:

- Tanto el núcleo como la partícula α son tan pequeñas que se pueden considerar como cuerpos puntuales.

- En el proceso de la dispersión de partículas α por el núcleo **sólo** interviene la fuerza electrostática de repulsión.
- El núcleo es tan pesado comparado con la partícula α que se le puede considerar en reposo durante la interacción.

De la segunda suposición se puede deducir la forma de la trayectoria seguida por una partícula α que se acerca a un núcleo.

La fuerza de repulsión entre las dos partículas es inversamente proporcional al cuadrado de la distancia que las separa. Entonces, la trayectoria seguida por la partícula α , a medida que se acerca al núcleo, será una hipérbola en cuyo foco se encuentra el núcleo (figura 4.10).

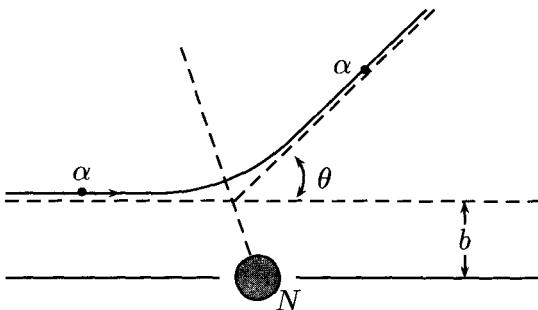


FIGURA 4.10. Trayectoria de una partícula α dispersada por un núcleo atómico.

Las asíntotas incidente y de dispersión forman un ángulo llamado *ángulo de dispersión*, que es el ángulo que se desvía la partícula α con respecto a su dirección incidente. Si no existiera la fuerza eléctrica de repulsión entre las dos partículas, la partícula α pasaría a cierta distancia del núcleo llamada *parámetro de impacto*, b (figura 4.10).

Entre el ángulo de dispersión y el parámetro de impacto existe una relación inversa. A menor parámetro de impacto, mayor ángulo de dispersión. Entre más cerca al núcleo pase la partícula α , mayor será la desviación que experimenta (figura 4.11). La relación entre el ángulo de dispersión y el parámetro de impacto es:

$$\cot\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{4\pi\epsilon_0 K b}{Z e^2} \quad (4.4)$$

donde K es la energía cinética de la partícula α y Z el número atómico del núcleo considerado.

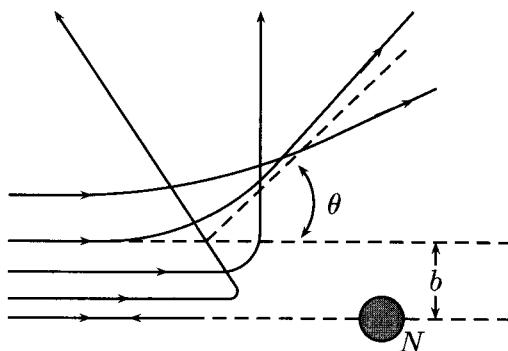


FIGURA 4.11. Esquema de las trayectorias de una partícula α dispersada por un núcleo atómico para diferentes parámetros de impacto.

La teoría de dispersión de partículas α permitió calcular por primera vez la dimensión aproximada de un núcleo atómico. Cuando el parámetro de impacto es nulo (incidencia frontal) la partícula α se acercará hasta cierta distancia r_0 del núcleo antes de ser reflejada. En el instante de máximo acercamiento su energía cinética K se convierte en energía potencial eléctrica V y por la conservación de energía se tiene que K es igual V .

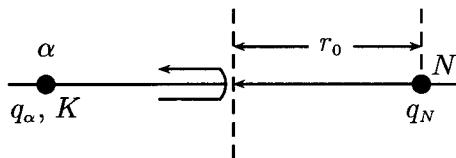


FIGURA 4.12. Dispersión de una partícula α por un núcleo cuando el parámetro de impacto es cero (incidencia frontal).

Entonces:

$$K = \frac{q_\alpha q_N}{4\pi\epsilon_0 r_0}$$

de donde:

$$r_0 = \frac{q_\alpha q_N}{4\pi\epsilon_0 K} \quad (4.5)$$

Las cargas eléctricas de la partícula α y del núcleo son respectivamente

$2e$ y Ze ; por consiguiente:

$$r_0 = 2 \times 9 \times 10^9 \frac{e^2 Z}{K} = 4.6 \times 10^{-28} \frac{Z}{K} \quad (4.6)$$

y la dimensión del núcleo atómico debe ser menor o del mismo orden de magnitud que r_0 .

4.2.4 Modelo de Bohr para el átomo de hidrógeno

En el año 1913, N. Bohr, quien trabajaba con Rutherford, se encontraba buscando una explicación al porqué el modelo de atómico de Rutherford fallaba desde el punto de vista clásico, cuando tuvo oportunidad de leer la teoría de Planck para la radiación del cuerpo negro.

Observó que si usaba el segundo postulado de Planck: "un oscilador sólo emite energía cuando pasa de un estado de mayor energía a otro de menor energía" y consideraba que la frecuencia del movimiento circular del electrón alrededor del núcleo era análoga a la frecuencia del oscilador de Planck, podría tener la solución del problema.

El átomo sólo emite radiación electromagnética cuando uno de sus electrones pasa de un estado de mayor energía a otro de menor energía. Entonces, a partir del modelo atómico de Rutherford y siguiendo el razonamiento anterior formuló para su modelo atómico los siguientes postulados:

- I. El átomo de hidrógeno está constituido por un núcleo con carga $+ Ze$ y un electrón ligado a él mediante fuerzas electrostáticas.
- II. Existe, para el átomo, un conjunto discreto de estados energéticos en los cuales el electrón puede moverse sin emitir radiación electromagnética. Estos estados se denominan *estados estacionarios* y en ellos la energía es constante.
- III. En los estados estacionarios el momento angular del electrón (L) es igual a un múltiplo entero n de la constante de Planck \hbar dividida por 2π :

$$L = mvr = n \left(\frac{\hbar}{2\pi} \right) = n\hbar \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.7)$$

Así, el electrón solamente puede ubicarse en ciertas órbitas cuyos radios están determinados por la condición anterior; esto es :

$$r_n = \frac{n\hbar}{mv} \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.8)$$

- IV. Cuando un electrón realiza una transición de un estado estacionario de energía E_i a otro de energía E_f emite (o absorbe) radiación electromagnética de frecuencia ν dada por la relación:

$$\nu = \frac{|E_i - E_f|}{h} = \frac{\Delta E}{h} \quad (4.9)$$

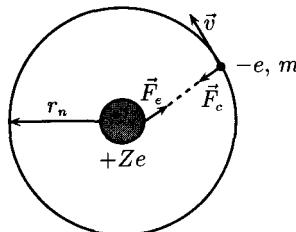


FIGURA 4.13. Esquema de un átomo de hidrógeno ($Z=1$).

Consideremos un electrón que gira alrededor de un núcleo de carga $+Ze$. El electrón se encuentra en la enésima órbita permitida, de radio r_n (figura 4.13), y la órbita es estable cuando la fuerza centrípeta es igual a la fuerza eléctrica. Esto es:

$$\frac{mv^2}{r_n} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} \quad (4.10)$$

De las ecuaciones (4.7) y (4.10) se obtienen las siguientes expresiones para la velocidad y el radio de las órbitas permitidas del electrón:

$$v = \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 mr_n} \right)^{1/2} \quad (4.11)$$

y por consiguiente:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{mZe^2} = \frac{a_0 n^2}{Z} \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.12)$$

donde a_0 se denomina radio de Bohr (radio de la primera órbita: $n = 1$) y su valor es de 0.53 \AA para el átomo de hidrógeno.

La energía total del electrón es igual a la suma de su energía cinética y su energía potencial eléctrica; entonces:

$$E = K + V = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}$$

Reemplazando en esta ecuación la velocidad y el radio por sus expresiones encontradas anteriormente, se obtiene:

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} = -\frac{mZ^2 e^4}{8\epsilon_0^2 n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.13)$$

ecuación que permite calcular la energía del electrón en cualquiera de las órbitas permitidas. Nótese que se ha considerado el núcleo en reposo en el origen del sistema de coordenadas. Entonces, la energía anterior es también la energía de cualquiera de los estados energéticos permitidos del átomo.

De la ecuación (4.13) vemos inmediatamente que la energía del electrón, y por lo tanto del átomo, está cuantizada siendo n el *número cuántico correspondiente*. El signo negativo nos indica que el electrón está ligado al núcleo. No tiene suficiente energía para escapar de la atracción que el núcleo ejerce sobre él. Por consiguiente, si queremos quitarle su electrón al átomo, deberemos suministrar cierta cantidad de energía.

Cuando el número cuántico n es infinito la energía total del electrón es nula. A partir de ese momento queda libre de las fuerzas que actúan sobre él y podrá moverse libremente con cualquier energía. Cuando el número cuántico es igual a la unidad, el átomo se encuentra en su estado de menor energía denominado *estado base o fundamental*.

Para el átomo de hidrógeno la energía de este estado es:

$$E_1 = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} = -13.6 \text{ eV} \quad (4.14)$$

y, por consiguiente, la ecuación (4.13) también se puede escribir como:

$$E_n = \frac{E_1 Z^2}{n^2} = -13.6 \frac{Z^2}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.15)$$

A los niveles de energía correspondientes a $n = 2, 3, \dots$ se les llama estados excitados. En la figura 4.14 se muestra un diagrama de niveles de energía con algunas definiciones de energías importantes.

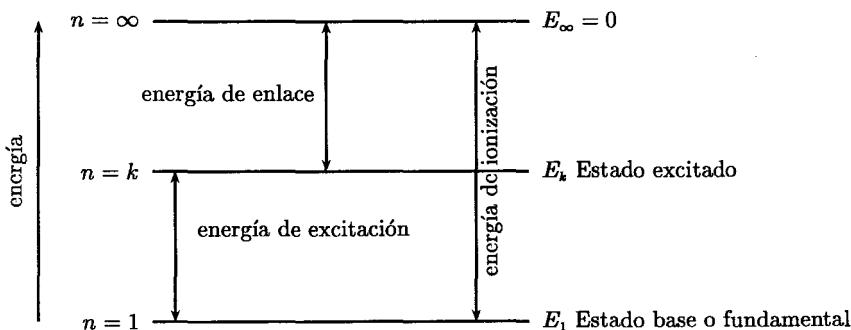


FIGURA 4.14. Niveles de energía y algunas energías importantes.

La diferencia de energía entre el estado excitado con $n = \infty$ y el estado base, $E_{\infty} - E_1$, es la energía que se debe suministrar a un átomo para

poder separar de él un electrón. Esta energía se denomina *energía de ionización*.

Pero si el átomo se encuentra en un estado excitado con $n = k$ la energía necesaria para quitarle un electrón es $E_{\infty} - E_k$, denominada *energía de enlace*.

Finalmente, la diferencia de energía entre un estado excitado y el estado base, $E_k - E_1$, se denomina *energía de excitación* y es la energía que se debe suministrar al átomo para que un electrón que se encuentra en el estado base salte al estado excitado con $n = k$.

Como ya conocemos la expresión para calcular la energía de cualquier estado energético del átomo de hidrógeno, veamos qué resultado obtenemos para la frecuencia de la radiación emitida por él cuando su electrón pasa de un estado de mayor energía a otro de menor energía.

En otras palabras, la frecuencia de la radiación emitida cuando el electrón salta de una órbita mayor a otra menor: $r(n_i) > r(n_f)$.

De acuerdo con el último postulado de Bohr (ecuación (4.9)), la frecuencia de la radiación emitida será:

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} = \frac{mZ^2e^4}{8\varepsilon_0^2h^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad n_i > n_f \quad (4.16)$$

Si expresamos la frecuencia en función de la longitud de onda la relación anterior se transforma en:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{mZ^2e^4}{8\varepsilon_0^2h^3c} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad n_i > n_f \quad (4.17)$$

Como habrán observado, la ecuación anterior tiene la misma forma de la ecuación de Rydberg usada en espectroscopía para calcular la longitud de onda de las líneas espectrales del átomo de hidrógeno.

Al reemplazar las constantes por sus valores y Z por la unidad, se obtiene con buena aproximación el valor de la constante de Rydberg, la cual se determinó experimentalmente, como ya se dijo.

Podemos concluir que el modelo atómico de Bohr puede explicar la presencia de líneas en el espectro atómico del átomo de hidrógeno. Cada línea corresponde a una transición electrónica desde un nivel energético hasta otro de menor energía.

En la figura 4.15 se encuentra un diagrama de niveles de energía y las series espectrales del átomo de hidrógeno.

A pesar del éxito que tuvo este modelo, ni éste ni su generalización, pudieron explicar los espectros de átomos con más de un electrón. Tampoco se pudo calcular la energía de los niveles correspondientes. Los cálculos teóricos no daban los valores experimentales¹.

¹Las energías de ionización se determinan experimentalmente.

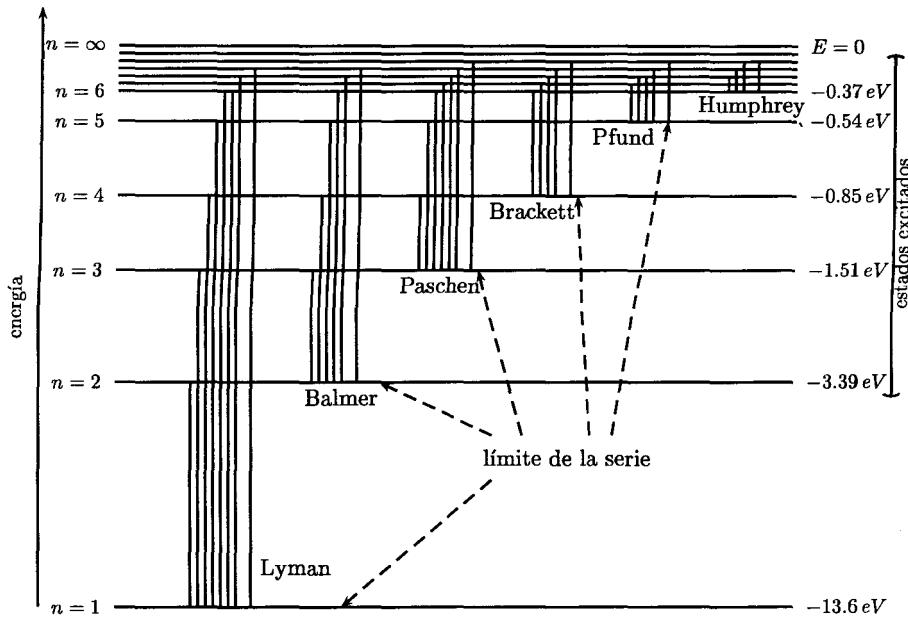


FIGURA 4.15. Niveles de energía y series espectrales del átomo de hidrógeno.

Sin embargo, el modelo atómico de Bohr se puede utilizar sin problema para describir átomos que por alguna causa han perdido todos sus electrones salvo uno, con lo cual se asemejan a un átomo de hidrógeno que tiene en el núcleo una carga $+Ze$ en lugar de $+e$.

Estos átomos se denominan *átomos hidrogenoides*. Por ejemplo, el helio una vez ionizado (He^+) es un átomo de helio que ha perdido uno de sus dos electrones. El litio dos veces ionizado (Li^{++}) es un átomo de litio que ha perdido dos de sus tres electrones.

De lo expuesto en esta sección hay que notar dos cosas respecto al modelo de Bohr:

- Bohr utilizó la física clásica para describir la estructura atómica en términos de un modelo de partículas que es sencillo y fácil de visualizar y al mismo tiempo, introduce aspectos cuánticos para dar una descripción adecuada de los aspectos atómicos. Al hacer esto último, introduce un nuevo concepto físico para las partículas: *bajo determinadas condiciones su energía es cuantizada*, hecho que solamente existía para los fotones.
- El modelo presenta una incongruencia lógica al postular electrones en movimiento que no emiten radiación, contradiciendo la teoría electromagnética, pero al mismo tiempo la utiliza al plantear la

condición de órbita estable.

A pesar de estas fallas, fue un paso fundamental en la búsqueda de la teoría adecuada para describir la naturaleza de los átomos.

4.3 Experimento de Franck-Hertz

En 1914, J. Franck y G. Hertz realizaron un experimento cuyo objetivo era probar la existencia de los niveles de energía postulados por Bohr. Este experimento se basó en que si estos niveles existen, los átomos sólo se pueden excitar cuando la energía que se suministre sea precisamente igual a la diferencia de energía entre dos niveles energéticos del átomo considerado, uno de ellos el estado base si el átomo no se encontraba ya en un estado de mayor energía.

En el experimento utilizaron electrones acelerados por una diferencia de potencial para excitar átomos de mercurio gaseoso a baja presión.

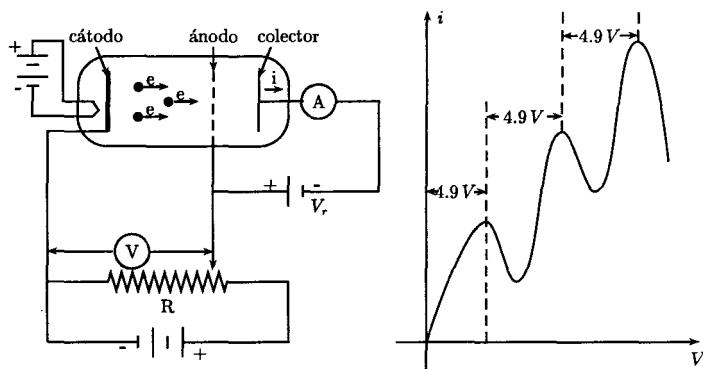


FIGURA 4.16. Diagrama del experimento de Franck-Hertz.

Si los electrones incidentes tienen la energía crítica para excitar los átomos, al chocar con ellos transfieren parte o toda su energía cinética a los electrones atómicos que a su vez pasan a un nivel de mayor energía.

(colisión inelástica). En caso contrario, sólo realizan colisiones **elásticas** con los átomos y no hay transferencia de energía.

En la figura 4.16a. se muestra un esquema del dispositivo experimental. Después de chocar con los átomos del gas, los electrones deben atravesar una región donde existe un potencial retardador V_r entre el ánodo y el colector. Por lo tanto, los electrones que lleguen al ánodo con una energía cinética menor que eV_r , no podrán alcanzar el colector y se observará una disminución de la corriente en el amperímetro (A). Los electrones que cumplen la condición anterior son aquellos que realizaron colisiones inelásticas con los átomo del gas.

Los resultados experimentales mostraron que cada vez que los electrones incidentes alcanzaban una energía cinética del orden de 4.9 eV la corriente disminuía drásticamente (figura 4.16b.).

La explicación a este fenómeno es la siguiente. Cuando un electrón alcanza una energía de 4.9 eV y realiza una colisión inelástica con un átomo de mercurio, le cede toda su energía y no puede llegar al colector lo cual se registra en el amperímetro por una disminución de corriente. Al seguir aumentando el voltaje acelerador, los electrones alcanzan una energía de 9.8 eV y entonces pueden realizar dos colisiones inelásticas sucesivas quedando al final sin energía y nuevamente la corriente disminuye (segundo pico de la gráfica). El tercer pico corresponde a tres colisiones sucesivas.

Después de cada colisión los átomos que han sido excitados regresan a su estado base emitiendo radiación electromagnética.

Un fotón de 4.9 eV de energía tiene una longitud de onda de 2536 \AA y se sabía que ésta es precisamente a la longitud de onda de la primera línea del espectro atómico del mercurio y, por lo tanto, la diferencia de energía entre el estado base y el primer nivel excitado del átomo. Entonces, para comprobar este resultado G. Hertz tomó el espectro de emisión de átomos de mercurio excitados mediante el procedimiento anterior y encontró que en él aparecía una línea solamente cuando los electrones alcanzaban una energía de 4.9 eV o múltiplos enteros de esta cantidad.

Así quedó comprobado experimentalmente la existencia de los niveles de energía en los átomos.

Ejemplo 4.1.

En la deducción de las fórmulas para el átomo de hidrógeno hemos considerado el núcleo en reposo. En realidad, tanto el núcleo como el electrón giran alrededor del centro de masa del sistema. Entonces veamos cómo se modifican los resultados de la sección 4.2.4 cuando se tiene en cuenta la masa nuclear.

Sean M y m respectivamente las masa del núcleo y del electrón, p y

q sus distancias al centro de masa y r_n la distancia núcleo-electrón (radio de la enésima órbita permitida). Las dos partículas giran con la misma velocidad angular ω alrededor del centro de masa (*CM*), de manera que las velocidades lineales de las partículas son: $v_N = \omega p$ y $v_e = \omega q$ (figura 4.17).

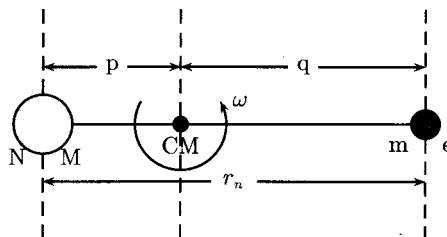


FIGURA 4.17. Sistema de dos partículas que giran alrededor de su centro de masa (*CM*).

En el centro de masas del sistema se cumple que:

$$mq = Mp \quad r_n = p + q$$

de donde:

$$p = \left(\frac{m}{M+m} \right) r_n \quad q = \left(\frac{M}{M+m} \right) r_n \quad (4.18)$$

De acuerdo con el segundo postulado de Bohr (ecuación (4.8)), el momento angular total del sistema debe satisfacer la condición:

$$L = mv_e q + Mv_N p = (mq^2 + Mp^2)\omega = n\hbar \quad (4.19)$$

La condición de órbita estable es:

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} = \frac{mv_e^2}{q} = mq\omega^2 \quad (4.20)$$

Reemplazando en las ecuaciones (4.19) y (4.20) p y q por sus expresiones y haciendo: $Mm/(M+m) = m'$, se obtiene:

$$m'\omega r_n^2 = n\hbar \quad m'\omega^2 r_n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} \quad (4.21)$$

donde m' es la masa reducida del sistema.

La energía total del enésimo estado estacionario del átomo es:

$$E_n = \frac{1}{2}(mv_e + Mv_N^2) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = \frac{1}{2}m'\omega^2 r_n^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \quad (4.22)$$

De las ecuaciones (4.21) se obtiene para la velocidad angular y el radio de la enésima órbita:

$$\omega = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 n \hbar r_n} \quad r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0 n^2 \hbar^2}{m' Ze^2} \quad (4.23)$$

lo cual, reemplazado en la ecuación (4.22), conduce al siguiente resultado para la energía total del sistema:

$$E_n = -\frac{m' Z^2 e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} \quad (4.24)$$

donde n es el número cuántico que toma los valores 1, 2,

Así, se obtienen las mismas expresiones para el radio y la energía de las órbitas permitidas (que es la misma energía del electrón y del átomo) pero con m' en lugar de m .

En el átomo de hidrógeno la masa del núcleo es 1836 veces la masa del electrón; entonces, la razón de la masa reducida a la masa del electrón es:

$$\frac{m'}{m} = \frac{M}{M + m} = \frac{1836}{1836 + 1} = 0.99945 \quad (4.25)$$

Por lo tanto, m' es menor que m y la energía también será menor, lo cual conduce a un corrimiento de los niveles de energía y en la posición de las líneas espectrales correspondientes.

El valor de la constante de Rydberg también se modifica. De ahí que se acostumbra a designar con R_∞ el valor de la constante cuando no se tiene en cuenta la masa nuclear, y con R_H cuando se tiene en cuenta. Este último valor coincide con el valor experimental. La relación entre los dos valores para el átomo de hidrógeno es la siguiente:

$$R_H = \frac{m' e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = 0.99945 \frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = 0.99945 R_\infty \quad (4.26)$$

$$= 0.99945 \times 1.09737 \times 10^7 \text{ m}^{-1} = 1.09677 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

Una consecuencia de introducir el concepto de masa reducida fue el descubrimiento del deuterio, hidrógeno cuya masa atómica es el doble de la masa del hidrógeno común. Debido a su mayor masa las líneas de su espectro atómico se encuentran corridas hacia longitudes de onda menores, comparadas con las del hidrógeno común. Por ejemplo, la línea H_α de la serie de Balmer para el deuterio tiene una longitud de onda de 6592.9 Å mientras que la del hidrógeno es de 6564.6 Å. □

Ejemplo 4.2.

Como ya se vio, el modelo atómico de Bohr se puede aplicar a átomos hidrogenoides de la misma manera que lo hacemos con el átomo de hidrógeno. Es decir, los átomos hidrogenoides se comportan en forma análoga al átomo de hidrógeno excepto que tienen masa y carga nuclear mayores.

Para átomos hidrogenoides la energía de los estados estacionarios y la longitud de onda de la radiación emitida en una transición electrónica están dadas por las relaciones:

$$E_n = -\frac{m' Z^2 e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^2 n^2}$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{m' Z^2 e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^3 c} \left[\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right] \quad n_i > n_f$$

donde ahora el número atómico Z es diferente de la unidad y m' es la masa reducida del átomo considerado.

De las ecuaciones anteriores vemos que la energía y, por consiguiente la frecuencia de la radiación emitida en una transición electrónica, aumenta en el factor Z^2 comparada con la del hidrógeno. Las líneas espectrales de los átomos hidrogenoides se encontrarán corridas hacia la región del ultravioleta del espectro electromagnético, con respecto a la posición de las mismas líneas en el espectro del hidrógeno.

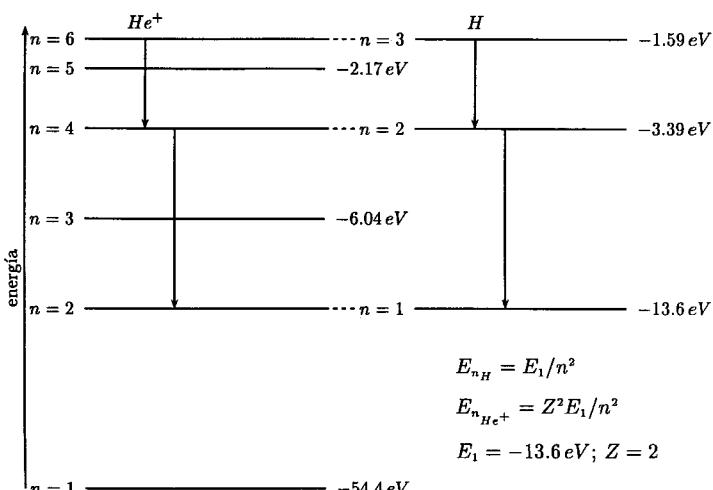


FIGURA 4.18. Diagrama de algunos niveles de energía para los átomos de Helio ionizado e hidrógeno, sin tener en cuenta la masa nuclear.

En la figura 4.18 se muestran algunos niveles de energía para el **átomo** de hidrógeno y para el átomo de helio ionizado (He^+) sin tener en cuenta la masa nuclear.

Como se observa en la figura 4.18, al no tener en cuenta la masa nuclear, las energías de las transiciones de $n = 6$ a $n = 4$ y $n = 4$ a $n = 2$ en el helio ionizado son iguales a las de las transiciones de $n = 3$ a $n = 2$ y $n = 2$ a $n = 1$ en el hidrógeno.

Pero al tener en cuenta la masa nuclear, las energías y por tanto las frecuencias de las radiaciones emitidas en las transiciones anteriores serán ligeramente diferentes. De la ecuación para la energía (ecuación (4.24)), se tiene que la relación entre las frecuencias es:

$$\nu(He^+) = \left(\frac{m'_{He^+}}{m'_H} \right) \nu(H)$$

La masa del núcleo de helio es aproximadamente cuatro veces mayor que la del núcleo de hidrógeno; entonces:

$$\begin{aligned} \frac{m'_{He^+}}{m'_H} &= \frac{4Mm/(4M+m)}{Mm/(M+m)} = \frac{4(M+m)}{4M+m} \\ &= \frac{4(1836+1)}{4 \times 1836 + 1} = 0.99986 \end{aligned}$$

Finalmente:

$$\nu(He^+) = 0.99986 \nu(H)$$

□

4.4 Principio de correspondencia de Bohr

Para aclarar el sentido físico de los números cuánticos grandes y la relación que existe en este caso entre las teorías clásica y cuántica, Bohr enunció el siguiente principio:

Las predicciones que hace la teoría cuántica para el comportamiento de un sistema físico deben corresponder a las predicciones de la física clásica para valores grandes de los números cuánticos que especifican el sistema.

Veamos un ejemplo. De acuerdo con la teoría electromagnética, cuando una carga eléctrica se encuentra en movimiento circular emite energía

en forma de radiación electromagnética de frecuencia igual a la de su movimiento circular.

Para un electrón que se encuentra en la enésima órbita permitida su velocidad lineal v es igual a ωr_n . Reemplazando v y r_n por su expresiones (ecuaciones (4.11) y (4.12)) y despejando la frecuencia se obtiene:

$$\nu_{\text{órbita}} = \frac{Z^2 e^4 m}{4\varepsilon_0^2 h^3 n^3} = \frac{Z^2 e^4 m}{8\varepsilon_0^2 h^3} \left[\frac{2}{n^3} \right] \quad (4.27)$$

Este es el resultado clásico.

Desde el punto de vista cuántico, cuando el electrón del átomo de hidrógeno hace una transición desde el nivel $n+1$ al nivel n , la frecuencia de la radiación emitida es:

$$\nu_{\text{trans}} = \frac{Z^2 e^4 m}{8\varepsilon_0^2 h^3} = \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right] = \frac{Z^2 e^4 m}{8\varepsilon_0^2 h^3} = \left[\frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} \right]$$

Cuando n es muy grande: $2n+1 \simeq 2n$ y $n+1 \simeq n$; entonces:

$$\nu_{\text{trans}} = \frac{Z^2 e^4 m}{8\varepsilon_0^2 h^3} \left[\frac{2}{n^3} \right] \quad (4.28)$$

Por consiguiente el resultado clásico y el resultado cuántico son iguales.

Es equivalente usar la fórmula clásica o la cuántica para calcular la frecuencia de la radiación cuando el número cuántico es grande. Aquí aparece nuevamente que la física clásica es un caso aproximado de una teoría más general, en este caso la física cuántica.

Preguntas

1. ¿Por qué fue la serie de Balmer, y no la de Lyman o Paschen, la primera en ser detectada?
2. Cuando en la ecuación de Rydberg para calcular longitudes de onda se hace n_2 igual a infinito, ¿qué se obtiene?
3. ¿Qué parte de la teoría atómica de Dalton quedó intacta?
4. En el experimento de dispersión de partículas α , ¿tienen los electrones de los átomos alguna influencia sobre la trayectoria de la partícula?
5. De las siguientes variables que intervienen en la dispersión de partículas α : parámetro de impacto y ángulo de dispersión, ¿cuál es medible en el laboratorio? Explique su respuesta.

6. En el modelo atómico de Bohr para el átomo de hidrógeno, la energía potencial del electrón es negativa y mayor en magnitud que su energía cinética. ¿Qué implica esto?
7. ¿Por qué el número cuántico n no puede ser cero en el caso del modelo atómico de Bohr? Compare este hecho con el caso de la cuantización de Planck.
8. ¿Puede un átomo de hidrógeno absorber una energía mayor que su energía de ionización? Explique su respuesta.
9. ¿Es diferente la energía de ionización del He^+ a la del hidrógeno?
10. Teniendo en cuenta el principio de correspondencia de Bohr, ¿qué significado físico tienen las órbitas de Bohr cuando el valor del número cuántico n es muy grande?

Problemas

1. (a) En un átomo de Thomson la carga positiva se encuentra distribuida uniformemente dentro de una esfera de radio del orden de 1 Å. Calcule la intensidad del campo eléctrico: i) a una distancia $r/2$ del centro; y ii) en la superficie de la esfera, para el átomo de oro ($Z = 79$). No tome en cuenta posibles efectos debido a los electrones.
 R/: a) $5.68 \times 10^{12} \frac{N}{C}$; b) $1.13 \times 10^{13} \frac{N}{C}$
2. Si la distancia de máximo acercamiento de una partícula α dirigida contra un núcleo de oro es de $3 \times 10^{-13} m$, ¿cuál es la energía cinética en MeV de la partícula α ? R/: $0.75 MeV$.
3. Muestre que la energía de los niveles energéticos en el átomo de hidrógeno se puede expresar como: $E_n = -hcR_H/n^2$.
4. Un haz de electrones incide sobre una muestra de hidrógeno gaseoso. ¿A qué diferencia de potencial se deben acelerar los electrones para que los átomos de hidrógeno, al regresar a su estado base, emitan durante el proceso la primera línea de la serie de Balmer? R/: $1.88 V$.

5. La radiación emitida por un tubo de descarga lleno de hidrógeno, incide normalmente sobre una red de difracción cuya constante es igual a $2.5 \times 10^{-4} \text{ cm}$. ¿A qué transición del electrón en el átomo de hidrógeno le corresponde la rayapectral que se observa, en el 5to orden de difracción bajo un ángulo de 41° ? R/: de $n = 3$ a $n = 2$.

Ayuda: Una vez determinada la energía de la radiación, haga un diagrama de niveles de energía para el hidrógeno y compare con su resultado. Ecuación de Bragg: $2d \operatorname{sen}(\theta) = n\lambda$.

6. ¿Qué variación experimenta la energía cinética del electrón en el átomo de hidrógeno cuando éste emite un fotón de longitud de onda de 4860 \AA ? R/: 2.55 eV .
7. Para el átomo de helio ionizado (He^+), encuentre: a) el radio de la primera órbita de Bohr y b) la energía de ionización. R/: a) $2.65 \times 10^{-11} \text{ m}$; b) 54.4 eV .
8. Aplique la teoría de Bohr a un átomo muónico formado por un núcleo de carga $+e$ y un muón μ ($m_\mu = 207 m_e$; $q_\mu = -e$) que gira alrededor de él. Calcule: a) el radio de la primera órbita de Bohr; b) la energía de ionización; c) la longitud de onda del fotón más energético que puede emitir el átomo. R/: a) $a_0/207 = 2.5 \times 10^{-13} \text{ m}$; b) $207 E_H = 2.82 \times 10^3 \text{ eV}$; c) 4.4 \AA .

Capítulo 5

Rayos X

Sin lugar a dudas, la parte del espectro electromagnético denominado rayos X es una de las herramientas más usadas comúnmente por el hombre contemporáneo en diversidad de aplicaciones.

Como ejemplo de la aplicabilidad de los rayos X podemos citar los siguientes casos: en la conservación de alimentos, en la metalurgia, en la medicina con todas sus variantes, en la determinación de fallas estructurales, en la identificación de elementos en compuestos químicos, en la determinación de estructuras en muestras sólidas y, hasta como detectores de metales.

En este capítulo nos dedicaremos a las propiedades físicas de tal radiación, tan útil a la humanidad.

5.1 Descubrimiento y propiedades de los rayos X

En el año de 1895, W. Röntgen se encontraba estudiando ciertos efectos con descargas eléctricas a través de gases y para ello utilizaba un tubo de rayos catódicos, al cual aplicaba voltajes muy grandes (del orden de kilovoltios). En uno de esos experimentos cubrió el tubo con cartulina negra, obscureció el cuarto donde trabajaba y cuando hizo pasar una descarga eléctrica por el tubo observó cerca al tubo un débil resplandor. Como sabía que los rayos catódicos sólo pueden viajar una pequeña distancia en el aire, al buscar lo qué resplandecía en la obscuridad encontró cerca al tubo de rayos catódicos una muestra de sal de bario.

Este hecho le llamó tanto la atención que abandonó sus trabajos sobre descargas eléctricas en gases y se dedicó a investigar sus causas. Una vez realizados los experimentos correspondientes, observó que la fluorescencia de la sal de bario (y de otras sales) ocurría siempre cuando la colocaba frente al punto donde el haz de rayos catódicos chocaba con-

tra la pared de vidrio del tubo. De este resultado concluyó que en dicho punto debía salir una radiación de naturaleza desconocida cuyo efecto sobre ciertas sustancias se manifiesta por su fluorescencia. Además, observó que el papel, la madera y otras sustancias que son opacas a la radiación visible y ultravioleta (no la dejan pasar) resultaron transparente a esta nueva radiación que denominó *rayos X*.

Luego procedió a establecer algunas propiedades de los rayos X, encontrando lo siguiente:

- a) velan placas fotográficas;
- b) descargan objetos cargados eléctricamente e ionizan gases;
- c) pueden penetrar considerables distancias dentro de materiales cuando estos son de bajo número atómico, pero materiales de alto número atómico son relativamente opacos a ellos;
- d) se propagan en línea recta;
- e) no son desviados por campos eléctricos o magnéticos, indicando esto que no tienen carga eléctrica.

En 1899 se tuvo la primera evidencia de que los rayos X se difractan, lo cual indicaba que podían ser radiación electromagnética y se estimó que su longitud de onda sería del orden de 10^{-10} metros. En 1906, C. G. Barkla demostró que los rayos X podían ser polarizados, otra cualidad propia de las ondas electromagnéticas.

Finalmente, en 1912 se demostró que los rayos X pueden ser difractados por cristales¹, confirmando esto que son una radiación electromagnética de longitud de onda mucho menor que la luz visible. Además, como ya se vió en los efectos Fotoeléctrico y Compton, presentan también una naturaleza corpuscular.

5.2 Emisión y espectro de rayos X

Los rayos X son emitidos cuando un haz de electrones, de gran energía cinética choca contra un material metálico que sirve de blanco (figura 5.1). Al calentar el cátodo *C* se emiten electrones que son acelerados por la gran diferencia de potencial que existe entre el cátodo y el ánodo *A* adquiriendo así una gran energía cinética. El ánodo está constituido por un material de alto punto de fusión.

La emisión de rayos X depende del material utilizado como blanco y del voltaje acelerador. Para que haya emisión de rayos X es necesario

¹Este tema se trata en el capítulo 12.

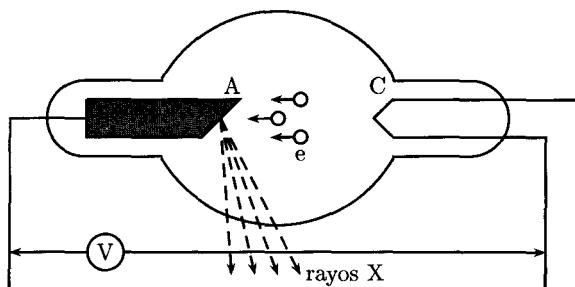
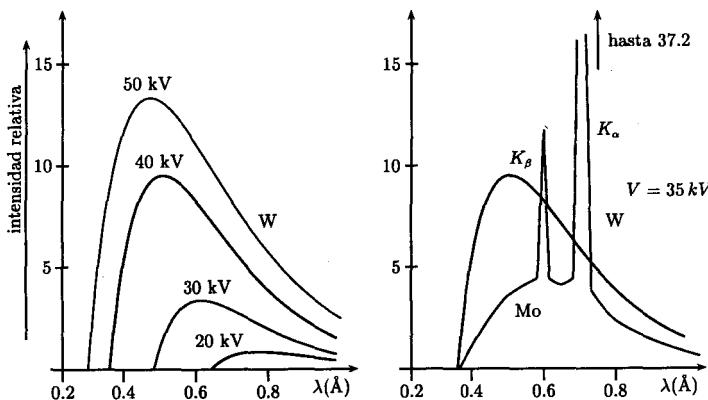


FIGURA 5.1. Esquema de un tubo de rayos X.

aplicar un voltaje acelerador mínimo que a su vez va a depender del material del blanco. Si el voltaje que acelera los electrones que inciden sobre este blanco no es suficiente, no habrá emisión de rayos X.

Al graficar la intensidad de la radiación en función de su longitud de onda, se obtienen curvas como las mostradas en la figura 5.2.



a. Espectro continuo de rayos X del elemento wolframio.

b. Espectro característico de rayos X del elemento molibdeno (Mo) y el continuo del wolframio para el mismo potencial acelerador.

FIGURA 5.2. Espectro de rayos X.

Los resultados experimentales mostraron lo siguiente:

- Una vez alcanzado el voltaje mínimo para que haya emisión de rayos X, la longitud de onda de la radiación emitida puede tomar

cualquier valor a partir de una longitud de onda mínima (figura 5.2a.). Esto es, para un valor dado del voltaje acelerador los rayos X presentan un *espectro continuo*.

- b) Al aumentar el voltaje acelerador, el valor mínimo de la longitud de onda de la radiación emitida se hace menor y la intensidad, en general, del espectro emitido, aumenta (figura 5.2a.).
- c) Además de la radiación anterior, puede aparecer una radiación muy intensa que consta de algunas longitudes de onda solamente. En la gráfica de intensidad en función de la longitud de onda aparecen unos picos para las longitudes de onda correspondientes (figura 5.2b.). Esta radiación depende solamente del material utilizado como blanco. Para un potencial acelerador dado, en un material se presentará esta radiación mientras que para otro no aparecerá. Entonces, superpuesto al espectro continuo aparece otro, denominado *espectro característico*.

Para entender la presencia de dos clases de espectros para esta radiación electromagnética, veamos qué ocurre cuando los electrones de gran energía cinética chocan contra el material que sirve de blanco.

a) *Espectro continuo*

La mayor parte de los electrones incidentes pierden toda su energía cinética de dos maneras: en colisiones sucesivas con partículas del material que sirve como blanco, o en una sola colisión con él.

En el primer caso, van cediendo poco a poco su energía a las partículas con las cuales chocan y esto se manifiesta por un aumento de la temperatura del material (transformación de energía cinética en calor). De ahí la necesidad de utilizar materiales con alto punto de fusión.

En el segundo caso, los electrones son desacelerados (o frenados) bruscamente al chocar contra el blanco. Pero, de acuerdo con la teoría electromagnética, toda carga eléctrica acelerada (o desacelerada) emite radiación electromagnética. Por lo tanto, durante el proceso de colisión toda la energía cinética de un electrón es transformada en energía de un fotón.

Al salir del cátodo, los electrones tienen diferentes energías cinéticas iniciales; entonces los fotones resultantes también tendrán diferentes energías y el espectro es continuo. Los rayos X emitidos en esta forma se conocen también con el nombre de *radiación de frenado*.

Lo que no puede explicar la teoría electromagnética es la presencia de una longitud de onda mínima en el espectro continuo. Clásicamente

no existe límite inferior para la longitud de onda de la radiación emitida por la carga eléctrica acelerada. Pero desde el punto de vista cuántico de la radiación electromagnética la explicación es la siguiente. Cuando un electrón choca contra el blanco tiene una energía cinética máxima que se transforma en energía de un fotón. Como este fotón no puede tener más energía que la que tenía el electrón, entonces su energía también es máxima y por consiguiente, su longitud de onda es mínima. Esto es, se cumple que:

$$K = eV = h \nu_{\text{máx}} = h \frac{c}{\lambda_{\text{mín}}} \quad (5.1)$$

de donde:

$$\lambda_{\text{mín}} = \frac{hc}{eV} = \frac{12430 \text{ eV } \text{\AA}}{eV} = \frac{12430}{V} (\text{\AA}) \quad (5.2)$$

para el potencial acelerador V en electrón-voltios.

La expresión anterior fue encontrada en forma empírica, a partir de resultados experimentales, por W. Duane y F.L. Hunt en 1915.²

b) Espectro característico

Para entender la emisión del espectro característico de los rayos X primero se deben hacer algunas consideraciones acerca de la estructura atómica del material del blanco.

En los átomos, los electrones se encuentran distribuidos en capas alrededor del núcleo llamadas *capas electrónicas*, cada una con una energía determinada y una capacidad máxima de $2n^2$ electrones. n es el número cuántico que determina la energía de la capa electrónica y puede tomar los valores enteros 1, 2, ..., etc.

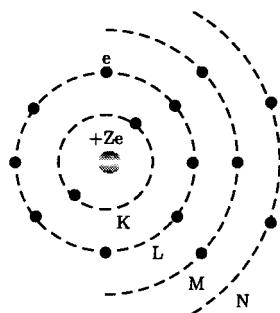
Las capas electrónicas se designan con las letras K, L, M, \dots , etc., según el valor de n . La capa K , la más cercana al núcleo, corresponde a $n = 1$; la capa L a $n = 2$; la capa M a $n = 3$, etc. (figura 5.3a.). Los electrones se van distribuyendo en ellas primero en la capa K hasta que quede llena, luego en la L y así sucesivamente.

Por ejemplo los 29 electrones del átomo de cobre se distribuyen así: 2 en la capa K , 8 en la capa L , 18 en la capa M y 1 en la capa N .

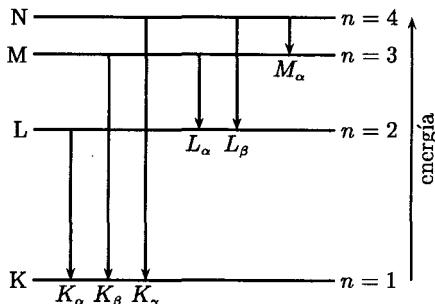
Los electrones pueden saltar de una capa a otra siempre y cuando encuentren las condiciones energéticas apropiadas. Necesariamente el

² Algunos autores, cuando interpretan los resultados de la ecuación (5.2), recurren a una analogía de un "efecto fotoeléctrico inverso", dado que ahora se absorben electrones y se producen fotones. Sin embargo, el proceso es más complicado y lo que se plantea en (5.1) es una expresión para la conservación de la energía en el proceso de colisión.

electrón que hace la transición debe liberar el exceso de energía que tiene y lo hace emitiendo radiación electromagnética de energía igual a la diferencia de energía que hay entre las capas en que ocurrió la transición. Entonces, electrones que llegan a la capa K procedentes de las demás capas, originan la **emisión de radiación electromagnética de ciertas longitudes de onda solamente**. Al conjunto de estas longitudes de onda se llama serie K .



a. Esquema de las capas electrónicas en un átomo de varios electrones.



b. Diagrama de transiciones entre capas electrónicas.

FIGURA 5.3. Capas electrónicas de un átomo de varios electrones.

Cada longitud de onda a su vez también tiene un nombre: si la transición tiene lugar entre las capas K y L se llama línea K_α ; si es entre las capas K y M se llama línea K_β , etc.

Si los electrones llegan a la capa L originan la serie L compuesta de las líneas L_α , L_β , etc. En la figura 5.3b. se encuentra un diagrama que muestra las transiciones electrónicas entre capas con sus respectivos nombres.

En cuanto a la energía para remover un electrón de un átomo, si se encuentra en una capa exterior (lejos del núcleo) se necesitan unos 100 eV. Pero si es un electrón interior (capas K o L) se requieren energías del orden de 10^4 eV o más. Por consiguiente, las energías involucradas en las transiciones entre capas electrónicas son muy grandes. Ahora volvamos al espectro característico de rayos X.

De todos los electrones que inciden sobre el blanco unos cuantos solamente llegan a realizar colisiones con los electrones atómicos. Si un electrón incidente choca con un electrón atómico, debido a la gran energía que tiene el primero, puede desalojar al segundo de su corres-

pondiente capa electrónica dejando una vacancia en ella. Esto **puede** ocurrir aún en la capa *K* donde los electrones atómicos se encuentran fuertemente ligados al núcleo.

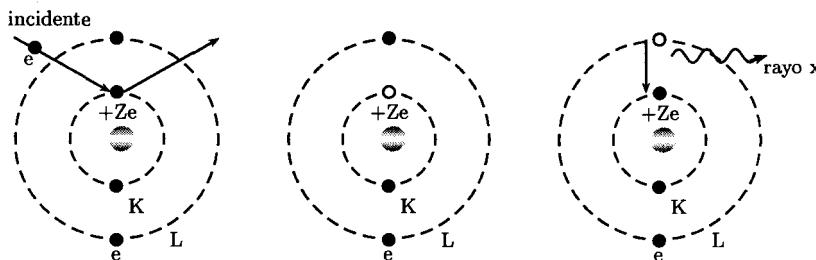


FIGURA 5.4. Esquema de la emisión de rayos X característicos.

Inmediatamente después de quedar libre un puesto en la capa electrónica, un electrón atómico de otra capa superior (de mayor energía) pasará a ocupar el lugar y en el proceso liberará su exceso de energía en forma de radiación electromagnética.

Como la diferencia de energía entre capas electrónicas es una cantidad fija y propia a los átomos de cada elemento, la radiación emitida tendrá una sola longitud de onda característica del elemento considerado. En la gráfica de intensidad en función de la longitud de onda aparecerá un pico.

El electrón atómico que dio lugar a la emisión de radiación al cambiar de capa electrónica, también dejó una vacancia que a su vez será llenada por otro electrón atómico que también emitirá radiación de una sola longitud de onda y así sucesivamente.

Este es el mecanismo responsable del espectro característico de rayos X y, por consiguiente, este espectro sólo depende del material utilizado como blanco. Claro está que el espectro se podrá observar siempre y cuando la energía del electrón incidente sea suficiente para desalojar un electrón atómico de su respectiva capa.

En la figura 5.4 se presenta en forma gráfica la emisión de un rayo X característico.

Ejemplo 5.1.

¿Cuál es la longitud de onda límite de la región del espectro continuo de rayos X, sabiendo que si el voltaje aplicado al tubo disminuye en 23 kV, la longitud de onda buscada se hace dos veces mayor?

Solución

Sean λ_1 y λ_2 las longitudes de onda mínimas. De acuerdo con la ecuación (5.2) se tiene que:

$$\lambda_1 = \frac{hc}{eV_1} \quad y \quad \lambda_2 = \frac{hc}{eV_2}$$

donde:

$$\lambda_2 = 2\lambda_1 \quad y \quad V_2 = V_1 - 23 \times 10^3 \text{ V}$$

De la razón entre las longitudes de onda tenemos que:

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = 2 = \frac{V_1}{V_1 - 23 \times 10^3 \text{ V}}$$

de donde:

$$V_1 = 46 \times 10^3 \text{ V}$$

Conocido el voltaje aplicado al tubo de rayos X, la longitud de onda mínima para este espectro de rayos X es:

$$\lambda_1 = \frac{12430 \text{ (eV } \text{\AA})}{46 \times 10^3 \text{ eV}} = 0.27 \text{ \AA}$$

□

5.3 Determinación de la carga nuclear

Al estudiar los espectros característicos de rayos X para diferentes elementos se encontró que la longitud de onda de las líneas K varían regularmente al pasar de un elemento a otro.

Esta regularidad en los espectros característicos fue observada por H. Moseley en 1913, quien luego de medir las longitudes de onda correspondientes a las líneas K_α (la primera de la serie K) para diferentes elementos, encontró que existía una relación sencilla entre la longitud de onda de la línea y el número atómico del elemento correspondiente. Esta relación se expresa de la siguiente manera:

$$\nu^{1/2} = A(Z - b) \tag{5.3}$$

donde Z es el número atómico del elemento que se utiliza como **blanco**. A y b dos constantes cuyos valores dependen de la transición observada. El factor $Z - b$ representa la carga neta, o efectiva, del núcleo que actúa sobre el electrón atómico que realiza la transición y b se denomina *constante de apantallamiento*. Para las series K y L , que son las más comunes, los valores de la constante b son respectivamente:

$$b_k = 1 \quad b_L = 7.4 \quad (5.4)$$

y los valores teóricos de la constante A para las líneas K_α y L_α (primeras de cada serie) son:

$$A_{K_\alpha} = 4.97 \times 10^7 \text{ s}^{-1/2} \quad A_{L_\alpha} = 2.14 \times 10^7 \text{ s}^{-1/2} \quad (5.5)$$

valores que coinciden bastante bien con los correspondientes valores experimentales. Para otras líneas de las series K y L los valores anteriores son un poco diferentes.

Al graficar $\sqrt{\nu}$ en función de número atómico se obtiene una línea recta, gráfica que se denominó *diagrama de Moseley* y, que en ese momento, fue de gran utilidad para verificar el ordenamiento de los elementos en la tabla periódica. Se estableció la equivalencia entre el número atómico Z y la posición del elemento correspondiente en la tabla periódica y se predijo la existencia de los elementos con Z igual a 43, 61, 72 y 75, desconocidos entonces.

También se mostró que había que invertir el orden de los elementos níquel (Ni) y cobalto (Co) en la tabla periódica porque estaban ubicados de acuerdo con sus pesos atómicos (58.71 y 58.94 respectivamente) y no por sus números atómicos (28 y 27 respectivamente) como debía ser.

5.4 Absorción de rayos X

Cuando un haz de rayos X atraviesa un material, los fotones del haz interactúan con los átomos del material produciendo efectos fotoeléctricos y Compton (como se vio en el capítulo anterior), con el resultado de que parte de los fotones incidentes desaparecen, los demás son dispersados y la intensidad del haz cuando emerge del material es menor.

Al graficar la intensidad del haz que emerge del material en función del espesor que atraviesa, se encontró que la intensidad del haz decae exponencialmente (figura 5.5). Esto es, la intensidad de los rayos X que atraviesa un material obedece a la ley de atenuación exponencial:

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad (5.6)$$

donde I_0 es la intensidad del haz incidente; I es la intensidad del haz emergente después de atravesar el material; μ es una constante propia a

cada material que depende de la energía del haz de rayos X y se llama *coeficiente de absorción*; x es el espesor del material.

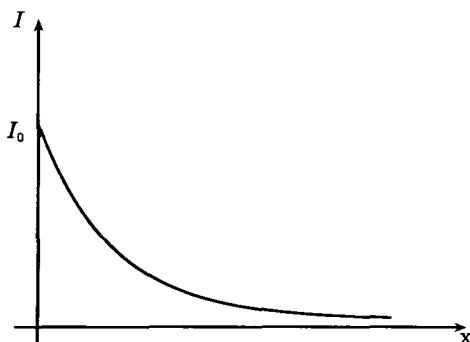


FIGURA 5.5. Variación de la intensidad de un haz de rayos X en función del espesor del material que atraviesa.

La absorción de rayos X por un determinado material es proporcional a la densidad del mismo e independiente de su estado físico o químico. Esto se encuentra expresado en la relación:

$$\mu = \mu_m \rho \quad (5.7)$$

donde ρ es la densidad del material y μ_m es el factor de proporcionalidad denominado *coeficiente de absorción másico*. Este coeficiente también depende de la energía de los rayos X.

En ocasiones se necesita saber cuál es el espesor de un material determinado que reduce la intensidad del haz incidente a la mitad de su valor ($I = I_0/2$). Este espesor, denominado *capa hemirreductora*, se obtiene de la siguiente manera:

Llamando $x_{1/2}$ el espesor de la capa hemirreductora, de la ecuación (5.6) se tiene que:

$$I = \frac{1}{2} I_0 = I_0 e^{-\mu x_{1/2}}$$

de donde:

$$x_{1/2} = \frac{\ln 2}{\mu} = \frac{\ln 2}{\mu_m \rho} \quad (5.8)$$

Ejemplo 5.2.

La longitud de onda de un haz de rayos X de cierta intensidad es de 0.2 Å.

- a) ¿Cuántas veces se hará menor su intensidad después de pasar a través de una capa de hierro de 0.24 mm de espesor?
- b) ¿Cuál será el espesor de la capa hemirreductora del hierro para estos rayos X? El coeficiente de absorción másico para esta longitud de onda es de $1.1 \text{ m}^2/\text{kg}$ y la densidad del hierro es 7.9 g/cm^3 .

Solución

- a) Si la intensidad de los rayos X es I_0 , después de atravesar la capa de hierro la intensidad I será n veces menor e igual a I_0/n .

De acuerdo con la ley de atenuación exponencial se tiene que:

$$I = \frac{I_0}{n} = I_0 e^{-\mu x}$$

de donde se obtiene que:

$$n = e^{\mu x}$$

Reemplazando datos, sin olvidar unificar unidades, se obtiene:

$$n = 8$$

- b) Utilizando directamente la ecuación (5.8):

$$x_{1/2} = \frac{\ln 2}{\mu_m \rho} = 0.08 \text{ mm}$$

□

Preguntas

1. ¿Cómo se produce el espectro continuo de rayos X? ¿De qué depende?
2. ¿Cómo se produce el espectro característico de rayos X? ¿De qué depende?
3. ¿Cuál es la condición fundamental para que aparezca el espectro característico de rayos X? Explique.
4. ¿Puede la física clásica explicar la presencia de una longitud de onda mínima en el espectro continuo de rayos X? Explique.

5. A partir de condiciones energéticas solamente, diga cómo será el valor de la constante A en la ecuación de Moseley para una transición K_β comparada con su valor para la transición K_α .
6. Explique cómo se reduce la intensidad de un haz de rayos X mediante la utilización de un material.
7. ¿Cuáles son las unidades del coeficiente de absorción y del coeficiente de absorción mísico?
8. ¿El coeficiente de absorción de un material para los rayos X es una constante propia de éste? Explique.
9. De lo expuesto en este capítulo, ¿puede usted decir cómo depende la intensidad de un haz de rayos X del número atómico del material que atraviesa?

Problemas

1. Entre los electrodos de un tubo de rayos X se aplica una diferencia de potencial de 60 kV . Si la longitud de onda mínima de los rayos X emitidos es de 0.206 \AA , encuentre el valor de la constante de Planck.
2. En un tubo de rayos X los electrones son acelerados mediante una diferencia de potencial de 50 kV . Encuentre la longitud de onda mínima de los rayos X emitidos, si solamente la mitad de la energía de cada electrón se convierte en un fotón. R/: 0.497 \AA .
3. Si la línea K_α de un elemento tiene una longitud de onda de 3.50 \AA , ¿cuál es este elemento? (Consulte una tabla periódica para identificar su símbolo). R/: $Z = 20$
4. Los rayos X provenientes de un tubo con blanco de cobalto ($Z = 27$) presentan tres picos en el espectro característico correspondientes a líneas K_α . Una muy intensa de longitud de onda de 1.785 \AA , proveniente del cobalto, y otras dos más débiles, de longitudes de onda de 2.285 y 1.537 \AA provenientes de dos elementos desconocidos presentes en el blanco.

A partir de la ley de Moseley y sin utilizar explícitamente el valor de la constante A , encuentre el número atómico de los dos elementos e identifíquelos. R/: 24 y 29.

5. Calcule el espesor de la capa hemirreductora del aluminio para rayos X de cierta longitud de onda, sabiendo que el coeficiente

de absorción mísico del aluminio para esa longitud de onda es de $5.3 \text{ m}^2/\text{kg}$. La densidad del aluminio es 2.6 g/cm^3 . R/: 0.05 mm.

6. El coeficiente de absorción de cierto material para rayos X de longitud de onda de 1 \AA es de 3 cm^{-1} y para una longitud de onda de 2 \AA es de 15 cm^{-1} . Si el haz de rayos X, que contiene intensidades iguales de las dos radiaciones anteriores, incide sobre el material considerado, ¿para qué espesor de éste la razón de las dos intensidades transmitidas, I_1/I_2 , será de 4 a 3? R/: 0.024 cm.

Capítulo 6

Propiedades ondulatorias de la materia

6.1 Ondas de materia

Las teorías atómicas desarrolladas durante los primeros 15 años del siglo XX sirvieron de guía en el estudio de los fenómenos atómicos. Sin embargo, estas teorías tienen sus limitaciones y algunos aspectos no son satisfactorios desde el punto de vista teórico. El hecho que describan adecuadamente el átomo de hidrógeno y los átomos hidrogenoides es casi una casualidad y hasta Bohr consideró su teoría como un paso intermedio en la búsqueda de una teoría más coherente.

La teoría atómica de Bohr es incompleta porque no describe en modo alguno el paso de un estado cuántico a otro y, además, contiene una incongruencia lógica desde el punto de vista de la teoría electromagnética.

Aún durante su período de mayor éxito, esta teoría no se consideró como una expresión más o menos acabada y definitiva del átomo, sino más bien como un modelo útil e indispensable para llegar a las modificaciones necesarias de las teorías clásicas para poderlas aplicar, luego, al mundo microscópico.

La solución al problema se logró entre 1924 y 1927 cuando, por caminos diferentes, pero matemáticamente equivalentes, se desarrolló una nueva teoría, llamada mecánica cuántica.

Uno de los principios físicos que contribuyó al desarrollo de esta nueva teoría fue el postulado de L. De Broglie sobre aspectos ondulatorios de la materia, enunciado en 1924.

6.1.1 Postulado de De Broglie

Volvamos unos siglos atrás en la historia de la física. Las teorías acerca de la luz son un ejemplo de cómo dos teorías contradictorias, ambas

sugeridas por resultados experimentales o evidencias de la vida diaria, pueden contribuir al avance del conocimiento. Como ya deben haber recordado, las dos teorías acerca de la luz son la corpuscular y la ondulatoria.

La teoría corpuscular de la luz es la más antigua y se basó en dos hechos conocidos y simples: su propagación en línea recta y su reflexión. Durante el siglo XVII se descubrieron los fenómenos de difracción e interferencia que no se pueden explicar corpuscularmente. Pero, a pesar de esto, los investigadores de la época defendieron durante bastante tiempo la teoría corpuscular incluyendo a Newton que estaba familiarizado con fenómenos de interferencia¹.

A principios del siglo XIX, A. Fresnel y T. Young realizaron los primeros experimentos de interferencia y difracción los cuales dieron paso a la nueva teoría para la luz: la teoría ondulatoria. Esta teoría puede explicar los fenómenos de interferencia, difracción, refracción, reflexión y propagación en línea recta.

Con los adelantos teóricos que proporcionó la visión ondulatoria de la luz queda establecido el modelo ondulatorio.

Con el transcurso de los años siguientes, se encontraron, otros resultados que reforzaron la visión ondulatoria de la luz. Uno de ellos la polarización de la luz visible y otro, el más espectacular, la formulación de la teoría electromagnética, establecida por Maxwell en los años 50 y 60 del mencionado siglo, con lo cual se le da sustento teórico a las ondas electromagnéticas.

Pero, al mismo tiempo, en el campo de la física experimental comenzaron a aparecer resultados que no son explicables a partir de la teoría ondulatoria (efecto Fotoeléctrico, radiación del Cuerpo Negro, etc.) y como vimos en los capítulos anteriores hubo necesidad de volver al modelo corpuscular de la luz para explicarlos.

Así las cosas, uno de los problemas cruciales de los físicos al principio del siglo XX era saber si la luz es un fenómeno ondulatorio o si es un fenómeno corpuscular y puesto que se necesita de las dos teorías, se decidió aceptar su doble naturaleza.

Recuérdese que no podemos ver simultáneamente los dos aspectos: en un caso observaremos su naturaleza ondulatoria, en otro su naturaleza corpuscular.

En esta época L. De Broglie reanudó sus estudios de física, interrumpidos por la Primera Guerra Mundial, y dos hechos le llamaron la atención: a) la definición de la energía de la partícula de luz (fotón) en la cual aparece una variable propia de ondas como es la frecuencia y b)

¹Por ejemplo, los conocidos anillos de Newton deben su nombre al eminente físico inglés.

la presencia de números enteros para definir el movimiento de los electrones en el átomo. Estos dos hechos lo llevaron a hacer los siguientes razonamientos:

- a) Una teoría corpuscular no contiene elementos que permitan definir una frecuencia. Entonces, De Broglie sugiere que deben existir ondas de alguna clase asociadas a los fotones que permiten explicar los fenómenos de interferencia y difracción que se observan.
- b) En la explicación de algunos fenómenos ondulatorios, en especial la interferencia y la difracción, aparecen de manera espontánea los números enteros. Así, De Broglie sugiere que a los electrones también se les asocie una propiedad ondulatoria. Además, pensaba que, si la radiación electromagnética se presenta bajo dos formas, ¿por qué no lo haría la materia?

Estos razonamientos lo llevaron a formular lo que conocemos con el nombre de Postulado de De Broglie:

Es necesario tanto para la materia como para la radiación, en particular la luz, introducir simultáneamente el concepto de partícula y el concepto de onda. Como no pueden ser independientes debe existir un paralelismo entre el movimiento de la partícula y la propagación de la onda asociada que gobierna su movimiento.

En su tesis de doctorado De Broglie establece esta correspondencia y el resultado se publica en 1924.

6.1.2 Ondas de materia

Para introducir el concepto de onda en la teoría de la materia podemos visualizar el problema de la siguiente manera: una partícula con carga eléctrica crea a su alrededor un campo eléctrico que se propaga en el espacio mediante ondas llamadas ondas electromagnéticas.

En forma análoga, podemos imaginar que una partícula en movimiento crea a su alrededor un campo que llamaremos *campo material* y que también se propagará mediante ondas que llamaremos *ondas de materia*.

En el primer caso las ondas se describen por medio de una función matemática llamada función de onda. En el segundo caso también usaremos una función de onda; pero a diferencia de las ondas electromagnéticas, las ondas materiales se interpretan de una manera muy diferente como veremos en el próximo capítulo.

Consideremos una partícula material, por ejemplo un electrón, que se mueve libremente con velocidad constante v . De acuerdo con la teoría especial de la relatividad su energía y cantidad de movimiento son:

$$E = mc^2 \quad p = mv \quad m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Si se asocia una onda a esta partícula, es de esperar que se mueva en la misma dirección de la partícula. Representemos esta onda por un función matemática de la forma:

$$\varphi(\vec{x}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (6.1)$$

donde A es la amplitud constante de la onda, \vec{k} su vector de onda paralelo a la dirección de propagación y ω su frecuencia angular. Esta no es más que la expresión general de la función que en física clásica describe el movimiento ondulatorio². La magnitud del vector de onda y la frecuencia angular están dados por las relaciones:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \omega = 2\pi\nu \quad (6.2)$$

donde λ y ν son la longitud de onda y la frecuencia del movimiento ondulatorio, respectivamente.

La onda descrita por la ecuación (6.1) es una onda plana: los planos de fase constante ($\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t$), se propagan con una velocidad denominada *velocidad de fase* definida mediante la relación:

$$v_f = \frac{\omega}{k} \quad (6.3)$$

Podríamos pensar que la velocidad de fase es entonces igual a la velocidad de la partícula. Sin embargo toda señal o energía transportada por una onda se propaga en el espacio con la velocidad denominada *velocidad de grupo*, y no con la velocidad de fase. Por lo tanto, si imaginamos la partícula como una cantidad de energía localizada en cierto volumen finito podemos suponer que su velocidad será igual a la velocidad de grupo de la onda asociada, siendo esta última definida mediante la relación:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (6.4)$$

Todavía debemos hacer otra suposición acerca de la dependencia que debe existir entre las variables propias de un movimiento ondulatorio (k, ω) y las variables de una partícula (p, E). Esto es, necesitamos conocer cómo la onda gobierna el movimiento de la partícula.

² $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$

Supongamos que la relación $E = h\nu$ es válida para toda clase de partículas. Por consiguiente:

$$E = h\nu = h \frac{\omega}{2\pi} = \hbar\omega = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (6.5)$$

A partir de la ecuación anterior, podemos encontrar la velocidad de grupo de la onda asociada a la partícula en movimiento:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\omega}{dv} \cdot \frac{dv}{dk} = \frac{m_0 v}{\hbar} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-3/2} \frac{dv}{dk}$$

Como hemos supuesto que la velocidad de grupo es igual a la velocidad de la partícula, la ecuación anterior se transforma en:

$$dk = \frac{m_0}{\hbar} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-3/2} dv \quad (6.6)$$

Integrando este resultado entre los límites 0 y k para el vector de onda y entre 0 y v para la velocidad de la partícula:

$$k = \frac{m_0 v}{\hbar \sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{p}{\hbar} \quad (6.7)$$

Reemplazando el vector de onda por su expresión en función de la longitud de onda, el resultado final es:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (6.8)$$

Esta fue la relación propuesta por De Broglie para calcular la longitud de onda asociada a una partícula en movimiento y el desarrollo presentado aquí fue el que hizo De Broglie en su trabajo original.

La ecuación (6.8) es válida tanto para partículas materiales como para fotones.

La longitud de onda de la onda asociada a una partícula en movimiento se denomina *longitud de onda de De Broglie* y la onda correspondiente *onda de materia* u onda de De Broglie. Nótese que estas ondas existen solamente si la partícula está en movimiento.

Ejemplo 6.1.

¿Cuál es la longitud de onda de un partícula de polvo de radio $r = 10^{-4} \text{ cm}$ y densidad $\rho = 10 \text{ g/cm}^3$, que se mueve con una velocidad de 1 cm/s ? y ¿Cuál es la de un electrón cuya energía cinética es de 10 eV ?

Solución

Como la velocidad de la partícula de polvo es muy pequeña comparada con la de la luz podemos calcular su cantidad de movimiento a partir de la expresión clásica. Esto es:

$$p = m_0 v = \frac{4}{3} \pi r^3 \rho v \simeq 4 \times 10^{-11} \frac{g \text{ cm}}{\text{s}}$$

y la longitud de onda de De Broglie será entonces:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.63 \times 10^{-27} \text{ erg s}}{4 \times 10^{-11} \text{ g cm/s}} \simeq 1.6 \times 10^{-16} \text{ cm}$$

Esta cantidad es muy pequeña comparada con cualquier cantidad física de nuestro mundo cotidiano a pesar de haber considerado una cantidad de movimiento mucho menor que la de partículas estudiadas clásicamente. Por consiguiente, la investigación de una partícula macroscópica en movimiento no sirve para probar la validez del postulado de De Broglie porque el resultado es una cantidad difícil de medir experimentalmente.

En el caso del electrón, cuya energía cinética es de $10 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-11} \text{ erg}$, nuevamente la velocidad de la partícula es pequeña comparada con la velocidad de la luz y podemos usar la expresión clásica para determinar su cantidad de movimiento:

$$\begin{aligned} p &= (2mK)^{1/2} = (2 \times 9.1 \times 10^{28} \text{ g} \times 1.6 \times 10^{-11} \text{ erg})^{1/2} \\ &= 1.7 \times 10^{-19} \text{ g cm/s} \end{aligned}$$

y la longitud de onda de De Broglie será igual a:

$$\lambda = \frac{h}{p} = 3.9 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

Siendo todavía una cantidad muy pequeña, es del orden de magnitud de la distancia interatómica en un cristal lo cual sugiere la posibilidad de observar efectos de difracción en la dispersión de un haz de electrones por un cristal. □

6.2 Experimento de Davisson-Germer

Aproximadamente dos años después de que De Broglie enunciara su postulado se logró su verificación experimental. Los experimentos correspondientes fueron realizados por C.J Davisson y L.H. Germer en 1925 y por G.P. Thomson en 1926.

En 1925 Davisson y Germer iniciaron una serie de experimentos en los cuales trataban de medir ciertos efectos cuando un haz de electrones incidía sobre un bloque de níquel. Debido a un accidente el bloque que utilizaban se oxidó. Para limpiarlo (remover la capa superficial de óxido), lo calentaron a altas temperaturas lo cual alteró su estructura cristalina haciendo que se transformara en un gran monocrystal.

Al reanudar sus experimentos los resultados fueron totalmente diferentes a los que habían obtenido inicialmente. Mostraban ahora algo que podía identificarse como un patrón de difracción, hecho que se confirmó con experimentos posteriores.

En 1926, G.P. Thomson realizó otro experimento en el cual hacía pasar un haz de electrones a través de una lámina metálica muy delgada. También observó un patrón de difracción.

Estos resultados mostraron sin lugar a dudas la existencia de las ondas de materia o, en otras palabras, el comportamiento ondulatorio de los corpúsculos materiales.

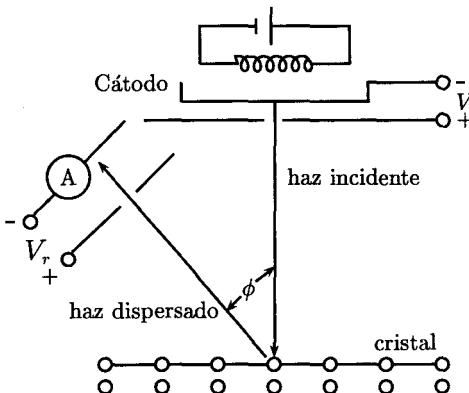


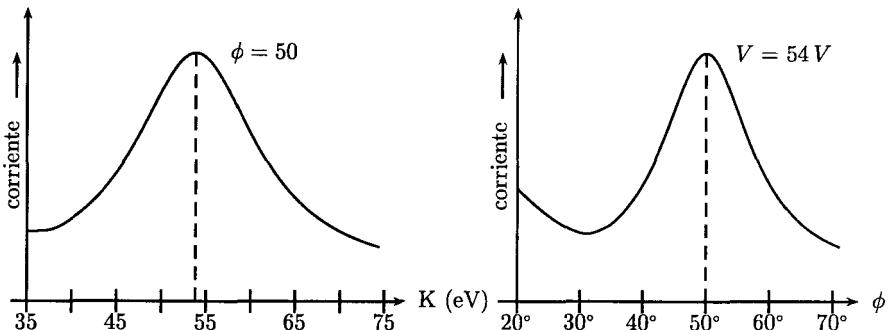
FIGURA 6.1. Esquema del dispositivo experimental para observar la difracción de electrones.

El experimento de Davisson y Germer fue el siguiente: un haz de electrones de baja energía incide sobre un monocrystal de níquel donde es dispersado (figura 6.1). Los electrones provienen de un cátodo calentado por un filamento y luego son acelerados por una diferencia de potencial V . El número de electrones dispersados por el cristal, en un ángulo dado, es medido por un detector adecuado, después de haber atravesado un potencial retardador, V_r , un poco menor que el potencial acelerador V . Esto se hace con el objeto de medir solamente los electrones que han perdido poca o ninguna energía en la colisión con el cristal.

Electrones con poca energía pueden perderla fácilmente al penetrar en el cristal. Entonces los electrones observados en el detector serán solamente aquellos que han sido dispersados mediante colisiones elásticas por la superficie del cristal.

Los resultados experimentales mostraron lo siguiente:

- Al graficar la corriente eléctrica producida por los electrones dispersados en función de su energía cinética, se presenta un máximo cuando dicha energía es de 54 eV; es decir, para un potencial acelerador de 54 voltios. Para energías mayores la corriente disminuye o sea que el número de electrones dispersados va siendo menor (figura 6.2a.).



- a. En función de la energía cinética de los electrones.

- b. En función del ángulo de dispersión ϕ .

FIGURA 6.2. Corriente eléctrica producida por los electrones dispersados.

- Al graficar la corriente eléctrica en función del ángulo formado entre el haz incidente y el haz dispersado, ϕ , se presenta un máximo para el ángulo de 50° (figura 6.2b.).

Estos resultados se pueden explicar como consecuencia de una interferencia constructiva de ondas asociadas a los electrones que son dispersados por los átomos de la superficie cristalina. No es la interferencia entre ondas de dos o más electrones, sino la interferencia constructiva entre diferentes partes de la onda asociada a un sólo electrón que han sido dispersadas desde varias regiones del cristal. Esto se demostró haciendo incidir los electrones sobre el cristal prácticamente de uno en uno, obteniéndose el mismo patrón de difracción.

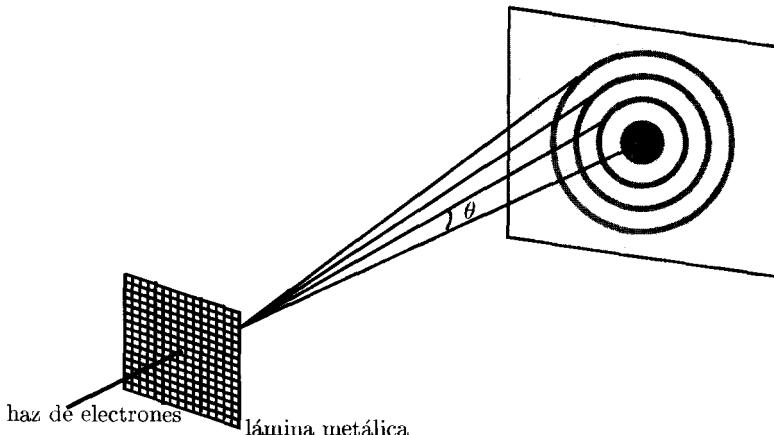


FIGURA 6.3. Patrón de difracción producido por electrones de alta energía que pasan a través de una lámina metálica.

En el experimento de G.P. Thomson se colocó una placa fotográfica detrás de la lámina metálica para detectar los electrones dispersados al pasar a través de ella (figura 6.3). La fotografía mostró claramente los típicos anillos de difracción y los ángulos de dispersión (θ en la figura 6.3) verifican la ley de Bragg para la difracción³.

El resultado obtenido por Davisson y Germer se puede usar para comprobar teóricamente el postulado de De Broglie.

La longitud de onda de De Broglie para un electrón de 54 eV de energía cinética es:

$$\lambda = \frac{h}{(2mK)^{1/2}} = 1.67 \text{ \AA}$$

La separación entre los planos atómicos del cristal de níquel usado por Davisson y Germer era de 0.91 Å; en el experimento el ángulo ϕ fue de 50° y debido a la simetría con respecto a la perpendicular a los planos atómicos (figura 6.4) se tiene que $\phi + 2\theta = 180^\circ$. Por lo tanto: $\theta = 65^\circ$.

Suponiendo que el máximo número de electrones dispersados corresponde al primer orden de difracción, esto es $n = 1$, y reemplazando en la ecuación de Bragg⁴ los valores del ángulo y la distancia interplanar se obtiene:

$$\lambda = 2 \times 0.91 \times \sin 65^\circ = 1.65 \text{ \AA}$$

³Los conceptos sobre la difracción en cristales se amplían en el capítulo correspondiente al estado sólido, capítulo 12.

⁴Ecuación de Bragg, $2d \sin \theta = n\lambda$.

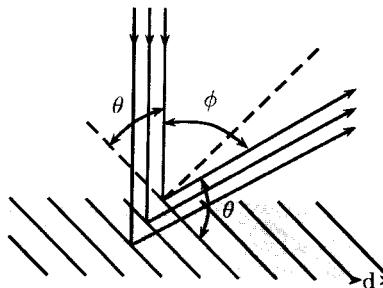


FIGURA 6.4. Difracción sobre los planos de un cristal.

El valor teórico y el valor obtenido a partir de los resultados experimentales coinciden dentro del límite de exactitud que pueden dar los datos experimentales.

Para voltajes aceleradores más grandes se ha podido observar un segundo máximo en la corriente eléctrica producida por los electrones dispersados, el cual corresponde al segundo orden de difracción.

El hecho de que a las partículas materiales se les pueda asociar ondas se ha demostrado también con átomos, moléculas y partículas sin carga eléctrica como los neutrones.

De esta manera quedó plenamente establecida la existencia de las ondas materiales. En otros términos, se establece que la materia también tiene una doble naturaleza como la tiene la radiación electromagnética.

Ejemplo 6.2.

Deducir la expresión para la longitud de onda de De Broglie de un electrón que se mueve con una velocidad del orden de magnitud de la velocidad de la luz, en función del potencial acelerador V.

Solución

Al ser acelerado por la diferencia de potencial V, el electrón adquiere una energía cinética igual a eV. Entonces su energía total y cantidad de movimiento son:

$$E = E_0 + K = E_0 + eV \quad p^2 = \frac{E^2 - E_0^2}{c^2}$$

Reemplazando la energía total en la ecuación para la cantidad de movi-

miento se tiene que:

$$p^2 = \frac{1}{c^2} \left(1 + \frac{eV}{2E_0} \right) 2E_0 eV$$

y la longitud de onda para este electrón es:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{(2m_0 eV)^{1/2}} \left(1 + \frac{eV}{2m_0 c^2} \right)^{-1/2}$$

¿Cuál será la expresión para el caso no relativista? □

6.3 Principios de incertidumbre de Heisenberg

6.3.1 Partícula y paquete de onda

Una de las consecuencias más sorprendentes que se derivan de la física cuántica y que pueden ser interpretadas en términos sencillos, haciendo uso del postulado de De Broglie, son los *principios de incertidumbre* enunciados por W. Heisenberg.

Aun cuando rigurosamente estos principios resultan espontáneamente de la descripción matemática de la teoría cuántica, el fondo físico se centra en el comportamiento ondulatorio de las partículas.

Cuando una partícula material se mueve con una velocidad v , desde el punto de vista clásico tiene una cantidad de movimiento $p = mv$ y el postulado de De Broglie le asigna una longitud de onda λ al campo material ondulatorio que acompaña su movimiento, de tal manera que si su velocidad está perfectamente determinada (lo cual implica que su cantidad de movimiento también lo está) la longitud de onda tiene uno y solamente un valor: $\lambda = h/p$.

La precisión en la longitud de onda hace que la única manera de representar la característica ondulatoria sea por medio de una onda plana. Esto es, una onda plana es la mejor descripción del movimiento ondulatorio monocromático (con longitud de onda constante de valor único).

Ahora bien, una onda plana tiene la propiedad fundamental de ocupar todo el espacio porque su extensión espacial no es acotada (figura 6.5).

Si suponemos que el movimiento de la partícula puede ser descrito por una perturbación que ocupa todo el espacio, no se va a tener certeza de su localización puesto que está distribuida dentro de la onda. Entonces, el hecho de que su cantidad de movimiento es conocida con certeza hace que la posibilidad de determinar la posición de la partícula sea nula, pues, en primera instancia, puede estar situada en cualquier

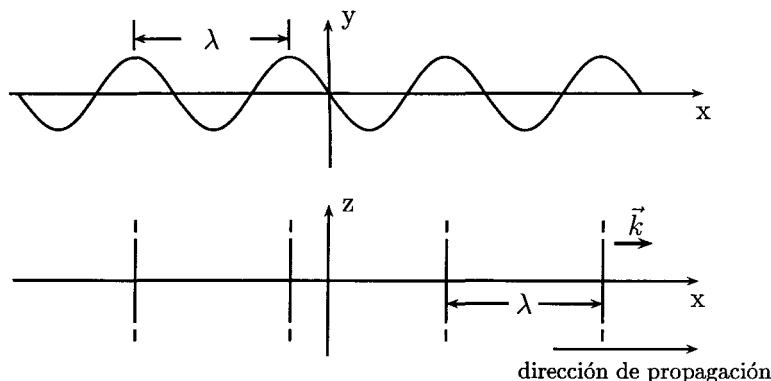


FIGURA 6.5. Esquema de una onda plana.

parte dentro de esa onda plana que se extiende en todo el espacio y, la incertidumbre sobre su posición será total.

Esta introducción nos permite entender la esencia del primer principio de incertidumbre de Heisenberg:

Es imposible medir exactamente en forma simultánea la posición y la cantidad de movimiento de una partícula.

La expresión matemática de este principio, la cual derivaremos más adelante, es la siguiente:

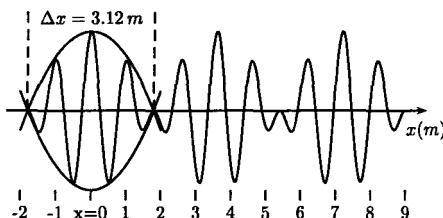
$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \hbar \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{1}{2} \hbar \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (6.9)$$

donde Δx , por ejemplo, es la incertidumbre en la posición de la partícula a lo largo del eje x ; Δp_x es la incertidumbre en la medición de su cantidad de movimiento en dirección x ; etc. Es forzoso enfatizar que las medidas *deben ser hechas simultáneamente*.

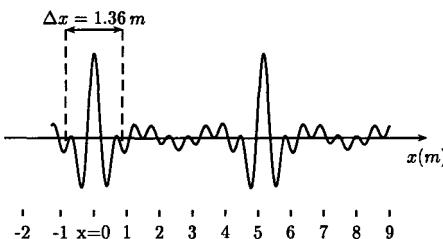
Veamos ahora cómo, cuando se gana en conocimiento sobre la posición de la partícula, se pierde precisión en la medida de su cantidad de movimiento.

Una manera de reducir la extensión espacial del movimiento ondulatorio que describe una partícula es, por ejemplo, superponer varias ondas planas con diferentes longitudes de onda para formar lo que se denomina un *paquete de ondas*.

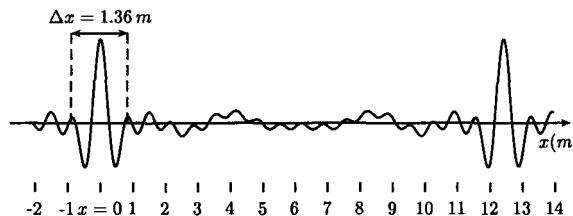
Si se hace la superposición de tal manera que la propagación ondulatoria del campo material ocupe una región finita del espacio, obtendríamos una situación como la mostrada en la figura 6.6.



a. $k_0 = 12 \text{ m}^{-1}$, $\Delta k/2 = 1 \text{ m}^{-1}$, $N=2$



b. $k_0 = 12 \text{ m}^{-1}$, $\Delta k/2 = 4 \text{ m}^{-1}$, $N=8$



c. $k_0 = 12 \text{ m}^{-1}$, $\Delta k/2 = 4 \text{ m}^{-1}$, $N=16$

FIGURA 6.6. Construcción de paquetes de onda.

Teniendo en cuenta que la longitud de onda y la magnitud del vector de onda están relacionadas por $k = 2\pi/\lambda$, es completamente análogo hacer la superposición con diferentes vectores de onda k .

En la figura 6.6a. se han superpuesto dos ondas planas con vectores de onda de 11 y 13 m^{-1} . Es decir, se ha adoptado un desarrollo alrededor de $k_0 = 12 \text{ m}^{-1}$ con $\Delta k = 2 \text{ m}^{-1}$ ⁵. Como se aprecia en la figura, la extensión del paquete es de 3.12 m , bastante más estrecho que el de infinito mostrado esquemáticamente en la figura 6.5.

En la figura 6.6b. se desarrolla alrededor de $k_0 = 12 \text{ m}^{-1}$ pero em-

⁵Para n ondas con separación constante en k : $k_0 = [k_1 + k_2 + \dots + k_n]/n$, $\Delta k = k_n - k_1$.

pleando en este caso 8 ondas con una separación constante entre ellas de k tal que $\Delta k/2 = 4 \text{ m}^{-1}$. Ahora el ancho del paquete es de 1.36 m y el máximo del mismo se repite periódicamente cada 5.5 m aproximadamente. Esto debe ser comparado con el caso anterior en donde la periodicidad del máximo del paquete es la del ancho del mismo.

En la figura 6.6c. se emplearon 16 ondas con el mismo intervalo Δk del caso 6.6b. Como se aprecia en la figura, el ancho del paquete es el mismo (ni k_0 , ni Δk se modificaron), pero el máximo del paquete se repite ahora cada 12.6 m aproximadamente y en la región intermedia de las oscilaciones son bien pequeñas comparadas con las del paquete así construido.

Generalizando, si se toma los mismos k_0 y Δk pero se incrementa el número de ondas empleado en la expansión, cada vez estarán más alejados entre sí dos paquetes sucesivos hasta que en el límite sólo se obtendría un paquete en todo el espacio.

Como una consecuencia de lo descrito anteriormente, cada vez que perfeccionamos la manera de situar la partícula en el espacio (por medio de un paquete de ondas), perdemos la posibilidad de conocer con exactitud su cantidad de movimiento dado que λ ya no es única.

6.3.2 Principio de incertidumbre $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$

La expresión matemática de una onda plana monocromática de amplitud igual a la unidad, es:

$$\varphi(\vec{r}, t) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (6.10)$$

donde \vec{r} es el vector posición y \vec{k} el vector de onda que tiene como dirección la dirección de propagación del movimiento ondulatorio. En una dimensión la ecuación anterior toma la forma:

$$\varphi(x, t) = e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (6.11)$$

Para formar el paquete de ondas debemos sumar cierto número de ondas planas. Llamando $\Psi(x, t)$ al paquete de ondas que va a representar el campo material ondulatorio del movimiento de la partícula, su expresión matemática es:

$$\Psi(x, t) = \sum \varphi(x, t) = \sum_{j=1}^N e^{i(k_{x_j} x - \omega_j t)} \quad (6.12)$$

donde j es un índice mudo para contar las ondas planas usadas (N en total) para la superposición; $k_{x_j} = 2\pi/\lambda_j$ y $\omega_j = 2\pi\nu_j$ puesto que para cada j existe una frecuencia ν_j .

El análisis de Fourier para este tipo de movimiento proporciona las siguientes expresiones:

$$\Delta x \Delta k_x \geq \frac{1}{2} \quad (6.13a)$$

$$\Delta\nu \Delta t \geq \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\pi} \right) \quad (6.13b)$$

donde Δx es el ancho del paquete y Δk_x el rango de los vectores de onda (magnitudes) utilizados en su construcción.

Como $\Delta k_x = \Delta(2\pi/\lambda)$, la ecuación (6.13a) nos permite escribir:

$$\Delta x \Delta \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) = \Delta x (2\pi) \Delta \left(\frac{h}{\lambda} \right) \geq \frac{1}{2} \hbar$$

pero $\Delta(h/\lambda) = \Delta p_x$ y $h/2\pi$ es \hbar ; entonces:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (6.14)$$

6.3.3 Principio de incertidumbre energía-tiempo

Un grupo o paquete de ondas que tiene una extensión finita en el espacio, tiene también una duración finita al pasar por un punto de observación. Nótese que el paquete de ondas se mueve con la partícula, con una velocidad de grupo numéricamente igual a la velocidad de la misma, ya que:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \left(\frac{p^2}{2m} \right) = \frac{p}{m} = v$$

como se vio en el numeral 6.1.1 del presente capítulo.

Lo anterior significa que cualquier ente físico (bus, barra de medición, paquete de ondas, etc.) con una extensión finita dada, gasta un tiempo determinado para que esa extensión pase por un punto de observación.

Ahora bien, para obtener este tiempo el paquete de ondas debe tener un rango de frecuencias $\Delta\nu$ y la ecuación (6.13b) nos da esa relación con Δt el tiempo que dura pasando el paquete de ondas. Como $\Delta E = \hbar\Delta\nu$, se tiene que:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (6.15)$$

En general, ΔE es la incertidumbre en nuestro conocimiento de la energía total E del sistema y Δt el intervalo de tiempo característico de la tasa de cambio en el sistema.

Ejemplo 6.3.

En un experimento se midió la velocidad de un proyectil de 100 g de masa y la velocidad de un electrón. Las velocidades resultaron ser iguales con una incertidumbre del 0.01%. Si esta velocidad es de 400 m/s, ¿con qué precisión se puede localizar la posición de cada partícula si se mide simultáneamente con la velocidad en el mismo experimento?

Solución

a) La cantidad de movimiento del electrón es de:

$$p = mv = 3.64 \times 10^{-28} kg \frac{m}{s}$$

Si la incertidumbre en su velocidad es de 0.01% v, la incertidumbre en su cantidad de movimiento será de:

$$\Delta p = m\Delta v = 3.64 \times 10^{-32} kg \frac{m}{s}$$

y la incertidumbre en su posición será de:

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{4\pi\Delta p} = 1.44 mm$$

b) Procediendo en forma análoga al caso anterior, tenemos para el proyectil:

$$p = 40 kg \frac{m}{s} \quad \Delta p = 4 \times 10^{-3} kg \frac{m}{s}$$

y la incertidumbre en su posición será de:

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{4\pi\Delta p} = 1.32 \times 10^{-32} m$$

¿Qué puede concluir de este ejemplo con respecto a las incertidumbres en las posiciones de las partículas? □

Preguntas

1. ¿Por qué no podemos observar en nuestra vida cotidiana la naturaleza ondulatoria de la materia?

2. ¿Cuáles serían las diferencias entre nuestro universo y uno en el cual la constante de Planck fuera 1 erg s ?
3. ¿El electrón es una onda o una partícula?
4. Considerando el fotón como una partícula; ¿en qué se diferencia fundamentalmente de un electrón?
5. ¿La longitud de onda de la onda asociada a una partícula puede ser menor que la dimensión lineal de la misma? ¿Puede ser mayor? ¿Existe alguna relación entre estas cantidades?
6. ¿Cuál es el proceso físico que revela la naturaleza ondulatoria o corpuscular de los elementos fundamentales del universo, radiación y materia?
7. Dé un ejemplo de cómo el proceso de medida perturba el sistema que se está midiendo.

Problemas

1. a) ¿Cuál es la longitud de onda de De Broglie de un electrón que tiene una velocidad de $9 \times 10^7 \text{ m/s}$? b) ¿Cuál es la de la tierra ($m = 6 \times 10^{24} \text{ kg}$) si su velocidad alrededor del sol es de $3 \times 10^4 \text{ m/s}$? R/: a) 0.08 \AA ; b) $3.68 \times 10^{-63} \text{ m}$.
2. ¿A qué velocidad debe moverse un electrón para que su energía cinética sea igual a la energía de un fotón de longitud de onda igual a 5200 \AA ? R/: $9.16 \times 10^5 \text{ m/s}$.
3. Realizando un experimento de difracción de electrones con un cristal cuya distancia interplanar d es de 10^{-8} cm , se encontró que el primer máximo de difracción se obtiene para un ángulo de 30° . ¿Cuál es la velocidad de los electrones? R/: $7.28 \times 10^6 \text{ m/s}$.
4. Una partícula cargada que ha sido acelerada por un potencial de 200 voltios tiene una longitud de onda de 0.0202 \AA . Encuentre la masa de esta partícula si su carga es numéricamente igual a la del electrón. R/: $1.68 \times 10^{-27} \text{ kg}$.
5. Demuestre que si la incertidumbre en la posición de una partícula es aproximadamente igual a su longitud de onda de De Broglie, entonces la incertidumbre en su velocidad es aproximadamente igual a su velocidad.

6. Un microscopio que usa fotones para iluminar, se utiliza para localizar un electrón en un átomo con una precisión de 0.1 \AA . ¿Cuál es la incertidumbre en la cantidad de movimiento del electrón?
R/: $0.527 \times 10^{-23} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$.

7. La incertidumbre en la posición de un electrón es de 0.5 \AA , que corresponde al valor del radio de la primera órbita de Bohr en el átomo de hidrógeno. ¿Cuál es la incertidumbre en la cantidad de movimiento del electrón? R/: $1.05 \times 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$.

8. Comparar las incertidumbres en la velocidad de un electrón y de un protón, limitados a moverse en una caja de 10 \AA de ancho.
R/: $\Delta v_e = 1836 \Delta v_p$.

9. Demuestre que para una partícula libre (no actúan fuerzas sobre ella) la relación de incertidumbre $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ puede escribirse como:

$$\Delta \lambda \Delta x \geq \frac{\lambda^2}{4\pi}$$

10. Si $\Delta \lambda/\lambda = 10^{-7}$ para un fotón, ¿cuál es el valor, medido simultáneamente, de Δx para: a) un rayo gama de longitud de onda de $5 \times 10^{-4} \text{ \AA}$; b) un rayo X de longitud de onda de 5 \AA ; c) un rayo de luz de longitud de onda de 5000 \AA ? R/: a) 398 \AA ; b) $398 \times 10^{-6} \text{ m}$; c) 0.398 m .

Capítulo 7

Mecánica cuántica ondulatoria

Desde los albores del siglo XX se da en la historia de la humanidad la necesidad de reinterpretar teóricamente y en forma estructurada el comportamiento de la naturaleza. Los esfuerzos de Planck, Bohr y Einstein, entre otros, para explicar algunos resultados experimentales y el postulado de De Broglie para simetrizar el comportamiento de las partículas respecto a la radiación así lo muestran. Sin embargo, a pesar de los aportes tan grandes y significativos la característica del adelanto en el conocimiento científico se puede resumir de la siguiente manera: algunos resultados experimentales (conocimiento empírico) resultaban inexplicables desde el punto de vista clásico y se pretendía lograr explicaciones de carácter más o menos inmediato, pero sin fundamento teórico que permitiese, si era el caso, predecir algunos aspectos del comportamiento natural.

Existía plena conciencia de que el dominio de estos fenómenos era el micromundo, por lo cual esta época se puede denominar propiamente como el inicio de la *física moderna*. Estaba establecido claramente que los valores numéricos de las variables que intervienen en estos procesos son muy pequeños y que, por consiguiente, cuando se hace tender a cero la constante natural h , que rige los procesos atómicos, se debería reproducir el conocimiento clásico de la naturaleza. Sin embargo, el dominio atómico es parte constituyente del universo y el hombre como especie capaz de poner a su disposición las fuerzas naturales, debe ser capaz también de describir y explicar estos fenómenos.

La teoría que logra enmarcar tanto los resultados experimentales como las suposiciones teóricas es la *mecánica cuántica*, la cual aparece en 1926 bajo dos formulaciones aparentemente distintas: una llamada *mecánica cuántica matricial* establecida por el grupo de física de Götin-

gen cuyos artífices fueron principalmente W. Heisenberg, P. Jordan y M. Born; y la otra, la *mecánica cuántica ondulatoria*, formulada por el físico E. Schrödinger.

A finales de 1926 el propio Schrödinger demuestra que las dos formulaciones son estrictamente equivalentes, quedando así establecida la *mecánica cuántica*.¹

7.1 Mecánica Cuántica Ondulatoria

7.1.1 Interpretación estadística de la función de onda

El postulado de De Broglie, que le asigna una longitud de onda al campo material ondulatorio que acompaña el movimiento de una partícula, y la existencia de los principios de incertidumbre de Heisenberg hacen que el concepto de trayectoria no tenga significado preciso dentro de la descripción del movimiento de las partículas en el mundo microscópico. Lo anterior nos obliga a buscar una nueva manera de describir el comportamiento de un determinado proceso físico donde se pueda obtener, por ejemplo, la reproducción de mediciones experimentales.

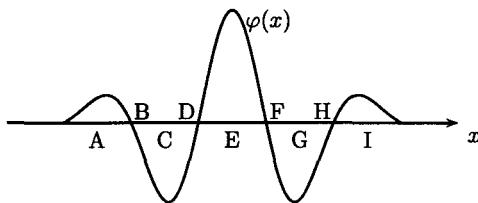


FIGURA 7.1. Aspecto de la función de onda.

Esto se logra mediante el concepto de *función de onda*: $\psi(\vec{r}, t)$, una expresión matemática (en general compleja) dependiente de las coordenadas de posición y del tiempo, que describe la amplitud del campo material ondulatorio asociado a la partícula que se encuentra en el punto \vec{r} del espacio y en el tiempo t .

En otras palabras, la función de onda nos servirá para describir el sistema dinámico que se está observando y por lo tanto contiene toda la información acerca del comportamiento de la partícula asociada.

Aquí sólo consideraremos el caso independiente del tiempo, también denominado un *estado estacionario*. Así, la función de onda independiente del tiempo, $\varphi(\vec{r})$, se interpreta de la siguiente manera:

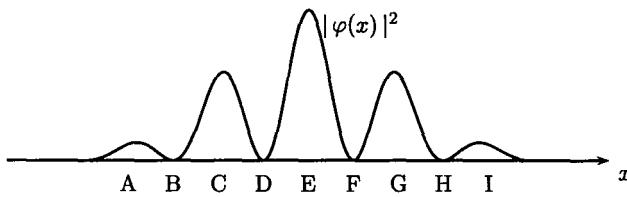
¹En el presente texto nos dedicaremos al estudio introductorio de la mecánica cuántica ondulatoria.

La cantidad $|\varphi(\vec{r})|^2 d^3r = \varphi^*(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) d^3r$ es la probabilidad de encontrar la partícula en un elemento de volumen d^3r , que está ubicado por un vector de posición \vec{r} en el espacio.

La función $\varphi^*(\vec{r})$ es la conjugada compleja de la función $\varphi(\vec{r})$.

El producto de las dos funciones $\varphi^*(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) = |\varphi(\vec{r})|^2$ se denomina *probabilidad por unidad de volumen* o simplemente *densidad de probabilidad*.

Esta es la famosa interpretación probabilística de la función de onda, dada por Max Born en 1927, que es la definición aceptada actualmente.



Veamos un ejemplo gráfico para discutir un poco más el concepto de función de onda.

Supongamos que el sistema físico que vamos a describir es una partícula que se mueve en dirección x y que la función de onda que representa el campo material ondulatorio es una expresión matemática real cuya representación gráfica tiene la forma mostrada en la figura 7.1. Entonces, el cuadrado de la función de onda, $|\varphi(x)|^2$, tendrá la forma mostrada en la figura 7.2.

De acuerdo con la definición de la cantidad $|\varphi(x)|^2$ la figura 7.2 muestra que es más probable encontrar la partícula (probabilidad diferente de cero) en los puntos A, C, E, G, e I siendo el punto E el que posee mayor *probabilidad relativa*. En los puntos B, D, F y H la probabilidad de encontrar la partícula es nula.

A la izquierda del punto A y a la derecha del punto I la probabilidad de encontrar la partícula va disminuyendo y más allá de estos dos puntos nunca la encontraremos.

Puesto que el movimiento de una partícula está relacionado con la propagación de una onda, estas dos entidades deben estar asociadas en el espacio; esto es, la partícula estará en un punto del espacio donde la amplitud de la onda tiene un valor apreciable (figura 7.3).

Como la función de onda se va a usar para calcular probabilidades, su expresión matemática deberá cumplir ciertos requisitos para ser una función adecuada.

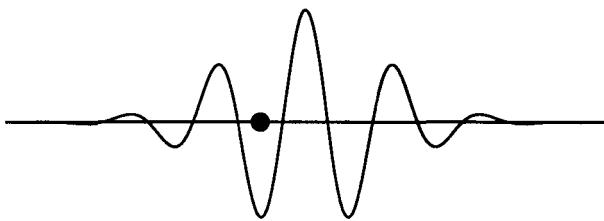


FIGURA 7.3. Esquema de una función de onda y su partícula asociada.

Los requisitos que debe satisfacer son los siguientes:

- a) $\varphi(\vec{r})$ en general debe ser una función matemática compleja.
- b) $\varphi(\vec{r})$ y su derivada deben ser finitas; esto es, cuando $|\vec{r}| \rightarrow \infty$, $\varphi(\vec{r})$ y $\frac{d\varphi(\vec{r})}{dr}$ deben tender a cero.
- c) $\varphi(\vec{r})$ y su derivada deben ser continuas y univaluadas.
- d) $\varphi(\vec{r})$ debe cumplir la condición llamada de *normalización*:

$$\int_{T.E.} \varphi^*(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) d^3r = \int_{T.E.} |\varphi(\vec{r})|^2 d^3r = 1$$

donde d^3r es el elemento de volumen y *T.E.* significa todo el espacio.

Las razones por las cuales la función de onda debe cumplir los requisitos anteriores son, entre otras:

- a) Al ser $\varphi(\vec{r})$ una función compleja, no se tratará de darle una existencia física tal como la tiene por ejemplo una onda en el agua. Las cantidades complejas no se pueden medir con instrumentos. La función de onda es solamente un ente matemático que tiene sentido dentro del contexto de la mecánica cuántica ondulatoria, pero contiene toda la información acerca de la partícula asociada.
- b) En los “bordes” del espacio no se deben encontrar partículas. La partícula descrita por la función de onda debe estar dentro de cierto volumen finito en el espacio considerado y la probabilidad de encontrarla fuera de él debe ser nula. Además, una función que tiende a infinito cuando r tiende a infinito conduciría a un valor infinito de la probabilidad, lo cual no tiene sentido.

- c) Si la función de onda y su derivada no fueran continuas y univaluadas, podrían existir dos o más valores para la probabilidad de encontrar la partícula en un punto determinado del espacio. Además, la probabilidad puede tener solamente un valor comprendido entre 0 y 1, siendo este último el máximo posible. Aquí se debe entender la operación derivar como la medida del cambio en el valor de la probabilidad. En la figura 7.4 se muestra gráficamente algunas funciones matemáticas que no son finitas, univaluadas o continuas.

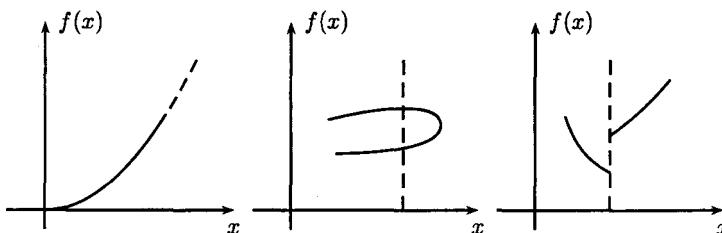


FIGURA 7.4. Ejemplos gráficos de funciones matemáticas que no son funciones de onda adecuadas para resolver problemas mecanocuánticos.

- d) Esta condición simplemente garantiza que al recorrer todo el espacio finito considerado, la probabilidad de encontrar la partícula en él es máxima. Como $|\varphi(\vec{r})|^2$ es siempre positiva, la condición de normalización requiere que $\varphi(\vec{r})$ tienda a cero cuando $|\vec{r}|$ tienda a infinito.

7.1.2 Ecuación de Schrödinger

Para obtener toda la información posible acerca de un sistema físico es necesario conocer explícitamente la amplitud de la onda material (o del campo material ondulatorio). Para ello se necesita usar el lenguaje matemático que describe ondas y resolver la ecuación de onda cuyo resultado dará la amplitud de la onda para todo tiempo y en cada punto \vec{r} del espacio.

Una onda es una perturbación que se mueve o propaga en el tiempo de un lugar a otro del espacio. Por ejemplo una perturbación sobre la superficie del agua produce las ondas que todos conocemos; el sonido produce una perturbación del aire que al propagarse lo lleva de un lugar a otro. En el caso de la luz, que no necesita de un medio para propagarse, es una perturbación del campo electromagnético la que se propaga de un punto del espacio a otro. Y, en analogía con este caso, para la onda material, será una perturbación del campo material la que se propaga.

El estado dinámico de un sistema físico se determina a partir de las fuerzas que actúan sobre él. Si es conservativo, estas fuerzas se obtienen a partir de la derivada de la energía potencial. Por ejemplo, para una partícula que se mueve bajo la acción de un campo conservativo de fuerzas $V(\vec{r})$, (nótese que este campo no depende del tiempo), es posible obtener la fuerza que actúa sobre la partícula gracias a la conocida expresión

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}V(\vec{r})$$

Además, la *dinámica del sistema*, en este caso de la partícula, se puede establecer a través de la segunda ley de Newton:

$$m\vec{a} = m \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -\vec{\nabla}V(\vec{r}) \quad (7.1)$$

lo cual plantea una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden que, en principio, se puede resolver si se cuenta con dos condiciones iniciales (o de frontera), por ejemplo $\vec{r}(t=0)$ y $\vec{v}(t=0)$.

De esta forma se puede tener información de la manera como la partícula evoluciona y predecir su estado de movimiento $(\vec{r}(t); \vec{v}(t))$ para todo tiempo.

Por otra parte siendo el sistema conservativo, como se dijo con anterioridad, la *energía mecánica* es una constante de movimiento. Esto es, $E = E_{\text{cinética}} + E_{\text{potencial}} = \text{cte}$, un valor independiente del tiempo.

En la mecánica cuántica para estudiar sistemas dinámicos vamos a seguir un procedimiento parecido al anterior. La forma como varía la función de onda $\varphi(\vec{r})$ de acuerdo con la energía potencial $V(r)$ del campo de fuerzas dentro del cual se mueve un sistema de energía total E , se obtiene al resolver la ecuación de onda que en este caso se llama *Ecuación de Schrödinger* y cuya forma independiente del tiempo es:²

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \quad (7.2)$$

donde ∇^2 es el operador laplaciano (segunda derivada con respecto a las coordenadas de posición), \hbar la constante de Planck, m la masa del sistema y $V(\vec{r})$ su energía potencial.

La ecuación de Schrödinger desempeña en mecánica cuántica el mismo papel dinámico que desempeña la segunda ley de Newton en la física clásica. Además, muestra que el cambio en la función de onda está determinado por la energía potencial y el valor de la energía total E del sistema.

²En el caso dependiente del tiempo, la ecuación de Schrödinger toma la expresión: $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t)$ con $\Psi(\vec{r}, t)$ la función de onda dependiente del tiempo.

Como a cada sistema dinámico le corresponde una energía **potencial**, la ecuación de Schrödinger tiene diferentes soluciones $\varphi(\vec{r})$ para cada sistema. Pero desde el punto de vista matemático sólo es posible encontrar funciones de onda continuas y normalizables que sean solución de la ecuación de Schrödinger cuando la energía total del sistema es igual a ciertos valores E_1, E_2, \dots ; valores que se interpretan como las energías de los estados estacionarios del sistema si éste se encuentra acotado³.

De esta manera aparece la cuantización de la energía como una consecuencia del comportamiento dual onda-partícula que presenta la materia.

Durante el desarrollo de este capítulo y de los siguientes, aparecerá la condición física que hace que la energía de un sistema sea cuantizada.

En coordenadas rectangulares, la ecuación de Schrödinger es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \varphi(x, y, z) + V(x, y, z) \varphi(x, y, z) = E \varphi(x, y, z)$$

Si el problema es unidimensional:

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

La ecuación (7.2) se acostumbra escribir en una forma más compacta:

$$\hat{H} \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad (7.3)$$

donde:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (7.4)$$

es llamado *operador hamiltoniano* o simplemente el *hamiltoniano* del sistema.

7.2 Operadores Mecanocuánticos

Un operador \hat{O} es en general cualquier expresión que al actuar sobre una función cambia su valor debido a operaciones matemáticas contenidas en ella. Estas operaciones son multiplicar, derivar o integrar, por ejemplo.

En mecánica cuántica el operador debe satisfacer la llamada *ecuación de valores propios* cuya expresión es:

$$\hat{O}f = \alpha f \quad (7.5)$$

³Cuando el movimiento de la partícula no se restringe a una región finita del espacio, la función de onda no es normalizable, ni la energía total resulta cuantizada.

donde \hat{O} es el operador, f la función que llamamos *función propia* y α una constante que resulta al operar con \hat{O} sobre la función y se denomina *valor propio*.

Pero cualquier función matemática no puede ser una función adecuada para que se cumpla la ecuación de valores propios y por consiguiente deberá satisfacer la siguiente condición:

Una función f es función propia del operador \hat{O} si al operar con él sobre ella se obtiene nuevamente *la misma función* multiplicada por una constante.

Veamos un ejemplo. Sean la función e^{2x} y el operador d/dx . Entonces al operar con el operador primera derivada sobre la función exponencial se obtiene:

$$\frac{d(e^{2x})}{dx} = 2(e^{2x})$$

El resultado es la misma función multiplicada por la constante 2; esto es, la función e^{2x} es función propia del operador primera derivada con valor propio 2. En general el conjunto de funciones e^{nx} , $n = 1, 2, \dots$ son funciones propias del operador primera derivada con valores propios 1, 2, ...

La función $\sin 3x$ es función propia del operador segunda derivada con valor propio -9 . Pero esta función no es función propia del operador primera derivada. Compruébelo.

La ecuación de Schrödinger en su forma compacta, ecuación (7.3), también es una ecuación de valores propios donde $\varphi(\vec{r})$ es función propia del operador \hat{H} con valor propio E .

Aunque en la mecánica cuántica la función de onda es en general una función compleja⁴, el valor propio del operador mecanocuántico es siempre real.

La mecánica cuántica tiene varios postulados fundamentales de los cuales usaremos dos. El primero de ellos se refiere a los operadores mecanocuánticos y dice:

Cualquier variable dinámica que describe el movimiento de un sistema físico se representa por un operador mecanocuántico.

⁴Veáse la página 148 para las condiciones de la función de onda.

Esto es, a cada variable dinámica clásica le corresponde un operador en mecánica cuántica que debe satisfacer una ecuación de valores propios. Esta afirmación es una de las bases fundamentales de la mecánica cuántica. En la tabla 7.1 se encuentran las variables dinámicas clásicas y los operadores mecanocuánticos correspondientes. El símbolo ∇ es el operador gradiente.⁵

TABLA 7.1. Algunos operadores mecanocuánticos.

Variable	Clásica	Operador mecanocuántico
Posición	\vec{r}	$\hat{r} = r$
Cantidad de movimiento	\vec{p}	$\hat{p} = -i\hbar\nabla$
Energía cinética	$\frac{p^2}{2m}$	$\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)(-i\hbar\nabla) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$
Energía total	$\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$

7.2.1 Valor esperado de una variable dinámica

Dado el carácter estadístico de la función de onda que representa el estado de un sistema, el valor esperado de una variable física O , representa el promedio de una serie de mediciones del observable correspondiente, y se define por la relación:

$$\langle O \rangle = \int \varphi^*(\vec{r}) \hat{O} \varphi(\vec{r}) d^3r \quad (7.6)$$

donde \hat{O} es el operador correspondiente a la variable O y la función $\varphi(\vec{r})$ la función propia que debe ser además una *función de onda normalizada*.

El orden de los términos debajo del signo de integración se debe respetar si el operador es diferencial. Por ejemplo, sólo hay una manera de escribir $\langle p_x \rangle$:

$$\langle p_x \rangle = \int \varphi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \varphi(x) dx = \frac{\hbar}{i} \int \varphi^*(x) \left(\frac{d}{dx} \varphi(x) \right) dx$$

⁵El gradiente es un operador vectorial: $\nabla = \vec{u}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{u}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{u}_z \frac{\partial}{\partial z}$ donde \vec{u}_x , \vec{u}_y y \vec{u}_z son vectores unitarios en dirección x , y , z .

En cambio, para el valor esperado de la posición, que es una cantidad algebraica, no importa el orden de los términos:

$$\langle x \rangle = \int \varphi^*(x) \hat{x} \varphi(x) dx = \int x |\varphi(x)|^2 dx$$

En cuanto al valor de la medición de una variable dinámica, el segundo postulado fundamental de la mecánica cuántica afirma que:

El único resultado posible de la medición de una variable dinámica es uno de los valores propios del operador correspondiente. Inmediatamente después de la medición de una variable dinámica, la función de onda debe ser una función de onda propia del operador y el valor propio correspondiente debe ser igual al valor medido de la variable.

Ejemplo 7.1.

Consideremos una partícula libre que se mueve en dirección $+x$ entre los puntos $x = 0$ y $x = a$. ¿Cuáles son los valores esperados de su posición y cantidad de movimiento?

Solución:

En el capítulo 6 se vio que la función de onda que mejor describe una partícula que se mueve libremente es una onda plana de la forma:

$$\varphi(x) = A e^{ikx}$$

donde A es su amplitud y k su vector de onda. Como se puede comprobar fácilmente, esta función de onda es una función propia de los operadores cantidad de movimiento y posición.

En primer lugar, debemos normalizar la función de onda; esto es encontrar el valor de A que haga que se cumpla la condición de normalización. Entonces:

$$\begin{aligned} \int_0^a |\varphi(x)|^2 dx &= \int_0^a \varphi^*(x) \varphi(x) dx = A^2 \int_0^a e^{-ikx} e^{ikx} dx \\ &= A^2 \int_0^a dx = 1 \end{aligned}$$

de donde:

$$A = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

Ahora podemos proceder a encontrar los valores esperados de la posición y la cantidad de movimiento de la partícula libre:

$$\langle x \rangle = \int_0^a \varphi^*(x) \hat{x} \varphi(x) dx = \frac{1}{a} \int_0^a e^{-ikx} x e^{ikx} dx$$

$$= \frac{1}{a} \int_0^a x dx = \frac{1}{a} \left(\frac{1}{2} x^2 \right) \Big|_0^a = \frac{1}{2} a$$

$$\langle p_x \rangle = \int_0^a \varphi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \varphi(x) dx = \frac{1}{a} \int_0^a e^{-ikx} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) e^{ikx} dx$$

$$= \frac{1}{a} \int_0^a e^{-ikx} (-i^2 \hbar k) e^{ikx} dx = \frac{\hbar k}{a} \int_0^a dx = \hbar k$$

La cantidad de movimiento de una partícula libre es constante y su energía total igual a $E = p^2/2m$. Entonces los resultados obtenidos son:

$$a) \langle x \rangle = \frac{1}{a} \quad b) \langle p \rangle = \hbar k = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} = p = \sqrt{2mE}$$

de los cuales concluimos que a) si se mide la posición de la partícula es más probable encontrarla a mitad de camino entre el origen y su posición final y b) el valor esperado de su cantidad de movimiento coincide con el valor de la cantidad de movimiento preciso de una partícula libre, y que se caracteriza por una onda plana de acuerdo con el desarrollo del ejemplo. \square

7.2.2 “Deducción” de la ecuación de Schrödinger

Sobre una partícula libre no actúan fuerzas. Así, es una partícula que se mueve en una región del espacio tal que el potencial $V(r) = 0$ y, de acuerdo con la primera ley de Newton, su cantidad de movimiento es constante y su energía total será solamente cinética: $E = K = p^2/2m$.

De acuerdo con el postulado de De Broglie, al ser la cantidad de movimiento constante, también lo es su longitud de onda y por consiguiente

la función matemática que describe este movimiento es una onda plana. Vamos a suponer que su amplitud es igual a la unidad. Entonces:

$$\varphi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

donde

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

y

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

Aplicando el operador gradiente a la función anterior:⁶

$$\nabla \varphi(\vec{r}) = \frac{d\varphi(\vec{r})}{dr} \vec{u}_r = \nabla e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = i\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = i\vec{k} \varphi(\vec{r}) \quad (7.7)$$

Multiplicando a ambos lados de la ecuación (7.7) por el factor $-i\hbar$:

$$-i\hbar \nabla \varphi(\vec{r}) = \hbar \vec{k} \varphi(\vec{r}) = \vec{p} \varphi(\vec{r}) \quad (7.8)$$

Este resultado muestra que la cantidad de movimiento \vec{p} es el valor propio del operador $-i\hbar\nabla$, con función propia $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Esto es, hemos comprobado que a la variable clásica cantidad de movimiento lineal, \vec{p} , le corresponde el operador mecanocuántico $-i\hbar\nabla$.

Aplicando nuevamente el operador gradiente a la ecuación (7.7):

$$\nabla[\nabla \varphi(\vec{r})] = \nabla(i\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}) = -k^2 \varphi(\vec{r})$$

o sea:

$$\nabla^2 \varphi(\vec{r}) = -k^2 \varphi(\vec{r}) \quad (7.9)$$

Multiplicando el resultado anterior a ambos lados por $-\hbar^2/2m$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \varphi(\vec{r})$$

Pero

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \varphi(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m} = E$$

⁶ \vec{u}_r es el vector unitario en dirección r.

entonces:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \quad (7.10)$$

Esta última expresión no es más que la ecuación de Schrödinger, ecuación (7.2), en la cual la energía $V(\vec{r})$ es nula. Además, se comprobó que a la energía cinética (energía total de la partícula libre) le corresponde el operador mecanocuántico $(-\hbar^2/2m)\nabla^2$.

7.3 Aplicaciones de la ecuación de Schrödinger

En ésta parte se encontrará la solución de la ecuación de Schrödinger para varias formas de energía potencial y se obtendrá la función de onda así como toda la información posible acerca del sistema para cada potencial considerado.

En los casos más sencillos se hará el desarrollo matemático completo; en los demás se dará la solución en forma gráfica. Todos los caso serán unidimensionales con excepción de uno que se hará en tres dimensiones.

La ecuación de Schrödinger unidimensional es una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden cuyas soluciones ya se conocen. Por lo tanto usaremos estos conocimientos que se encuentran resumidos en el apéndice B.

7.3.1 Escalón de potencial

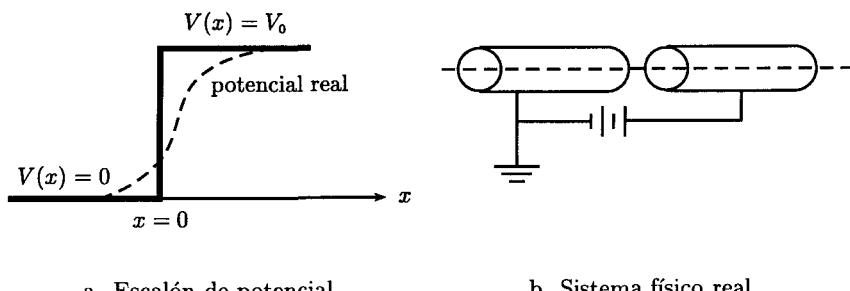


FIGURA 7.5. Escalón de potencial.

Como su nombre lo indica, la gráfica de esta energía potencial en función de x , tiene la forma de un escalón (figura 7.5a.). Aunque en la realidad no existe, es una aproximación de una situación real, fácil de manejar desde

el punto de vista matemático. Corresponde, por ejemplo, al modelo de la energía potencial de partículas cargadas que se mueven dentro de dos conductores que tienen diferente potencial eléctrico (figura 7.5b.). Una partícula de masa m y energía total E viaja en dirección $+x$ hacia una región del espacio donde la energía potencial $V(x)$ cambia bruscamente de un valor cero a un valor constante V_0 . De acuerdo con la mecánica clásica la partícula se moverá libremente hasta llegar al punto donde cambia el valor de la energía potencial. Sea este punto $x = 0$.

De este punto en adelante sobre la partícula actúa una fuerza $F = -dV/dx$ en dirección $-x$ y su movimiento dependerá de su energía total E . Es decir, si E es mayor o menor que V_0 . Esto también es cierto en la física clásica.

Entonces veamos como es el movimiento de la partícula desde el punto de vista clásico como del mecanocuántico, de acuerdo con su energía total cuyo valor puede ser mayor o menor que V_0 .

a) $E < V_0$

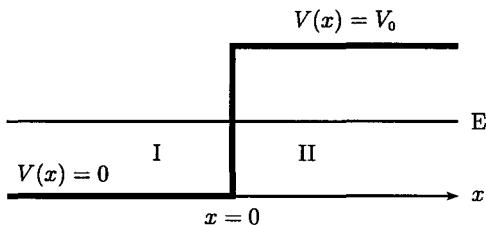


FIGURA 7.6. Diagrama de energías involucradas en el problema de una partícula que incide sobre un escalón de potencial con $E < V_0$

En la figura 7.6 se muestra el diagrama de las energías para este caso. La mecánica clásica predice que la partícula será devuelta en el punto $x = 0$ porque no tiene suficiente energía total para contrarrestar el efecto de la fuerza que actúa sobre ella.

Más aún, en $x = 0$ la partícula tendrá que reflejarse luego de un choque elástico contra la “pared” del potencial. Así, se tendrá que el cuerpo ha cambiado \vec{p} por $-\vec{p}$ luego de la interacción.

Desde el punto de vista de la mecánica cuántica, debemos resolver la ecuación de Schrödinger escrita de la siguiente manera:

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\varphi(x) = 0$$

que es la misma ecuación (7.2) en una dimensión e igualada a cero.

En el problema aparecen dos regiones: una donde la energía potencial es nula y la otra donde tiene un valor constante diferente de cero y, por consiguiente, habrá una ecuación para cada región. Las identificaremos con los números I y II respectivamente.

Sea $\varphi''(x)$ la segunda derivada de la función de onda. Entonces la ecuación de Schrödinger para cada región tiene la forma:

$$\varphi''_I(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi_I(x) = 0 \quad (x < 0)$$

$$\varphi''_{II}(x) - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \varphi_{II}(x) = 0 \quad (x > 0)$$

Las ecuaciones se deben resolver por separado y las funciones de onda y sus derivadas deben ser continuas en el punto $x = 0$.

Llamando:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

las soluciones de las dos ecuaciones diferenciales (ver apéndice B) son:

$$\begin{aligned} \varphi_I(x) &= Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} & (x < 0) \\ \varphi_{II}(x) &= Ce^{k_2 x} + De^{-k_2 x} & (x > 0) \end{aligned} \tag{7.11}$$

donde A, B, C y D son constantes que se determinan a partir de las condiciones que debe cumplir una función de onda y las condiciones iniciales del sistema. Debe notarse que las funciones matemáticas en la región I son imaginarias y en la región II son reales.

Como la función de onda debe ser finita en cualquier parte del espacio la constante C debe ser nula porque la función $e^{k_2 x}$ no tiende a cero cuando x tiende a infinito.

En el punto $x = 0$, las soluciones deben ser tales que $\varphi_I(x)$, $\varphi_{II}(x)$ y sus primeras derivadas sean continuas, lo cual se escribe como:

$$\varphi_I(x = 0) = \varphi_{II}(x = 0) \quad \varphi'_I(x)|_{x=0} = \varphi'_{II}(x)|_{x=0}$$

Las condiciones anteriores conducen a dos ecuaciones que permiten establecer la relación que existe entre las constantes A, B y D . El resultado es:

$$A + B = D \quad A - B = \frac{ik_2}{k_1} D$$

Expresando A y B en función de D para tener finalmente una sola constante:

$$A = \frac{D}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) \quad B = \frac{D}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right)$$

Reemplazando A y B en la ecuación (7.11), la función de onda que describe el movimiento de una partícula que incide sobre un escalón de potencial con $E < V_0$ es:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{ik_1 x} + \frac{D}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-ik_1 x} & x \leq 0 \\ D e^{-k_2 x} & x > 0 \end{cases} \quad (7.12)$$

El resultado obtenido muestra lo siguiente:

1. En la región I se tiene una onda plana que viaja en dirección x y otra onda plana que viaja en dirección $-x$. Esto es, el movimiento de la partícula en la región I es descrito por una onda estacionaria.
2. En la región II el movimiento de la partícula es descrito por una función exponencial decreciente.

La interpretación física del resultado anterior es la siguiente: al incidir la partícula sobre el escalón de potencial es devuelta o reflejada (función $e^{-ik_1 x}$ en la onda de la región I), tal como lo predice la física clásica. Pero durante el proceso existe la posibilidad de que pase a la región II , siendo ésta región clásicamente prohibida (existencia de una función de onda en la región II). Esta penetración es tal que la probabilidad de encontrar la partícula allí decrece exponencialmente con la distancia.

En la figura 7.7 se muestran en forma gráfica los resultados obtenidos, así como la función de onda y la densidad de probabilidad.

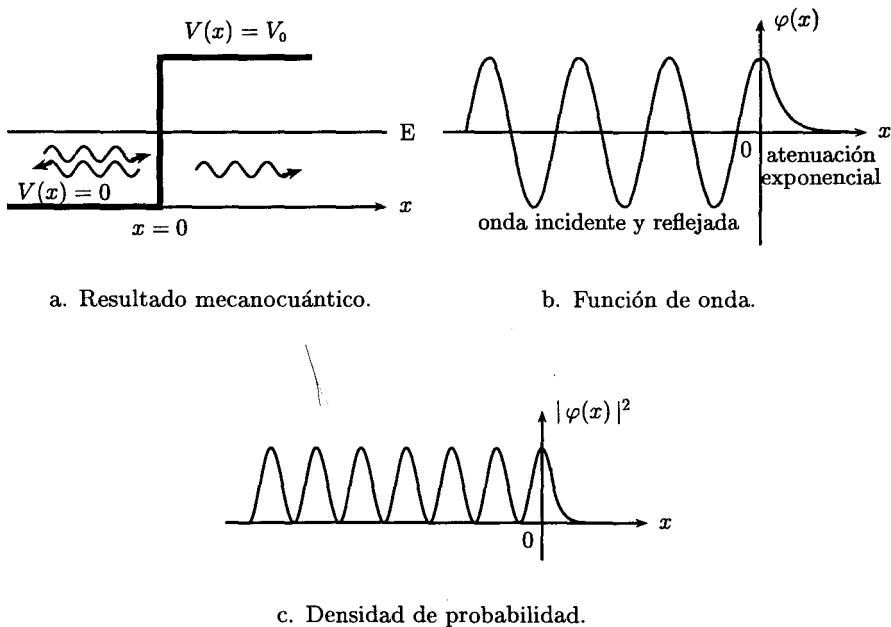
La presencia de la partícula en la región prohibida por la física clásica no es evidente como se puede ver con el siguiente razonamiento: en la región II la función de onda tiende rápidamente a cero para x mucho mayor que $1/k_2$ y la probabilidad de encontrarla allí es apreciable solamente en la vecindad de $x = 0$.

Por ejemplo, para $x = 1/k_2$ la probabilidad de encontrar la partícula en la región II es proporcional a:

$$|\varphi_{II}(x)|^2 \propto (e^{-1})^2 = 0.13$$

y si $V_0 - E$ es del orden de 4 eV , un electrón alcanzaría a recorrer una distancia:

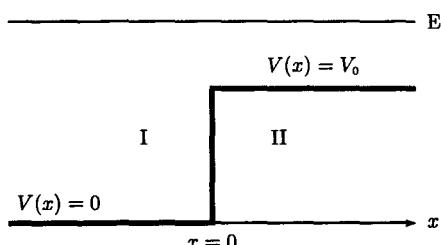
$$x = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} = 5.79 \times 10^{-10} \text{ m}$$

FIGURA 7.7. Escalón de potencial con $E < V_0$

que es del orden de magnitud de las dimensiones atómicas.

Pero clásicamente la cantidad $2m(V_0 - E)$ es tan grande comparada con \hbar^2 que simplemente no se puede observar la distancia recorrida por el electrón en la región II. Por consiguiente la física clásica no puede predecir este fenómeno que en física atómica puede ser muy importante como veremos más adelante.

b) $E > V_0$

FIGURA 7.8. Diagrama de energías en el problema de una partícula que incide sobre un escalón de potencial con $E > V_0$

En la figura 7.8 se muestra el diagrama de las energías correspondientes. La mecánica clásica predice que al llegar la partícula al punto $x = 0$, el efecto de la fuerza en dirección $-x$ que actúa sobre ella frena su movimiento y pasa a la región II con menor velocidad. Veamos el tratamiento de la mecánica cuántica.

La ecuación de Schrödinger para cada región es:

$$\varphi_I''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi_I(x) = 0 \quad (x < 0)$$

$$\varphi_{II}''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \varphi_{II}(x) = 0 \quad (x > 0)$$

Llamando:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

las soluciones de las ecuaciones son:

$$\begin{aligned} \varphi_I(x) &= Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} & (x < 0) \\ \varphi_{II}(x) &= Ce^{ik_2 x} + De^{-ik_2 x} & (x > 0) \end{aligned} \tag{7.13}$$

En este caso tanto en la región I como en la II , las funciones matemáticas son imaginarias; y representan ondas planas que viajan en dirección $\pm x$.⁷ Pero una onda que viaja en dirección $-x$ en la región II no es solución del problema porque implica la existencia de un obstáculo en el infinito que la reflejó. Entonces D debe ser igual a cero.

Para hallar las constantes A y B en función de C procedemos como en el caso anterior, exigiendo la continuidad de las funciones y sus derivadas en el punto $x = 0$.

El resultado es el siguiente:

$$A + B = C \quad A - B = \frac{k_2}{k_1} C$$

de donde:

$$A = \frac{C}{2} \left(1 + \frac{k_2}{k_1} \right) \quad B = \frac{C}{2} \left(1 - \frac{k_2}{k_1} \right) \tag{7.14}$$

Reemplazando las expresiones para las constantes en la ecuación (7.13), la forma matemática de la función de onda que describe el movimiento

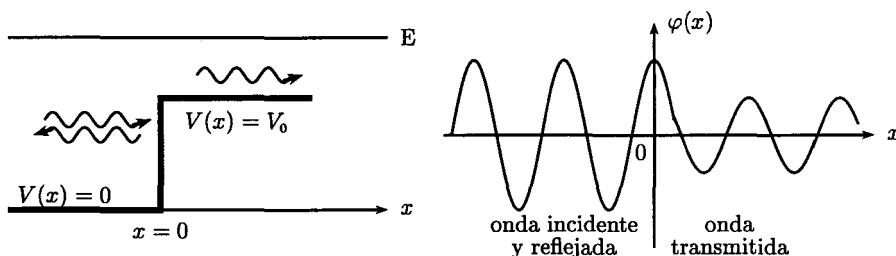
⁷Observen la diferencia en el exponente de la función de onda para la región II con respecto al caso a).

de la partícula que incide sobre un escalón de potencial con $E > V_0$ es:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{C}{2} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) e^{ik_1 x} + \frac{C}{2} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) e^{-ik_1 x} & x \leq 0 \\ Ce^{-ik_2 x} & x > 0 \end{cases} \quad (7.15)$$

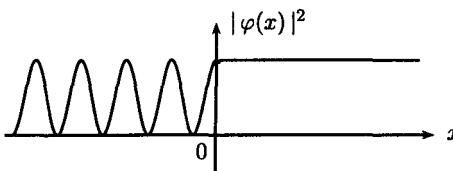
La interpretación física del resultado anterior es la siguiente: al llegar la partícula al escalón de potencial pasa a la región II con menor energía cinética, k_2 es menor que k_1 , pero existe la posibilidad de que se devuelva por donde venía (existencia de una onda que viaja en dirección $-x$ en la región I). Este resultado no lo puede predecir la física clásica.

En la figura 7.9 se encuentran las soluciones gráficas así como la función de onda y la densidad de probabilidad.



a. Resultado mecanocuántico.

b. Función de onda.



c. Densidad de Probabilidad.

FIGURA 7.9. Escalón de potencial con $E > V_0$

A diferencia del caso anterior ($E < V_0$), ahora podemos decir como es el movimiento de la partícula al pasar de la región I a la región II.

Las cantidades k_1 y k_2 son las cantidades de movimiento divididas por \hbar en las regiones I y II respectivamente. La energía total E de la partícula es la suma de su energía cinética y su energía potencial;

entonces en la región *I* es igual a $(1/2)mv_1^2$ como debe ser para una partícula libre y en la región *II* es $(1/2)mv_2^2 + V_0$. Por consiguiente:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2} mv_1^2 \right)} = \frac{mv_1}{\hbar} = \frac{p_1}{\hbar}$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}(E - V_0)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2} mv_2^2 + V_0 - V_0 \right)} = \frac{mv_2}{\hbar} = \frac{p_2}{\hbar}$$

Como k_2 es menor que k_1 , p_2 es menor que p_1 y la velocidad de la partícula es menor en la región *II* que en la región *I*. ¿Por qué no podemos decir algo acerca de la velocidad de la partícula en la región *II* cuando su energía total es menor que su energía potencial?

Finalmente, debe notarse que la función de onda que describe el movimiento de la partícula está compuesta por ondas planas. Esto se debe a que siendo constante la energía total de la partícula así como también su energía potencial, su cantidad de movimiento es constante y bien determinada en cada región considerada. A una cantidad de movimiento bien determinada le corresponde una longitud de onda bien determinada lo cual es propio solamente de las ondas planas.

7.3.2 Caja de potencial unidimensional

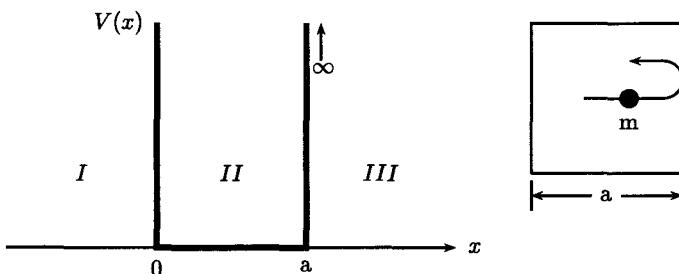


FIGURA 7.10. Caja de potencial unidimensional de ancho *a*

El caso más sencillo de pozos de potencial es el pozo de paredes infinitas o caja de potencial (figura 7.10). Su descripción matemática es:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & x > a \end{cases}$$

Sea una partícula de masa m con energía total E que puede moverse libremente dentro de una caja de potencial de ancho a . Cuando la partícula llega a las paredes de la caja, sobre ella actúa una fuerza $F = -dV(x)/dx$ que invierte la dirección de su movimiento y no importa que tan grande sea su energía total, nunca podrá salir de la caja de potencial. Esto es, su movimiento está *restringido* al espacio en el que se encuentra. Algo similar ocurre con los electrones libres dentro de los metales: pueden moverse libremente dentro del metal pero no se pueden salir por sí solos.

De acuerdo con las condiciones iniciales del problema la partícula nunca estará en las regiones *I* y *III*. Las funciones de onda correspondientes serán nulas y su movimiento, como ya se dijo, se encuentra restringido a la región *II*. La ecuación de Schrödinger para esta región es:

$$\varphi_{II}''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi_{II}(x) = 0$$

cuyas soluciones son funciones sinusoidales que es otra forma de expresar las ondas planas:⁸

$$\varphi_{II}(x) = A \cos kx + B \operatorname{sen} kx \quad (7.16)$$

donde A y B son constantes y $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} = p/\hbar$.

Al exigir la continuidad de la función de onda en los puntos $x = 0$ y $x = a$ se tiene que:

$$\varphi_{II}(x = 0)\varphi_I(x = 0) = 0; \quad \varphi_{II}(x = a) = \varphi_{III}(x = a) = 0$$

lo cual conduce a los siguientes resultados: la constante A es igual a cero ya que $A + 0 = 0$. Esto significa que la función coseno no es solución del problema. Entonces:

$$\varphi_{II}(x) = B \operatorname{sen} kx \quad (7.17)$$

Por la segunda condición de continuidad, $B \operatorname{sen} ka = 0$. Pero la constante B no puede ser cero porque no tendríamos función de onda, por lo cual sólo queda la posibilidad de que $\operatorname{sen} ka$ sea nula en el punto $x = a$. Esto se cumple cuando:

$$ka = n\pi \quad n = 1, 2, \dots \quad (7.18)$$

⁸Recuérdese que $e^{i\theta} = \cos \theta + i \operatorname{sen} \theta$. Por otra parte (ver apéndice B) (7.16) es solución de la ecuación, como se puede comprobar por sustitución directa.

Por consiguiente, para cada valor posible de n habrá una función de onda que es solución de la ecuación de Schrödinger:

$$\varphi_n(x) = B \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a} \quad n = 1, 2, \dots \quad (7.19)$$

Del resultado obtenido en la ecuación (7.18) se obtienen las expresiones para calcular la energía total E y la cantidad de movimiento p de la partícula. En efecto:

$$k^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (7.20)$$

Noten que para cada valor del número entero n hay un valor determinado para la energía y la cantidad de movimiento. Las expresiones de estas cantidades son:⁹

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{n^2\hbar^2}{8ma^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

$$p_n = \frac{n\pi\hbar}{a} = \frac{nh}{2a} \quad n = 1, 2, \dots$$

Este resultado dice que la energía total y la cantidad de movimiento de una partícula en una caja de potencial se encuentran *cuantizadas*. El número entero n se denomina *número cuántico* y cada valor posible de la energía corresponde a un *nivel de energía*. ¿Por qué no puede ser cero el número entero n ?

En la figura 7.11 se muestra el diagrama de niveles de energía para este caso.

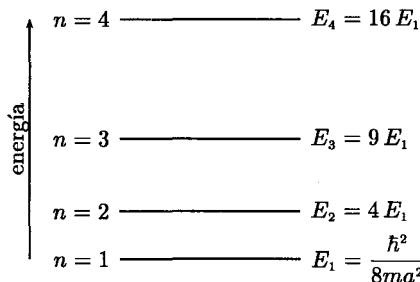


FIGURA 7.11. Niveles de energía de una partícula en una caja de potencial unidimensional.

La exclusión del valor cero como posible valor para la energía y la limitación de sus posibles valores a un conjunto discreto de valores cuando el

⁹Recuerden que $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

movimiento de una partícula es restringido, son resultados propios de la mecánica cuántica, los cuales no tienen equivalente en mecánica clásica.

La *cuantización* de la energía aparece siempre que se resuelve la ecuación de Schrödinger para energías potenciales que *restringen el movimiento* de una partícula a una región finita del espacio.

Para completar la solución del caso considerado, falta determinar el valor de la constante B que aparece en la expresión de la función de onda (ecuación (7.19)). Para ello se utiliza la condición de normalización. El resultado es:

$$1 = \int_0^a |\varphi_n(x)|^2 dx = B^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = B^2 \frac{1}{2} a$$

de donde:

$$B = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (7.21)$$

La forma final de la expresión matemática de la función de onda es:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (7.22)$$

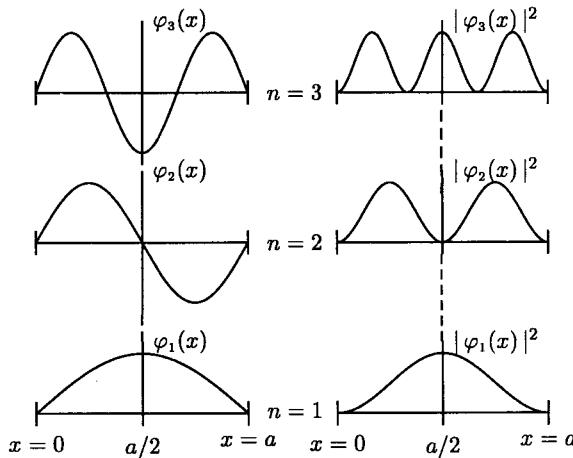


FIGURA 7.12. Funciones de onda y densidades de probabilidad para una partícula en una caja de potencial unidimensional.

En la figura 7.12 se encuentra la representación gráfica de las funciones de onda y las respectivas densidades de probabilidad para los tres primeros valores del número cuántico.

De la figura se observa que la probabilidad de encontrar la partícula en algún lugar dentro de la caja de potencial puede ser muy diferente según el valor del número cuántico n . Por ejemplo para $n = 1$, $|\varphi_1(x)|^2$ tiene su valor máximo en $x = 1/2$, mientras que $|\varphi_2(x)|^2$ es nula en el mismo lugar.

En otras palabras, para $n = 1$ es más probable encontrar la partícula en el centro de la caja pero para $n = 2$ la probabilidad encontrada allí es nula.

La figura 7.12 nos recuerda un caso clásico (¿cuál es?). Esto se debe a que la forma de la ecuación de onda es la misma en ambos movimientos, como también lo son las restricciones que se les imponen. Pero aunque el método matemático para hallar la solución del problema en cada caso es el mismo, las situaciones físicas no lo son.

7.3.3 Caja de potencial tridimensional

Resolver el problema de una partícula que se mueve dentro de una caja de potencial en tres dimensiones se hace sin mayor dificultad al tener en cuenta los resultados anteriores.

Consideremos una partícula con energía total E se mueve dentro de una caja de potencial tridimensional de lados a , b , y c (figura 7.13).

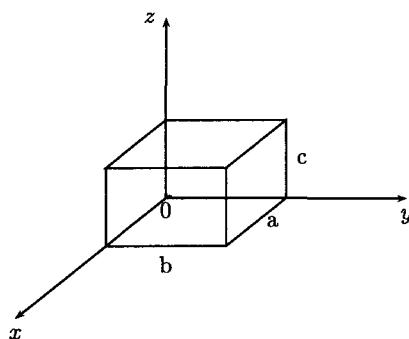


FIGURA 7.13. Caja de potencial en tres dimensiones

La correspondiente ecuación de Schrödinger para el problema se escribe como:

$$\nabla^2 \varphi(x, y, z) + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x, y, z) = 0$$

Para hallar la solución de la ecuación anterior es necesario separarla en tres ecuaciones, cada una de ellas dependiente de una sola variable. El procedimiento, denominado *método de separación de variables*, consiste

en suponer que la función de onda es igual al producto de tres funciones, cada una dependiendo de una sola variable:

$$\varphi(x, y, z) = X(x) Y(y) Z(z) \quad (7.23)$$

Tomando las segundas derivadas parciales de la nueva función:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = YZ \frac{\partial^2 X}{\partial x^2}; \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = XZ \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}; \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = XY \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}$$

Reemplazando el resultado anterior en la ecuación de Schrödinger, y dividiendo todo por la función XYZ se obtiene:

$$\frac{1}{X} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X + \frac{1}{Y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z = -\frac{2mE}{\hbar^2} \quad (7.24)$$

Noten que cada uno de los términos de la izquierda de la ecuación depende solamente de una variable y el término de la derecha es una constante.

Para que la igualdad de la ecuación (7.24) sea válida, cada uno de los términos de la izquierda de la ecuación debe ser a su vez igual a una constante:

$$\frac{1}{X} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X = -k_x^2 \quad \frac{1}{Y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y = -k_y^2 \quad \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z = -k_z^2$$

donde se debe cumplir que:

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (7.25)$$

Como habrán notado, al separar variables aparecen tres ecuaciones diferenciales del mismo tipo del caso de la caja de potencial en una dimensión. Por consiguiente ya conocemos las soluciones de las tres ecuaciones:

$$X(x) = B \operatorname{sen} k_x x$$

$$Y(y) = C \operatorname{sen} k_y y \quad (7.26)$$

$$Z(z) = D \operatorname{sen} k_z z$$

y la función de onda para este problema tiene la forma:

$$\varphi(x, y, z) = A \operatorname{sen} k_x x \operatorname{sen} k_y y \operatorname{sen} k_z z \quad (7.27)$$

donde A es el producto de las constantes individuales B , C y D .

En forma análoga al caso unidimensional en los bordes de la caja la función de onda debe ser cero, lo cual conduce al siguiente resultado para k_x , k_y y k_z :

$$k_x = \frac{n_1\pi}{a} \quad k_y = \frac{n_2\pi}{b} \quad k_z = \frac{n_3\pi}{c} \quad (7.28)$$

$$n_1 = 1, 2, \dots \quad n_2 = 1, 2, \dots \quad n_3 = 1, 2, \dots$$

Al reemplazar las expresiones anteriores en la ecuación (7.25), se obtiene la expresión para la energía total de la partícula.

Un caso importante aparece cuando la caja de potencial es un cubo: $a = b = c$. Las energías permitidas y la función de onda son entonces:

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = \frac{\hbar^2}{8ma^2}\ell^2 \quad (7.29)$$

$$\varphi(x, y, z) = A \sen \frac{n_1\pi x}{a} \sen \frac{n_2\pi y}{a} \sen \frac{n_3\pi z}{a}$$

donde:

$$n_1 = 1, 2, \dots \quad n_2 = 1, 2, \dots \quad n_3 = 1, 2, \dots$$

y

$$\ell^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$$

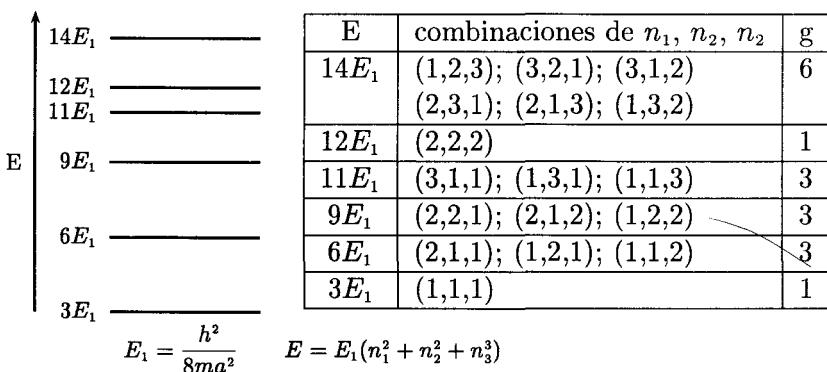


FIGURA 7.14. Niveles de energía y estados degenerados para una partícula en una caja de potencial tridimensional de lados iguales

Este resultado significa que todos los estados de energías correspondientes a los números cuánticos n_1 , n_2 y n_3 que conducen al mismo valor para

el número ℓ^2 tienen la misma energía E y están descritos por varias *funciones de onda*.

Cuando se presenta este hecho se dice que los estados energéticos de la partícula (en general del sistema físico) son *degenerados* y el número de funciones de onda, g , que le corresponde a cada estado es el *grado de degeneración del sistema*. En la figura 7.14 se encuentra esquematizado lo anterior.

7.3.4 Potencial de fuerzas centrales

Los potenciales que son originados por fuerzas centrales conservativas tienen la forma mostrada en la figura 7.15. Ejemplos de ésta clase de potenciales son los de una molécula diatómica y el que experimenta, en general, un electrón en un átomo.

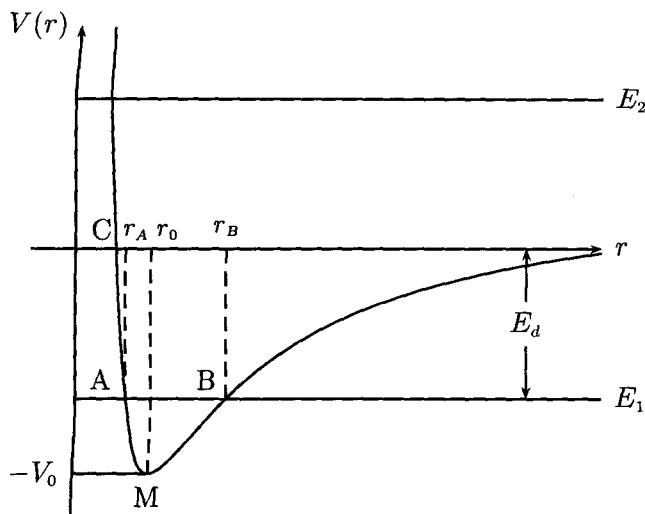


FIGURA 7.15. Curva de energía potencial en función de la distancia radial r para fuerzas centrales conservativas.

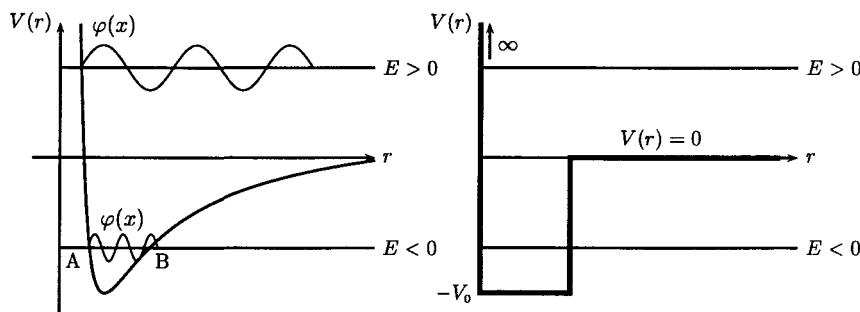
Como se puede observar de la curva de energía potencial en función de la distancia radial r , para valores pequeños de r la energía potencial disminuye rápidamente a partir de un valor muy grande, indicando la presencia de una gran fuerza de repulsión. A medida que r aumenta el potencial pasa por un valor mínimo y luego va siendo cada vez menos negativo indicando ahora la presencia de fuerzas atractivas. Finalmente, tiende a cero cuando r tiende a infinito.

Consideraremos el movimiento de una partícula en este potencial desde el punto de vista clásico, para los caso en que su energía total es a) E_1 ,

b) E_2 y c) $-V_0$ (ver figura 7.15).

- a) Su movimiento es restringido o acotado y sólo podrá moverse entre los puntos A y B . Es decir, orbitará alrededor del centro de fuerzas en una órbita (cerrada o no) con máximo acercamiento a una distancia r_A y máximo alejamiento en r_B .
- b) Su movimiento es restringido solamente hacia la izquierda y si se aproxima desde $r = \infty$ hacia el punto C , actuará sobre ella en dicho punto una gran fuerza de repulsión que la devolverá por donde vino hacia el infinito. El punto C se llama *punto clásico de retorno*.
- c) Con esta energía la partícula permanecerá en el punto M denominado *punto de equilibrio* del sistema. Si la partícula es el electrón en el átomo de hidrógeno, por ejemplo, entonces r_0 es el radio de su órbita circular.

Si por algún mecanismo una partícula de energía E_1 adquiere energía hasta alcanzar el valor E_2 se alejará del centro de fuerza; pero si tenía una energía E_2 y la pierde para quedar con una energía E_1 , permanecerá en ese nivel de energía a menos que se le proporcione una mínima cantidad de energía indicada en la figura 7.15 por E_d .



a. Función de onda para estados acotados y no acotados correspondientes a la energía potencial de fuerzas centrales.

b. Pozo de potencial rectangular: modelo mecanocuántico de la curva de potencial mostrada en a).

FIGURA 7.16. Potencial de fuerzas centrales.

Desde el punto de vista mecanocuántico la descripción anterior es válida, pero hay dos resultados más:

1. Para energías negativas ($E \leq 0$), los estados energéticos son cuantizados.
2. Para energías positivas ($E > 0$), todas las energías son posibles. El espectro de energías es continuo.

El modelo mecanocuántico de este potencial y la forma de la onda para las dos energías consideradas se muestra en la figura 7.16. Noten la forma de la función alrededor de los puntos A y B .

7.3.5 Barrera de potencial

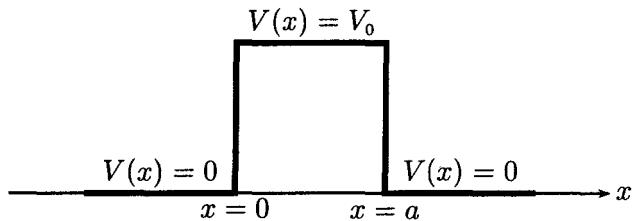


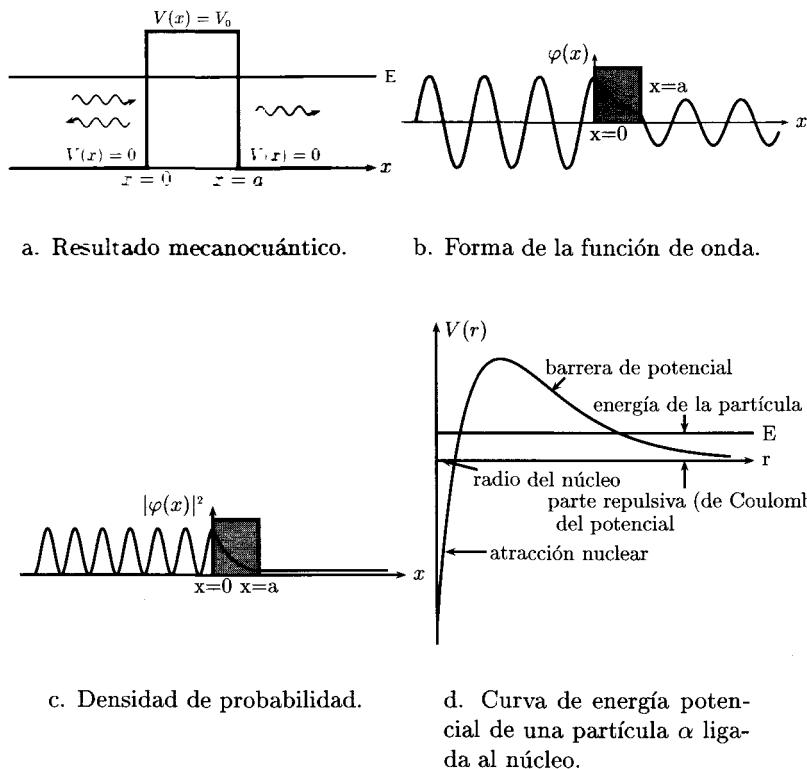
FIGURA 7.17. Barrera de potencial de ancho a y altura V_0 .

En la figura 7.17 se muestra la forma de una barrera de potencial. La expresión matemática de este potencial es:

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

La barrera de potencial es el modelo de un efecto muy importante en física nuclear. Cuando una partícula de energía total E incide sobre una barrera de potencial de altura V_0 tal que $V_0 > E$, la partícula puede atravesar la barrera y aparecer al otro lado de la misma. Este efecto que se conoce como *efecto túnel*, no ocurre en física clásica y en la física nuclear corresponde, entre otros, a un modelo que explica la emisión espontánea de partículas α .

En la figura 7.18 se encuentra el resultado mecanocuántico en forma gráfica.

FIGURA 7.18. Barrera de potencial con $E < V_0$.

Preguntas

1. ¿Cómo se expresa la relación fundamental entre propiedades de la función de onda y el comportamiento de la partícula asociada?
2. ¿En qué forma entra el postulado de De Broglie en la teoría de Schrödinger?
3. ¿Cuál es la razón fundamental para que en la mecánica cuántica los resultados estén dados en términos de probabilidades?
4. ¿Cuál es el efecto sobre los niveles de energía de una partícula en una caja de potencial unidimensional cuando el ancho de ésta: a) se hace menor y b) se hace mayor?
5. Si en el escalón de potencial con $E < V_0$, en el punto $x = 0$ el potencial fuera infinito, ¿cuál sería la diferencia en la forma de la función de onda en la forma $x > 0$?

6. Si en la caja de potencial unidimensional las paredes no fueran infinitas sino de altura V_0 , ¿cuál sería la diferencia en la forma de la función de onda en las regiones fuera de la caja ($E < V_0$)?
7. ¿Cuál es la condición fundamental para que la energía mecano-cuántica de una partícula sea cuantizada?
8. ¿De qué depende principalmente la forma de la función de onda que satisface la ecuación de Schrödinger?

Problemas

1. Muestre que si $\varphi(x)$ es una función compleja, el producto $\varphi^*(x) \varphi(x)$ es real positivo o cero.
2. Normalice la función:

$$\varphi(x) = Ae^{-\alpha^2 x^2/2} e^{-i\beta t/2} \quad -\infty \leq x \leq \infty$$

$$\alpha^2 = \left(\frac{km}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad \beta = \left(\frac{k}{m} \right)^{1/2}$$

Ayuda: si una función $F(x)$ es par, $\int_{-\infty}^{\infty} F(x) dx = 2 \int_0^{\infty} F(x) dx$

$$R: (\alpha/\sqrt{\pi})^{1/2}$$

3. Utilizando la función de onda de la partícula en una caja de potencial unidimensional, encuentre los valores esperados $\langle x \rangle$ y $\langle E \rangle$ para el estado base del sistema. ¿Qué concluye de sus resultados? R/: $\langle x \rangle = a/2$; $\langle E \rangle = \hbar^2/8ma^2$.
4. Demuestre que la razón $\Delta E/E_n$ entre dos niveles de energía adyacentes de una partícula en una caja de potencial unidimensional está dada por:

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{2n+1}{n^2}$$

5. Una propiedad importante de las funciones de onda es que deben ser ortogonales entre sí, lo cual se escribe:

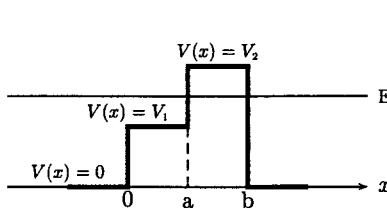
$$\int \varphi_n^* \varphi_m dV = 0 \quad n \neq m \quad n, m = \text{números enteros}$$

donde dV es el elemento de volumen.

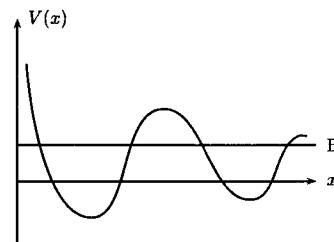
Demuestre que ésto se cumple para las funciones de onda de una partícula en una caja de potencial unidimensional.

Ayuda: $2 \sin A \sin B = \cos(A - B) - \cos(A + B)$

6. Un haz de partículas con energía E incide desde la izquierda sobre el potencial mostrado en la figura 7.19a.
- Escriba las ecuaciones de Schrödinger y su solución para cada región (no trate de hallar las expresiones matemáticas de las constantes).
 - Haga un diagrama de la función de onda y su densidad de probabilidad.
 - Explique el significado físico del resultado obtenido.
7. Una partícula con energía E se mueve dentro del potencial mostrado en la figura 7.19b. Haga un esquema de la forma de la función de onda, utilizando los resultados expuestos en los diferentes casos tratados en este capítulo. No trate de resolverlo matemáticamente; sólo de la solución en forma gráfica.



a. Problema 6.



b. Problema 7.

FIGURA 7.19. Potencial.

Capítulo 8

Oscilador armónico

En el capítulo anterior se habló de energías potenciales que son funciones discontinuas de la posición (con excepción de un caso) y con valores constantes a ambos lados de la discontinuidad. En este capítulo y el siguiente se estudiarán dos potenciales que son funciones continuas de la posición siendo el primero de ellos el potencial de un oscilador armónico.

El oscilador armónico simple es importante en física porque es el modelo de todo ente físico que realiza pequeñas oscilaciones alrededor de su posición de equilibrio. Dos ejemplos entre muchos, de este movimiento, son las vibraciones de átomos en moléculas diatómicas, y las oscilaciones de átomos en redes cristalinas. Además, las propiedades térmicas de los sólidos pueden ser explicadas a partir de oscilaciones de los átomos que conforman los sólidos.

8.1 Oscilador armónico clásico

Comenzaremos por recordar brevemente las propiedades y características de un oscilador armónico simple desde el punto de vista de la física clásica.

Sea una partícula de masa m que se mueve a lo largo de una recta bajo la acción de una fuerza recuperadora que es proporcional al desplazamiento que experimenta. (fig.8.1).

La magnitud de la fuerza recuperadora está dada por la expresión:

$$F = -kx \quad (8.1)$$

donde k es la constante de recuperación.

De acuerdo con la segunda ley de Newton se tiene que:

$$F = ma = m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx \quad (8.2)$$

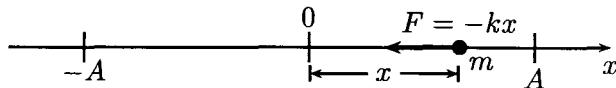


FIGURA 8.1. Esquema de una partícula que realiza un movimiento armónico simple de amplitud A bajo la acción de la fuerza recuperadora F .

Relación que se puede escribir como:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0 \quad (8.3)$$

donde $\omega^2 = k/m$.

Del apéndice B encontramos que la solución de la ecuación diferencial (8.3) es de la forma:

$$\begin{aligned} x &= Be^{i\omega t} + Ce^{-i\omega t} \\ &= D \cos(\omega t) + E \operatorname{sen}(\omega t) \end{aligned} \quad (8.4)$$

donde $\omega = 2\pi\nu = \sqrt{k/m}$ es la frecuencia angular del movimiento y las constantes D y E se determinan a partir de las condiciones iniciales del problema.

Suponiendo que en el instante $t = 0$ la partícula se encuentra en reposo el punto $x = A$ (fig 8.1), se obtiene que las constantes D y E son: $D = A$ y $E = 0$.

Por consiguiente las ecuaciones que describen la posición y la velocidad de la partícula en el tiempo son:

$$\begin{aligned} x &= A \cos(\omega t) \\ v &= -A\omega \operatorname{sen}(\omega t) \end{aligned} \quad (8.5)$$

donde A es la amplitud del movimiento.

La energía potencial de la partícula se obtiene a partir del trabajo que es necesario efectuar para moverla desde $x=0$ hasta un punto x en

contra de la fuerza recuperadora. Esto es:

$$\begin{aligned}
 V(x) &= - \int_0^x F dx \\
 &= k \int_0^x x dx \\
 &= \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2
 \end{aligned} \tag{8.6}$$

La curva de la energía potencial en función de la posición se muestra en la fig. 8.2.

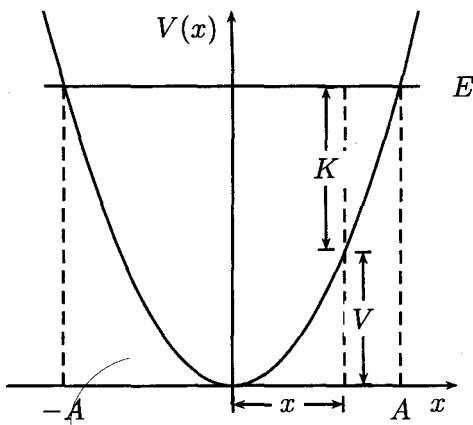


FIGURA 8.2. Curva de la energía potencial del oscilador armónico en función de la posición de la partícula.

La energía total de la partícula en movimiento armónico simple es:

$$E = K + V = \frac{1}{2} mv^2 + \frac{1}{2} kx^2$$

Reemplazando en esta ecuación los resultados obtenidos para las variables v y x :

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{1}{2} mA^2 \omega^2 \operatorname{sen}^2(\omega t) + \frac{1}{2} kA^2 \cos^2(\omega t) \\
 &= \frac{1}{2} kA^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 A^2
 \end{aligned} \tag{8.7}$$

Este resultado muestra que la energía total del oscilador armónico simple es constante y a su vez determina la amplitud de oscilación.

8.2 Oscilador armónico cuántico

8.2.1 Solución de la ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger unidimensional, independiente del tiempo para el oscilador armónico tiene la forma:

$$\varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - \frac{1}{2} kx^2) \varphi(x) = 0 \quad (8.8)$$

Donde $\varphi(x)$ es la función de onda del sistema que describe el comportamiento de la partícula que está oscilando alrededor de su posición de equilibrio; $\varphi''(x)$ es su segunda derivada con respecto a la coordenada x .

Encontrar la solución de ésta ecuación no es tan fácil como en los casos tratados anteriormente. Es una ecuación diferencial cuya solución matemática ya se conoce. Los pasos a seguir para resolverla son los siguientes:

1. Expresar la ecuación en forma adimensional.
2. Determinar el comportamiento asintótico de la función $\varphi(x)$ cuando x tiende a ∞ .
3. Multiplicar esta solución asintótica por otra función que determinará el comportamiento de $\varphi(x)$ para x finito.
4. Resolver la ecuación diferencial para la nueva función de onda por medio del método de series de potencias y
5. Determinar la condición que hace que la solución anterior sea una función de onda adecuada para el problema considerado.

Sin entrar en detalles vamos a seguir estos pasos y encontrar la solución de la ecuación (8.8).

Sea $\xi = \alpha x$ la nueva variable sin dimensión, donde α es un parámetro que definiremos más adelante. Al realizar el cambio de variable de x a ξ , la ecuación (8.8) se transforma en:

$$\frac{d^2\varphi(\xi)}{d\xi^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2} - \frac{mk}{\hbar^2\alpha^4} \xi^2 \right] \varphi(x) = 0$$

llamando:

$$\alpha^4 = \frac{km}{\hbar^2} \quad \lambda = \frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2} = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

La ecuación diferencial se convierte finalmente en:

$$\frac{d^2\varphi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2) \varphi(\xi) = 0 \quad (8.9)$$

donde $\varphi(\xi)$, solución de la ecuación, es la nueva función de onda que debe ser *finita, continua y univaluada* en el intervalo $-\infty < \xi < \infty$.

Ahora veamos el comportamiento de la función $\varphi(\xi)$ para $\xi \rightarrow \infty$. En la ecuación (8.9), cuando ξ es muy grande el factor $\lambda \varphi(\xi)$ es despreciable comparado con el factor $\xi^2 \varphi(\xi)$. Por lo tanto, la forma asintótica de la ecuación es:

$$\frac{d^2\varphi(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2 \varphi(\xi) = 0 \quad (8.10)$$

La solución de esta ecuación es de la forma:

$$\varphi_\infty(\xi) = e^{\beta \xi^2}$$

Para determinar el valor de la constante β se procede de la siguiente manera. Derivando dos veces la función φ_∞ con respecto a ξ ; sustituyendo el resultado en la ecuación (8.10) y haciendo las aproximaciones para valores grandes de la variable ξ se obtiene que $\beta = \pm 1/2$.

Pero de acuerdo con los requisitos que debe cumplir una función de onda, la exponencial con $\beta = +1/2$ no es solución del problema. Por consiguiente la función de onda asintótica tiene la forma:

$$\varphi_\infty(\xi) = e^{-\xi^2/2} \quad (8.11)$$

Nótese que esta solución es válida solamente para valores grandes de la variable ξ .

El siguiente paso es encontrar la solución que también sea válida para valores pequeños de la variable ξ . Esto se logra multiplicando la función anterior (ecuación (8.11)) por otra función cuya forma se deberá determinar. Sea esta función $H(\xi)$. Entonces:

$$\varphi(\xi) = \varphi_\infty(\xi) H(\xi) = e^{-\xi^2/2} H(\xi) \quad (8.12)$$

Derivando (8.12) dos veces con respecto a ξ y reemplazando el resultado en la ecuación (8.9) se obtiene:

$$\frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH(\xi)}{d\xi} + (\lambda - 1) H(\xi) = 0 \quad (8.13)$$

Esta ecuación diferencial, conocida como ecuación diferencial de Hermite, se resuelve por el método de series de potencias¹. La serie obtenida

¹La solución de la ecuación se encuentra en el apéndice C.

será solución del problema si converge; esto es termina en una potencia máxima.

Para el problema considerado este requisito se cumple cuando:

$$\lambda = 2n + 1 \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.14)$$

Por consiguiente, $H(\xi)$ será un polinomio de grado n y para cada n habrá uno y sólo un polinomio.

Los polinomios son llamados *Polinomios de Hermite* y su expresión matemática está dada por la relación:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n(e^{-\xi^2})}{d\xi^n} \quad (8.15)$$

La función de onda normalizada que describe el comportamiento del oscilador armónico simple en función de la variable original x es:

$$\varphi_n(\xi) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x) \quad (8.16)$$

En la tabla 8.1 se encuentran algunos polinomios de Hermite y las funciones de onda correspondientes.

TABLA 8.1. Polinomios de Hermite y funciones de onda para el oscilador armónico con $n = 0, 1, 2$ y 3 .

n	$H_n(\xi)$	$\varphi_n(x)$
0	$H_0 = 1$	$\frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2 x^2/2}$
1	$H_1 = 2\xi$	$\frac{\alpha^{1/2}}{2^{1/2} \pi^{1/4}} (2\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2}$
2	$H_2 = 4\xi^2 - 2$	$\frac{\alpha^{1/2}}{8^{1/2} \pi^{1/4}} (4\alpha^2 x^2 - 2) e^{-\alpha^2 x^2/2}$
3	$H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$	$\frac{\alpha^{1/2}}{48^{1/2} \pi^{1/4}} (8\alpha^3 x^3 - 12\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2}$

En la figura 8.3 se muestra el comportamiento de la función de onda del oscilador armónico cuántico en función de su posición para diferentes valores del número cuántico n . De estas gráficas se observa que:

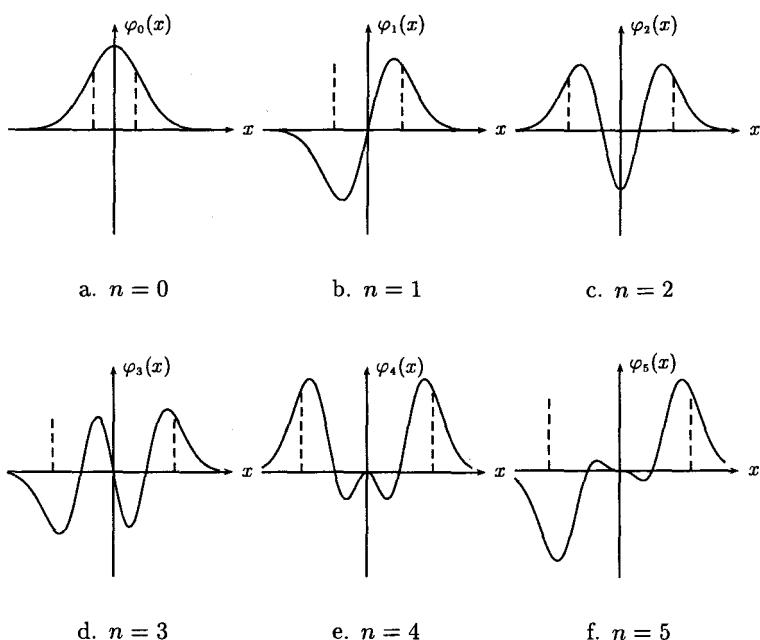


FIGURA 8.3. Funciones de onda del oscilador armónico para $n = 0$ hasta $n = 5$.
Las líneas punteadas son los límites clásicos de oscilación

1. Para $x = 0$. Cuando $n = 0$ la función de onda es nula solamente para $x \rightarrow \pm\infty$.
2. Para $n = 1$ la función de onda es nula en $x = 0$. Este punto se denomina *nodo*.
3. Para $n = 2$ la función de onda es nula en $\pm(\alpha\sqrt{2})^{-1}$. Esto significa que tiene dos nodos.
4. Para $n = 3$, tiene 3 nodos; para $n = 4$ tiene 4 y así sucesivamente. Esto es, el número de nodos de la función de onda es igual al número cuántico del entero n correspondiente.
5. Desde el punto de vista cuántico la partícula puede oscilar más allá del límite clásico de oscilación (líneas punteadas en las gráficas de la figura 8.3)

8.2.2 Energía de un oscilador armónico cuántico

La condición que determina el grado de los polinomios de Hermite, ecuación (8.14), también permite determinar los posibles valores de la

energía del oscilador armónico cuántico puesto que $\lambda = 2E/(\hbar\omega)$. Por consiguiente:

$$E_n = \frac{1}{2} (2n + 1) \hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu \quad (8.17)$$

donde ν es la frecuencia de oscilación de la partícula y n es el número cuántico que especifica los niveles de energía del oscilador. Nótese que este resultado difiere en un factor de $(1/2)h\nu$ con respecto a la expresión para la energía formulada por Planck para el mismo caso. Pero este factor no influye en los resultados porque en general se calculan diferencias de energía entre niveles energéticos y entonces el factor desaparece. Para Planck la energía de cada estado es proporcional $n(h\nu)$ y desde el punto de vista cuántico es $(n + 1/2)h\nu$. Pero al calcular la diferencia de energía entre dos estados consecutivos $\Delta E = h\nu$ en ambos casos.

Nuevamente se ha encontrado la cuantización de la energía resultado esperado porque el movimiento de la partícula es restringido en forma análoga a como lo es cuando un electrón gira alrededor de un núcleo o una partícula se mueve dentro de una caja de potencial.

$$\begin{aligned} n = 3 & \longrightarrow E_3 = 7 E_0 \\ n = 2 & \longrightarrow E_2 = 5 E_0 \\ n = 1 & \longrightarrow E_1 = 3 E_0 \\ n = 0 & \longrightarrow E_0 = \frac{1}{2} h\nu \end{aligned}$$

FIGURA 8.4. Diagrama de energías para el oscilador armónico cuántico.

A diferencia del caso clásico, el oscilador armónico cuántico tiene una energía mínima diferente de cero (caso $n = 0$):

$$E_0 = \frac{1}{2} h\nu = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (8.18)$$

Esta mínima energía se denomina *energía de punto cero* y es compatible con el principio de incertidumbre como veremos a continuación.

Desde el punto de vista clásico, cuando la partícula está en reposo en su posición de equilibrio ($x = 0$) su energía total y cantidad de movimiento son nulas y entonces conocemos simultáneamente con exactitud su posición y cantidad de movimiento. Pero desde el punto de vista de la mecánica cuántica, lo anterior contradice el principio de incertidumbre

posición-cantidad de movimiento y, por consiguiente, el primer nivel de energía del oscilador cuántico, E_0 , corresponde a la mínima energía del sistema que es compatible con los principios de incertidumbre.

8.2.3 Densidad de probabilidad

En la figura 8.5 se muestra el diagrama de la energía potencial de un oscilador armónico y algunos niveles de energía.

Ahora, consideremos una partícula con energía total E_1 que está limitada a moverse entre los puntos $-A$ y $+A$ dentro de este potencial.

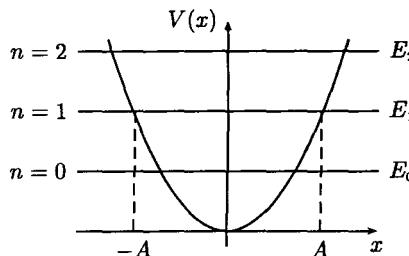


FIGURA 8.5. Energía potencial y algunos niveles de energía para el oscilador armónico.

La densidad de probabilidad clásica de encontrar la partícula en un punto situado entre x y $x + dx$, para $-A \leq x \leq +A$, está dada por la relación²:

$$P_{\text{clásica}} = \frac{\omega}{\pi v} \quad (8.19)$$

donde v es la velocidad de la partícula.

Por ser un sistema conservativo, la energía total de la partícula en el punto A es la misma que en cualquier punto de su recorrido entre $-A$ y $+A$. Esto es:

$$\frac{1}{2} m\omega^2 A^2 = \frac{1}{2} mv^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

y su velocidad será:

$$v = \omega \sqrt{A^2 - x^2} \quad (8.20)$$

Por consiguiente la densidad de probabilidad de encontrar la partícula con energía E_1 entre x y $x + dx$ es:

$$P_{\text{clásica}}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} (A^2 - x^2)^{-1/2} & -A \leq x \leq +A \\ 0 & |x| > A \end{cases} \quad (8.21)$$

²La probabilidad de encontrar la partícula en algún lugar entre $-A$ y $+A$ es inversamente proporcional a su velocidad v .

Desde el punto de vista cuántico la densidad de probabilidad de encontrar la partícula con energía E_1 entre x y $x + dx$ es:

$$P_{\text{cuántica}}(x) = |\varphi_1(x)|^2 = \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} \quad (8.22)$$

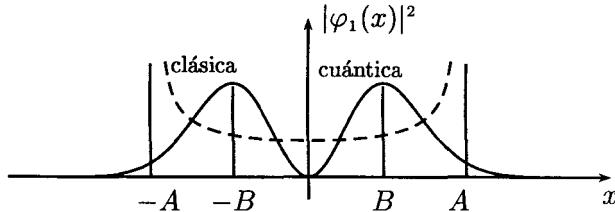


FIGURA 8.6. Distribución de la densidades de probabilidad cuántica y clásica de un oscilador armónico con $n = 1$.

En la figura 8.6 se muestran las curvas de probabilidad, clásica y cuántica, en función de la posición de la partícula cuando ésta se encuentra en el nivel de energía con $n = 1$.

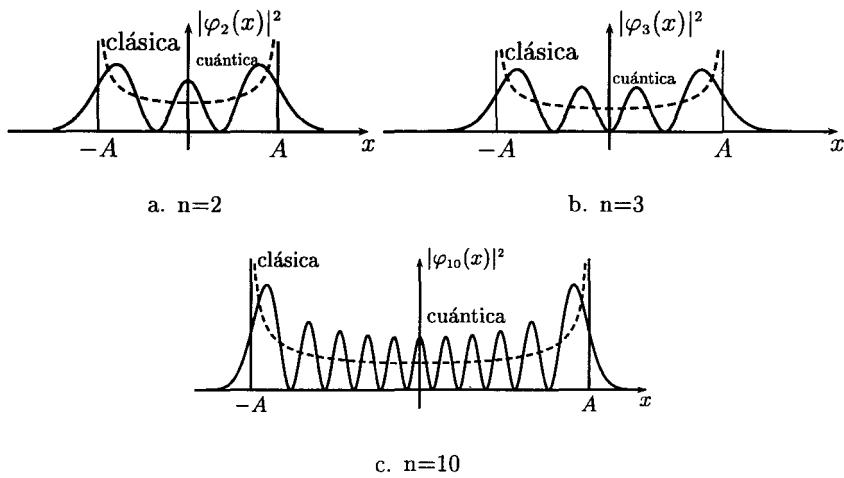


FIGURA 8.7. Densidades de probabilidad del oscilador armónico clásico y cuántico para $n=2, 3$ y 10 . $\pm A$ es la amplitud de la oscilación clásica

Comparando las curvas de densidades de probabilidad, en el caso clásico es máxima en los puntos $-A$ y $+A$ (límite del movimiento clásico), y la partícula nunca se encontrará más allá de estos puntos. En cambio, desde el punto de vista cuántico, la densidad de probabilidad tiene dos

máximos para $x = \pm(\hbar/m\omega)^{1/2}$ (puntos $\pm B$ en la gráfica) y existe la posibilidad de encontrar la partícula fuera de los límites clásicos del movimiento. Esta diferencia se hace notoria para el estado de menor energía del oscilador.

En la figura 8.7 se muestran las curvas de densidad de probabilidad, clásica y cuántica, del oscilador armónico para $n = 2, 3$ y 10 . En ellas se observa que a medida que crece el número cuántico n el comportamiento probabilístico del oscilador cuántico se va acercando al comportamiento probabilístico del oscilador clásico (líneas punteadas). Este resultado concuerda con el principio de correspondencia de Bohr.

Preguntas

1. Para describir clásicamente el comportamiento de un oscilador armónico usamos una ecuación de fuerza que es función de la posición. ¿Desde el punto de vista cuántico podemos hacer lo mismo? Explique.
2. Clásicamente una partícula que oscila entre dos puntos límites nunca se encontrará fuera de ellos. ¿Desde el punto de vista cuántico, puede encontrarse más allá de estos puntos? Explique.
3. ¿En qué condiciones los resultados mecanocuánticos coinciden con los resultados clásicos para el oscilador armónico?
4. Clásicamente un oscilador armónico tiene su menor energía cuando se encuentra en reposo en su posición de equilibrio. ¿Para un oscilador armónico cuántico que también se encuentra en su estado de menor energía, lo anterior es cierto? Explique.
5. ¿Qué ocurre con la separación entre niveles de energía de un oscilador cuántico cuando se disminuye su constante de recuperación k ?
6. Desde el punto de vista cuántico hay lugares en los cuales nunca se encuentra la partícula oscilante (ver gráficas para el oscilador). ¿Cómo puede explicar este resultado?

Problemas

1. Realice las operaciones necesarias para obtener la ecuación (8.9) a partir de la ecuación (8.8).

Ayuda: $\frac{d}{dx} = \frac{du}{dx} \frac{d}{du}$

2. Muestre que la constante β de la ecuación (8.11) es igual a $\pm 1/2$.
3. Realice las operaciones necesarias para obtener la ecuación (8.13).
4. Compruebe que la función de onda del oscilador armónico para $n = 2$, $\varphi_2(x)$, está normalizada.
5. Muestre que $|\varphi_1(x)|^2$ tiene dos máximos en $x = \pm 1/\alpha$. Esto es, encuentre los máximos de la función.
6. Calcule el punto cero de la energía y el espaciamiento entre los niveles de energía de: a) un oscilador cuya frecuencia es de 400 Hz ; b) una molécula de CO en la cual los átomos oscilan con una frecuencia de $6.5 \times 10^{16}\text{ Hz}$. R/: a) $8.28 \times 10^{-13}\text{ eV}$ $1.65 \times 10^{-12}\text{ eV}$; b) $1.347 \times 10^2\text{ eV}$, $2.694 \times 10^2\text{ eV}$.
7. Calcule los valores esperados $\langle x^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ y $\langle E \rangle$ del oscilador armónico con $n = 0$ y 1 . Explique sus respuestas.

R/: $\frac{\hbar}{2\omega m}, \frac{\hbar\omega m}{2}, \frac{\hbar\omega}{2}, \frac{3\hbar}{2\omega m}, \frac{3\hbar\omega m}{2}, \frac{3\hbar\omega}{2}$.

8. Para el oscilador armónico clásico la probabilidad de encontrar la partícula en algún punto a lo largo del eje x entre $-A$ y A es:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = \int_{-A}^A \frac{B}{v} dx$$

donde A es la amplitud del movimiento. Muestre que el valor de la constante B es ω/π .

Ayudas:

Si la función $f(x)$ es función par:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 2 \int_0^{\infty} f(x) dx$$

$$\int_0^{\infty} e^{-r^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{2}}{2r}$$

$$\int_0^{\infty} x^{2a} e^{-r^2 x^2} dx = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2a-1)}{2^{a+1} r^{2a+1}} \sqrt{\pi} \quad r > 0, a = 1, 2, \dots$$

Capítulo 9

Teoría cuántica de los átomos hidrogenoides

Con la aparición de la mecánica cuántica se tiene un nuevo método para estudiar y describir la naturaleza y, por lo tanto, a los átomos. Al aplicarlo a los átomos hidrogenoides en particular, se deberá encontrar los mismos resultados obtenidos anteriormente y algunos nuevos que no son predecibles, y menos explicables, a partir de la teoría atómica de Bohr.

Mediante la mecánica cuántica se podrán conocer nuevas propiedades de los átomos ya que las funciones de onda propias del hamiltoniano del sistema describirán:

1. Las funciones de probabilidad que darán las figuras detalladas de la estructura atómica sin violar el principio de incertidumbre, como lo hacen las órbitas exactas de la teoría de Bohr.
2. El momento angular del átomo, el cual no es predicho correctamente en la teoría de Bohr.
3. Cuándo son posibles las transiciones electrónicas en los átomos, lo cual tampoco se puede predecir a partir de la teoría de Bohr

Además de los puntos anteriores, ciertos resultados experimentales mostraron la existencia de otras propiedades del electrón: su momento angular intrínseco denominado spin, que para su explicación era necesario el surgimiento de una nueva teoría.

En éste capítulo sólo hablaremos del primer punto; los demás se verán en el capítulo 10.

9.1 Descripción cuántica de los átomos hidrogenoides

9.1.1 Solución de la ecuación de Schrödinger

Como se sabe, un átomo hidrogenoide consta de un núcleo de carga positiva Ze y un electrón. Cuando $Z = 1$ tenemos el átomo de hidrógeno.

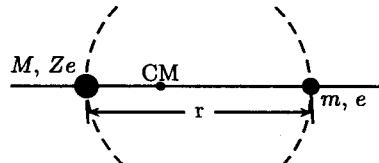


FIGURA 9.1. Esquema de un átomo hidrogenoide cuyo núcleo tiene una carga eléctrica $+Ze$

Tanto el núcleo como el electrón se encuentran en movimiento alrededor del centro de masa del sistema n úcleo-electrón. Si M y m son las masas del n úcleo y del electrón, respectivamente, y r es la distancia entre las dos partículas, la energía cinética y la energía potencial del átomo son:

$$K_n = \frac{p^2}{2M} \quad K_e = \frac{p_e^2}{2m} \quad V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (9.1)$$

Si comparamos las masas de las partículas, M es mucho mayor que m (1836 veces más en el caso de hidrógeno), de manera que la energía cinética del electrón es mucho mayor que la del n úcleo que, entonces, se puede considerar en reposo. Teniendo en cuenta esta aproximación, la energía total del sistema n úcleo-electrón es:

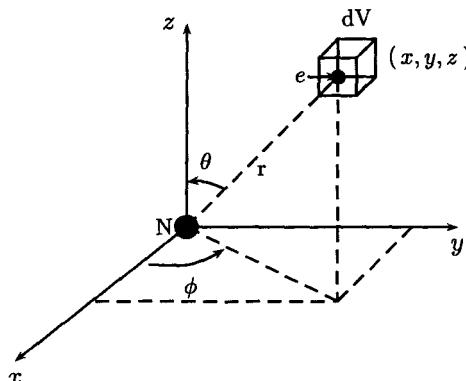
$$E = K_n + K_e + V = K_e + V = \frac{p_e^2}{2m} + V(r) \quad (9.2)$$

El tomar al n úcleo en reposo permite colocarlo en el origen del sistema de coordenadas y al electrón a una distancia (x, y, z) del origen como se muestra en la figura 9.2.

Para obtener el hamiltoniano del sistema n úcleo-electrón basta reemplazar las cantidades dinámicas de la ecuación (9.2) (caso clásico) por sus operadores mecanocuánticos correspondientes.

Teniendo en cuenta que la cantidad de movimiento es una cantidad vectorial y por lo tanto tiene tres componentes con respecto al sistema de coordenadas rectangulares, se obtiene:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) \quad (9.3)$$



$$\begin{aligned}
 r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\
 0 \leq \theta \leq \pi \quad x &= r \sin \theta \cos \phi \\
 0 \leq \phi \leq 2\pi \quad y &= r \sin \theta \sin \phi \\
 0 \leq r \leq \infty \quad z &= r \cos \theta \\
 dV &= r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\
 \theta &= \cos^{-1} \frac{z}{r} \quad \phi = \tan^{-1} \frac{y}{x}
 \end{aligned}$$

FIGURA 9.2. Coordenadas esféricas y las correspondientes ecuaciones de transformación

donde

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

La ecuación de Schrödinger para un átomo hidrogenoide es entonces:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

donde $\psi(x, y, z)$ es la función de onda propia que describe el comportamiento del electrón en el átomo.

Por razones de simetría es más fácil resolver la ecuación anterior en coordenadas esféricas, debido a que la energía potencial eléctrica del sistema tiene simetría esférica. Al cambiar de las variables rectangulares (x, y, z) a variables esféricas (r, θ, ϕ) la ecuación de Schrödinger toma la forma:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \right) \\
 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] \varphi = 0 \quad (9.4)
 \end{aligned}$$

donde $\varphi = \varphi(r, \theta, \phi)$ es la función de onda en términos de las nuevas variables.

Al escribir esta función de onda como un producto de tres funciones¹, cada una dependiente de una sola variable:

$$\varphi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) \quad (9.5)$$

¹Es decir, empleando el *método de separación de variables*, introducido en el capítulo séptimo.

la ecuación (9.4) se puede separar en tres ecuaciones diferenciales independientes, simplificándose los desarrollos matemáticos.

Las derivadas parciales de la función de onda con respecto a cada variable son, por ejemplo:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial r} = \Theta \Phi \frac{\partial R}{\partial r} \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} = R \Phi \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \phi^2} = R \Theta \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} \quad (9.6)$$

Reemplazando resultados del tipo (9.6) en la ecuación (9.4), dividiendo por el producto $R \Theta \Phi$ y multiplicando por $r^2 \operatorname{sen}^2 \phi$ se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\operatorname{sen}^2 \theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\operatorname{sen} \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\operatorname{sen} \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \\ \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + \frac{2mr^2 \operatorname{sen}^2 \theta}{\hbar^2} [E - V(r)] = 0 \end{aligned}$$

Esta ecuación se puede escribir de tal manera que un lado de ella dependa de las variables r , θ , mientras que el otro lado dependa de forma *exclusiva* de ϕ .

Pasando al lado derecho del signo igual la parte dependiente de la variable ϕ , se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\operatorname{sen}^2 \theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\operatorname{sen} \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\operatorname{sen} \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \\ + \frac{2mr^2 \operatorname{sen}^2 \theta}{\hbar^2} [E - V(r)] = - \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} \end{aligned}$$

Esta igualdad es verdadera si ambos lados de la ecuación son iguales a la misma constante que llamamos m_ℓ^2 . Así, en el proceso de separación se han obtenido dos ecuaciones diferenciales que son:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -m_\ell^2 \quad (9.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\operatorname{sen}^2 \theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\operatorname{sen} \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\operatorname{sen} \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \\ + \frac{2mr^2 \operatorname{sen}^2 \theta}{\hbar^2} [E - V(r)] = m_\ell^2 \quad (9.8) \end{aligned}$$

La ecuación (9.8) también se puede separar en dos ecuaciones, cada una función de una sola variable. Dividiéndola por $\operatorname{sen}^2 \theta$ y pasando a la

derecha del signo igual los términos que dependen de la variable θ , se obtiene:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = \frac{m_t^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\sin \theta \Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right)$$

Nuevamente, esta igualdad es verdadera si ambos lados de la ecuación son iguales a la misma constante.

Esta constante se expresa como $\ell(\ell+1)$, forma que se obtiene a partir de ciertas condiciones matemáticas que debe cumplir la solución de la ecuación diferencial en θ . Entonces las siguientes dos ecuaciones son:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = \ell(\ell+1) \quad (9.9)$$

$$\frac{1}{\sin \theta \Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) - \frac{m_t^2}{\sin^2 \theta} = -\ell(\ell+1) \quad (9.10)$$

Como las tres ecuaciones dependen cada una de una sola variable se puede reemplazar la derivada parcial por la derivada total y la forma final de cada una de ellas es:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + m_t^2 \Phi = 0 \quad (9.11)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(\ell(\ell+1) - \frac{m_t^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0 \quad (9.12)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R = 0 \quad (9.13)$$

El paso siguiente es hallar las soluciones de las tres ecuaciones. Esto es, encontrar las expresiones matemáticas de $R(r)$, $\Theta(\theta)$ y $\Phi(\phi)$ que forman la función de onda, solución de la ecuación de Schrödinger para átomos hidrogenoides.

La más sencilla de resolver es la ecuación (9.11) cuya solución ya se conoce puesto que tiene la misma forma de las ecuaciones contempladas en el apéndice B. Entonces:

$$\Phi(\phi) = A \cos(m_t \phi) + B \sin(m_t \phi) = N e^{im_t \phi} \quad (9.14)$$

donde N es una constante de normalización.

Para que $\Phi(\phi)$ sea solución aceptable del problema debe ser univaluada. Esto significa que: $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$. Por lo tanto:

$$e^{im_\ell \phi} = e^{im_\ell(\phi+2\pi)} = e^{im_\ell \phi} e^{2\pi im_\ell}$$

de donde:

$$e^{2\pi im_\ell} = 1$$

Lo cual es equivalente a:

$$\cos(2\pi m_\ell) + i \sin(2\pi m_\ell) = 1$$

Esta igualdad es verdadera siempre que m_ℓ sea un número entero positivo, negativo o cero. Es decir:

$$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Las soluciones de las otras dos ecuaciones diferenciales no son tan sencillas de obtener y el desarrollo matemático correspondiente es largo. En el apéndice D se presenta en forma detallada la manera de resolverlas y en especial, las condiciones que deben satisfacer los números enteros m_ℓ y los dos nuevos números que aparecen al resolver las ecuaciones diferenciales en θ y r : ℓ y n .

A continuación se presentan los resultados para cada una de las funciones con los correspondientes factores de normalización:

$$\Phi_{m_\ell}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_\ell \phi} \quad m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell \quad (9.15)$$

$$\Theta_{\ell, m_\ell}(\theta) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(l-|m_\ell|)!}{2(\ell+|m_\ell|)!}} P_\ell^{m_\ell}(\cos \theta) \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (9.16)$$

$$R_{n,\ell}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}} e^{-\rho/2} \rho^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) \quad n = 1, 2, \dots \quad (9.17)$$

donde:

$$\rho = \beta_n r \quad \beta_n = \frac{2mZe^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2 n} = \frac{2Z}{na_0} \quad \beta_n^2 = -\frac{8mE_n}{\hbar^2}$$

$P_\ell^{m_\ell}(\cos \theta)$ y $L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$ son los polinomios asociados de Legendre y Laguerre respectivamente; a_0 es el radio de Bohr.

Estos polinomios se obtienen a partir de las relaciones:

$$P_k^j(x) = (1 - x^2)^{j/2} \frac{d^j}{dx^j} P_k(x) \quad L_k^j(x) = (-1)^j \frac{d^j}{dx^j} L_k(x)$$

donde $P_j(x)$ y $L_j(x)$ son los polinomios ordinarios de Legendre y Laguerre respectivamente.

En la tabla 9.1 se encuentran algunos polinomios y sus fórmulas de recurrencia.²

TABLA 9.1. Polinomios de Legendre, Laguerre y sus fórmulas de recurrencia.

Legendre	Laguerre
$P_0(x) = 1$	$L_0(x) = 1$
$P_1(x) = x$	$L_1(x) = 1 - x$
$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$	$L_2(x) = 2 - 4x + x^2$
$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$	$L_3(x) = 6 - 18x + 9x^2 - x^3$
$P_k(x) = \frac{1}{2^k k!} \frac{d^k}{dx^k} (x^2 - 1)^k$	$L_k(x) = e^x \frac{d^k}{dx^k} (x^k e^{-x})$

9.1.2 Energía de un átomo hidrogenoide

La solución de la parte radial de la ecuación de Schrödinger (ecuación (9.17)) conduce inmediatamente a la expresión para la energía total del electrón en el átomo³:

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{\hbar^2}{2m} \beta_n^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2mZe^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 n} \right)^2 \\ &= -\frac{mZ^2e^4}{32\pi\varepsilon_0^2\hbar^2 n^2} = -\frac{mZ^2e^4}{8\varepsilon_0^2\hbar^2 n^2} \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (9.18)$$

² Esta apariencia de la fórmula de recurrencia se denomina Fórmula de Rodrigues. Ver, por ejemplo, M. García, *Elementos de Matemáticas Aplicadas*, capítulo 4, Unibiblos, 2002.

³ Recuérdese que el origen del sistema de referencia está en el núcleo del átomo.

Este resultado es igual al que se obtuvo cuando se usó la teoría atómica de Bohr para describir átomos hidrogenoides: la energía solamente depende del número entero n . Para $Z = 1$ esta energía es nuevamente igual a $-13.6/n^2 \text{ eV}$.

9.1.3 Función de onda para átomos hidrogenoides

De acuerdo con los resultados obtenidos (ecuaciones (9.15), (9.16) y (9.17)), la función de onda que describe el comportamiento del electrón en átomos hidrogenoides *dependerá de los tres números cuánticos n , ℓ y m_ℓ* :

$$\varphi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi) = R_{n,\ell}(r)\Theta_{\ell,m_\ell}(\theta)\Phi_{m_\ell}(\phi) \quad (9.19)$$

donde $R_{n,\ell}(r)$ es la parte radial de la función y el producto $\Theta(\theta)_{\ell,m_\ell}\Phi_{m_\ell}(\phi)$, que se acostumbra a escribir como $Y_{\ell,m_\ell}(\theta, \phi)$. Las funciones $Y_{\ell,m_\ell}(\theta, \phi)$ reciben el nombre de *armónicos esféricos*.

La función de onda está normalizada de manera que se cumple:

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\varphi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi = 1 \quad (9.20)$$

donde cada miembro de la función se normalizó separadamente.

A continuación se encuentran las funciones de onda para los tres primeros valores de n .

$$\varphi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$\varphi_{2,0,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$\varphi_{2,1,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0} \cos \theta$$

$$\varphi_{2,1,\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$\varphi_{3,0,0} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(27 - 18 \frac{Zr}{a_0} + 2 \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} \right) e^{-Zr/3a_0}$$

$$\varphi_{3,1,0} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0} \right) \left(\frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/3a_0} \cos \theta$$

$$\varphi_{3,1,\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$\varphi_{3,2,0} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$\varphi_{3,2,\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$$

$$\varphi_{3,2,\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$$

9.1.4 Números cuánticos

Los números enteros n , ℓ y m_ℓ que aparecen al determinar las soluciones de las ecuaciones (9.15), (9.16) y (9.17), son llamados números cuánticos principal (n), orbital (ℓ) y magnético (m_ℓ), y caracterizan el movimiento del electrón en el átomo.

En la tabla 9.2 se encuentran los posibles valores de estos números.

TABLA 9.2. Números cuánticos y sus posibles valores.

Número cuántico	Símbolo	Posibles valores
Principal	n	1, 2, ...
Orbital	ℓ	0, 1, 2, ..., $n - 1$
Magnético	m_ℓ	0, $\pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$

De la definición de cada uno de los números cuánticos se observa que:

1. Para cada valor de n hay n posibles valores de ℓ .
2. Para cada valor de ℓ hay $2\ell + 1$ posibles valores de m_ℓ .
3. Para cada valor de n hay n^2 funciones de onda con el mismo valor para la energía total del electrón.

El punto 3 se demuestra de la siguiente manera. Sea N el número de funciones de onda; entonces:

$$N = \sum_{\ell=0}^{n-1} m_\ell = \sum_{\ell=0}^{n-1} 2\ell + 1 = 1 + 2 + 3 + 5 + \cdots + 2(n - 1) + 1$$

lo cual es una progresión aritmética en la que la diferencia entre los términos es constante (en nuestro caso es igual a dos) y la suma de los

términos es igual a: $n/2$ (primer término + enésimo término) donde n es el número de términos que tiene la serie. Por consiguiente:

$$N = \sum_{\ell=0}^{n-1} 2\ell + 1 = \frac{n}{2}[1 + 2(n - 1) + 1] = n^2$$

Este resultado muestra que cada nivel de energía en el átomo es n^2 veces degenerado, excepto el estado base. Cuando $n = 1$, $\ell = 0$ y $m_\ell = 0$, la función de onda es $\varphi_{1,0,0}$ y solamente hay una. Cuando $n = 2$, ℓ toma los valores 0 y 1 y será 0 en el caso de $\ell = 0$, y 0, ± 1 en el caso de $\ell = 1$. Haciendo un diagrama se tiene lo siguiente:

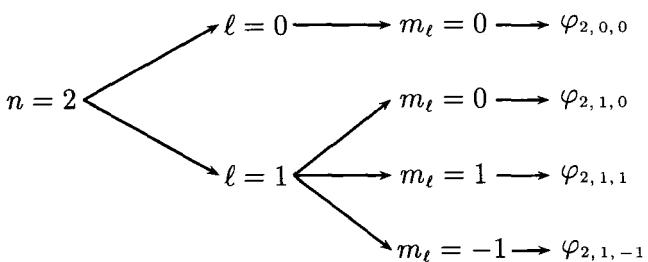


FIGURA 9.3. Diagrama de los valores de los números cuánticos para $n = 2$.

o sea, cuatro funciones de onda para el mismo número cuántico n y por consiguiente un mismo valor de la energía total del nivel energético correspondiente.

Los tres números cuánticos, dos de los cuales no son predecibles a partir de la teoría atómica de Bohr, tiene un significado físico.

1. El número cuántico principal (n) describe la cuantización de la energía en forma análoga a como lo hace en la teoría de Bohr.
2. El número cuántico orbital (ℓ) determina la magnitud del momento angular del electrón.
3. El número cuántico magnético (m_ℓ) determina la dirección del momento angular en el espacio.⁴

Como el número cuántico orbital sólo puede tomar valores enteros el momento angular también es cuantizado, resultado que concuerda con el correspondiente postulado de Bohr.

En el próximo capítulo se verá la relación que existe entre el momento angular y los números cuánticos orbital y magnético.

⁴Recuérdese que el momento angular es una cantidad vectorial, de manera que para describirla es necesario especificar su magnitud, dirección y sentido.

9.1.5 Densidad de probabilidad radial

En el modelo atómico de Bohr para el átomo de hidrógeno, el electrón describe una trayectoria circular alrededor del núcleo, de radio igual a $a_0 n^2 / Z$, donde a_0 es el radio de Bohr o radio de la primera órbita permitida ($n = 1$, $Z = 1$). Esto significa que el electrón describe órbitas de radios exactos lo cual contradice el principio de incertidumbre de Heisenberg.

Al considerar el problema desde el punto de vista cuántico ya no se presenta esta contradicción puesto que ya no existen valores exactos para la posición del electrón, sino probabilidades de encontrarlo en algún lugar del espacio en la vecindad del núcleo. Además, la densidad de probabilidad $|\varphi(r, \theta, \phi)|^2$ varía de un punto a otro del espacio como veremos a continuación.

La probabilidad de encontrar al electrón en un elemento de volumen dV es $|\varphi(r, \theta, \phi)|^2 dV$ donde $dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$. Al integrar sobre todo el rango de valores para los ángulos θ y ϕ se obtiene la probabilidad de encontrar al electrón a una distancia del núcleo comprendida entre r y $r + dr$:

$$\begin{aligned} P_{n,\ell}(r)dr &= \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\varphi_{n,\ell,m_\ell}|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |R_{n,\ell}(r)|^2 |Y_{\ell,m_\ell}(\theta, \phi)|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\ &= |R_{n,\ell}(r)|^2 r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_{\ell,m_\ell}|^2 \sin \theta d\theta d\phi \end{aligned}$$

Las integrales sobre los ángulos θ y ϕ son iguales a la unidad ya que la función Y_{ℓ,m_ℓ} está normalizada. Entonces, la probabilidad de encontrar al electrón a una distancia comprendida entre r y $r + dr$ es:

$$P_{n,\ell}(r)dr = r^2 |R_{n,\ell}(r)|^2 dr \quad (9.21)$$

donde la cantidad $r^2 |R_{n,\ell}(r)|^2$ se denomina *densidad de probabilidad radial*.

En la figura 9.4 se encuentran las gráficas de densidad de probabilidad radial en función de la distancia r al núcleo para $n = 1, 2$ y 3 ($Z = 1$).

Las gráficas de densidad de probabilidad radial muestran que el electrón se puede encontrar en cualquier parte del átomo en la vecindad del

núcleo, aunque la probabilidad de encontrarlo en esos lugares no es la misma. Por ejemplo, de acuerdo con el modelo atómico de Bohr, cuando $n = 2$ el electrón se encuentra a una distancia de $4a_0$ del núcleo (alrededor de 2.12 Å); mientras que desde el punto de vista cuántico y considerando solamente el caso $\ell = 0$, el electrón se puede encontrar en cualquier parte comprendida entre $r = 0$ y $r = 8$ Å aproximadamente, exceptuando los puntos para los cuales la probabilidad es nula. Pero como se observa de la gráfica, es más probable encontrarlo en $r = 2.12$ Å.

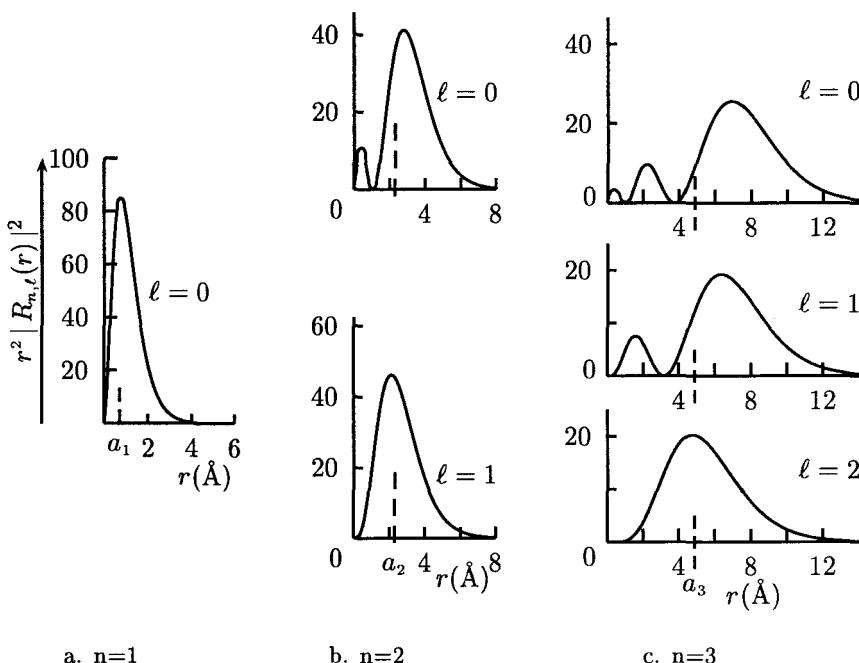


FIGURA 9.4. Densidad de probabilidad radial en función de la distancia $n = 1, 2$ y 3 ($Z = 1$). Las líneas punteadas corresponden al radio calculado apartir del modelo atómico de Bohr. La unidad de la escala vertical es arbitraria.

Si pudiéramos ver un electrón, observaríamos que es más frecuente encontrarlo en ciertos lugares que en otros y debido a este hecho se acostumbra a hablar de una nube electrónica cuya densidad de carga está determinada por la probabilidad de encontrar al electrón allí: la densidad será tanto mayor cuanto más grande sea la probabilidad. De ahí que en lugar de hablar de órbitas electrónicas se utilice el término *orbital* que se refiere al patrón trazado por el electrón durante su movimiento alrededor del núcleo.

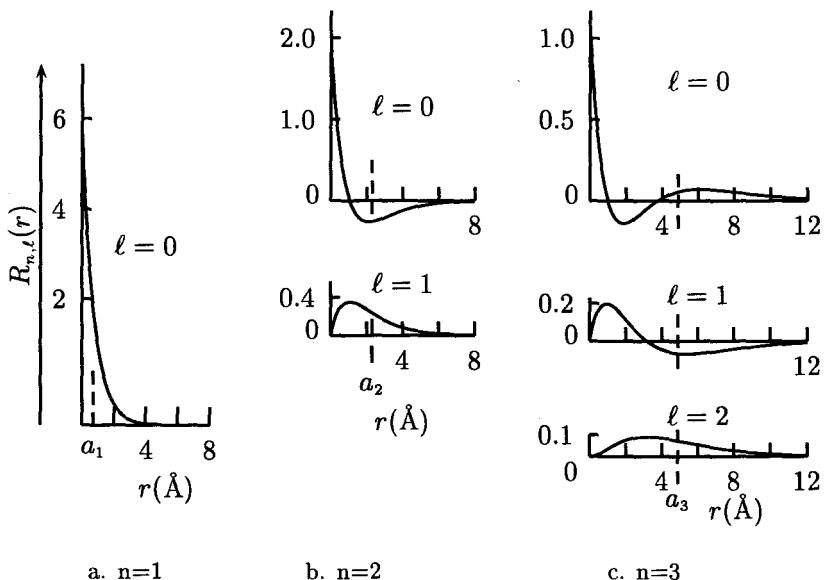


FIGURA 9.5. Función de onda radial en función de la distancia $n = 1, 2$ y $3 (Z = 1)$. Las líneas punteadas corresponden en cada caso al radio de Bohr correspondiente. La escala vertical es arbitraria.

En la figura 9.5 se encuentran las gráficas de la función de onda radial en función de la distancia r para $n = 1, 2$ y $3 (Z = 1)$.

Ejemplo 9.1.

¿Cuál es el valor más probable del radio de la órbita del electrón en un átomo de hidrógeno que se encuentra en su estado base?

El radio más probable es aquel para el cual la densidad de probabilidad radial es máxima y el máximo de una función se encuentra igualando a cero su primer derivada. Entonces para $n = 1, \ell = 0$:

$$\frac{dP_{1,0}(r)}{dr} = \frac{d}{dr}(r^2 |R_{1,0}(r)|^2) = \frac{d}{dr}\left(\frac{2r}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}\right)^2$$

de donde:

$$0 = \frac{8}{a_0^3} e^{-2r/a_0} \left(r - \frac{r^2}{a_0}\right)$$

expresión en la cual sólo puede ser cero el paréntesis. Por consiguiente:

$$r = a_0$$

resultado que concuerda con el valor calculado a partir del modelo atómico de Bohr. □

Preguntas

1. ¿En qué forma se afectarían los resultados mecanocuánticos obtenidos para átomos hidrogenoides si se hubiera tenido en cuenta la masa del núcleo?
2. ¿Se podría resolver la ecuación de Schrödinger para átomos hidrogenoides expresada en coordenadas rectangulares con el método de separación de variables?
3. ¿En cuáles ecuaciones importantes de la física también aparece el operador laplaciano?
4. ¿Por qué al resolver la ecuación de Schrödinger aparecen tres números cuánticos y no dos, cinco o cualquier otra cantidad?
5. Explique por qué la función de onda $\Phi(\phi)$ debe ser univaluada y por consiguiente, m_ℓ un número entero.
6. ¿Cuál es la diferencia entre el potencial de Coulomb y los potenciales estudiados en el capítulo séptimo?
7. ¿Cuál es la diferencia fundamental entre el radio del átomo de hidrógeno predicho por la teoría de Bohr y el que se obtiene a partir de la mecánica cuántica?
8. ¿Para los átomos hidrogenoides, en cuanto a los valores energéticos, aporta algo nuevo la teoría cuántica respecto al modelo atómico de Bohr?
9. ¿Por qué los niveles excitados del átomo de hidrógeno son degenerados, mientras que el estado base no lo es? Explique.

Problemas

1. La función de onda para el átomo de hidrógeno depende de los tres números cuánticos. Si $n = 4$, demuestre explícitamente que habrá 16 funciones de onda que describen el mismo nivel de energía.
2. Normalice la función de onda $\Phi(\phi) = Ne^{im_\ell\phi}$. Esto es, encuentre el valor de la constante N .

3. Demuestre que las funciones de onda $R_{1,0}(r)$ y $\Theta_{2,0}(\theta)$ están normalizadas. Para hallar la expresión de las funciones anteriores consulte la tabla 9.1.
4. Demuestre que la función de $\Theta_{2,0}(\theta)$ onda es solución de la ecuación (9.12).
5. Demuestre que la función $R_{1,0}(r)$ es solución de la ecuación (9.13).
6. Demuestre que la función de onda $\varphi_{1,0,0}$ es solución de la ecuación (9.14).
7. La probabilidad de encontrar un electrón atómico, cuya función de onda radial es $R_{n,\ell}$, fuera de una esfera de radio r_0 centrada en el núcleo es:

$$\int_{r_0}^{\infty} r^2 |R_{n,\ell}(r)|^2 dr$$

- (a) Calcule la probabilidad de encontrar al electrón del átomo de hidrógeno en su estado base, a una distancia mayor que a_0 del núcleo.
- (b) Calcule la probabilidad de encontrarlo a una distancia mayor que $2a_0$. De acuerdo con la física clásica nunca podrá encontrarse a esa distancia del núcleo. R/: 24%
8. El valor medio de la distancia radial, \bar{r} , en los átomos hidrogenoides está dado por la expresión:

$$\bar{r} = \frac{n^2 a_0}{Z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{n^2} \right] \right\}$$

- (a) Calcule \bar{r} para los estados energéticos con $n = 1, 2$ y 3 .
- (b) Compare estos valores con los correspondientes resultados obtenidos mediante la fórmula de Bohr para el radio electrónico.

Capítulo 10

Momentos angulares

10.1 Momento angular orbital

10.1.1 Operador de momento angular orbital

En mecánica clásica, el momento angular de una partícula en movimiento no rectilíneo es la cantidad vectorial \vec{L} dada por la relación:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (10.1)$$

donde \vec{r} es el vector de posición de la partícula con respecto al origen del sistema de coordenadas y \vec{p} es su cantidad de movimiento lineal (figura 10.1).

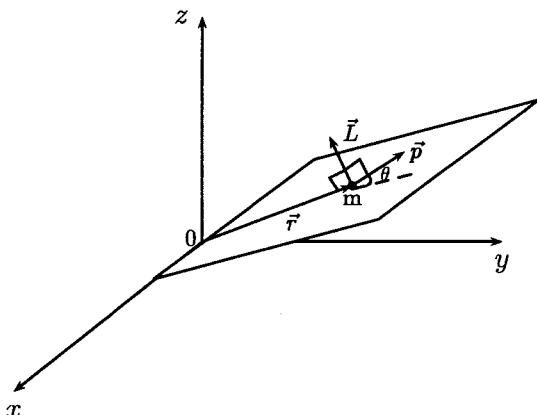


FIGURA 10.1. Vectores de posición, cantidad de movimiento y momento angular de una partícula en movimiento.

De acuerdo con la definición del producto vectorial, el momento angular

\vec{L} es un vector perpendicular al plano formado por los vectores de posición y cantidad de movimiento y su magnitud es igual a $|\vec{r}||\vec{p}| \sin \theta$ donde θ es el ángulo formado por los vectores \vec{r} y \vec{p} . En coordenadas rectangulares:

$$L = \sqrt{L_x^2 + L_y^2 + L_z^2} \quad (10.2)$$

donde:

$$L_x = y p_z - z p_y \quad L_y = z p_x - x p_z \quad L_z = x p_y - y p_x \quad (10.3)$$

Para discutir el momento angular cuánticamente, construimos sus operadores correspondientes reemplazando las cantidades de movimiento de las ecuaciones (10.2) y (10.3) por sus respectivos operadores mecanocuánticos (ver capítulo 7) obteniendo:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) & \hat{L}_y &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (10.4)$$

Debido a que en todo sistema físico aislado esféricamente simétrico el momento angular es una constante de movimiento, esto es, se conserva, es más conveniente trabajar las expresiones anteriores en coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_y &= i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}^2 &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \end{aligned} \quad (10.5)$$

Además, debe recordarse que el único resultado posible de la medición de una variable dinámica es uno de los valores propios del operador mecanocuántico correspondiente (segundo postulado de la mecánica cuántica).

10.1.2 Cuantización del espacio

Veamos ahora cuál es el efecto de los operadores de momento angular sobre las funciones de onda propias que describen cualquier átomo hidrogenoide.

Los operadores \hat{L}_z y \hat{L}^2 conducen a resultados interesantes. La función de onda para átomos hidrogenoides tiene la forma:

$$\varphi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi) = R_{n,\ell}(r) \Theta_{\ell,m_\ell}(\theta) \Phi_{m_\ell}(\phi)$$

aplicando el operador \hat{L}_z sobre ella:

$$\hat{L}_z \varphi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \varphi_{n,\ell,m_\ell} = -i\hbar R_{n,\ell}(r) \Theta_{\ell,m_\ell}(\theta) \frac{\partial}{\partial \phi} \Phi_{m_\ell}(\phi)$$

puesto que $R_{n,\ell}(r)$ y $\Theta_{\ell,m_\ell}(\theta)$ no son funciones de la variable ϕ . Como $\Phi_{m_\ell}(\phi)$ es igual a $e^{im_\ell \phi}$, entonces:

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \varphi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi) &= -i^2 \hbar m_\ell R_{n,\ell}(r) \Theta_{\ell,m_\ell}(\theta) \Phi_{m_\ell}(\phi) \\ &= \hbar m_\ell \varphi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi) \end{aligned} \quad (10.6)$$

Para el operador \hat{L}^2 se obtiene el siguiente resultado:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \varphi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi) &= -\hbar^2 R_{n,\ell}(r) \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Theta_{\ell,m_\ell}(\theta) \Phi_{m_\ell}(\phi) \end{aligned}$$

como la segunda derivada de $\Phi_{m_\ell}(\phi)$ es igual a $-m_\ell^2 \Phi(\phi)$:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \varphi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi) &= -\hbar^2 R_{n,\ell}(r) \Phi_{m_\ell}(\phi) \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \Theta(\theta) \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{m_\ell^2}{\sin^2 \theta} \Theta_{\ell,m_\ell}(\theta) \right] \end{aligned}$$

Pero la función $\Theta_{\ell,m_\ell}(\theta)$ es solución de la ecuación diferencial que se encuentra en el paréntesis cuadrado; como vimos en la ecuación (9.10) del capítulo 9 su solución es $-\ell(\ell+1)\Theta_{\ell,m_\ell}(\theta)$. Entonces:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \varphi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi) &= \hbar^2 \ell(\ell+1) R_{n,\ell}(r) \Theta_{\ell,m_\ell}(\theta) \Phi_{m_\ell}(\phi) \\ &= \hbar^2 \ell(\ell+1) \varphi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi) \end{aligned} \quad (10.7)$$

Las ecuaciones (10.6) y (10.7) muestran que el efecto de los operadores \hat{L}_z y \hat{L}^2 sobre la función de onda que describe átomos hidrogenoides es

multiplicarla por una constante que no es más que el valor propio del operador correspondiente.

Por consiguiente, teniendo en cuenta el segundo postulado de la mecánica cuántica, podemos afirmar que la magnitud del vector momento angular de electrón en átomos hidrogenoides, así como su componente con respecto a un eje z arbitrario, son:

$$L_z = m_\ell \hbar \quad m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell \quad (10.8)$$

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)} \hbar \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (10.9)$$

Hemos encontrado la cuantización del momento angular tal como lo había predicho Bohr aunque el valor de la magnitud no sea el mismo. Al momento angular L se acostumbra a denominarlo *momento angular orbital*.

Así como el número cuántico principal (n) determina los posibles estados energéticos del átomo, los números cuánticos orbital (ℓ) y magnético (m_ℓ) determinan los posibles estados de momento angular y los posibles valores de la componente z del vector momento angular respectivamente.

Al aplicar los operadores \hat{L}_x y \hat{L}_y sobre la función de onda de los átomos hidrogenoides, no se reproduce nuevamente la función original. Es decir, la función de onda $\varphi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi)$ no es función propia de los operadores anteriores. Esto es una consecuencia del principio de incertidumbre de Heisenberg: las tres componentes del momento angular orbital están relacionadas entre sí (ver ejemplo 1) de manera que si L_z tiene un valor bien definido (como acabamos de ver), las otras dos componentes no pueden tenerlo.

Las propiedades del momento angular orbital se pueden representar en un diagrama vectorial. Los números cuánticos están relacionados entre sí de la siguiente manera:

$$n = 1, 2, \dots \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad m_\ell = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell$$

por lo tanto, para el conjunto de estados que tienen el mismo valor para el número cuántico ℓ , la magnitud del vector momento angular orbital es igual a $[\ell(\ell+1)]^{1/2} \hbar$ y su componente z puede tomar los valores enteros comprendidos entre $-\ell\hbar$ y $\ell\hbar$, esto es, habrá $2\ell+1$ posibles orientaciones del vector \vec{L} en el espacio, una por cada valor de m_ℓ .

Veamos un ejemplo: sea $\ell = 2$.

Los posibles valores de m_ℓ son $\pm 2, \pm 1$ y 0 :

$$L = \sqrt{2(2+1)} \hbar = \sqrt{6} \hbar \quad L_z = -2\hbar, -\hbar, 0, \hbar, 2\hbar$$

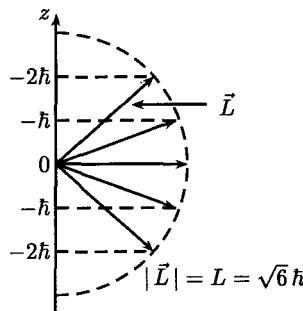


FIGURA 10.2. Diagrama vectorial de la cuantización del espacio para $\ell = 2$

lo cual se encuentra representado en la figura 10.2.

La dirección del eje z en el espacio es arbitraria.

A las posibles orientaciones del vector momento angular con respecto al eje z se denomina *cuantización del espacio*, orientación que está determinada por el número cuántico magnético.

Para deducir la cuantización del espacio utilizamos un átomo hidrogenoide cuyo potencial es de la forma $-Ze^2/r$, pero esto se cumple para cualquier potencial cuya forma dependa solamente de la coordenada radial r . Es decir, para cualquier potencial con simetría esférica.

Ejemplo 10.1.

Las componentes del momento angular orbital están relacionadas entre sí de la siguiente manera (operadores correspondientes):

$$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z \quad \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i\hbar \hat{L}_x \quad \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z = i\hbar \hat{L}_y$$

Entonces, no es posible determinar simultáneamente con la misma precisión las tres componentes. En cambio se puede determinar L^2 y una de las componentes, usualmente L_z por la forma sencilla de su expresión.

Las ecuaciones anteriores se obtienen de la siguiente manera:

$$\hat{L}_x \hat{L}_y = i^2 \hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Respetando el orden de los términos al efectuar los productos se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \widehat{L}_x \widehat{L}_y &= i^2 \hbar^2 \left[y \frac{\partial}{\partial z} \left(z \frac{\partial}{\partial x} \right) - z \frac{\partial}{\partial y} \left(z \frac{\partial}{\partial x} \right) \right. \\
 &\quad \left. - y \frac{\partial}{\partial z} \left(x \frac{\partial}{\partial z} \right) + z \frac{\partial}{\partial y} \left(x \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] \\
 &= i^2 \hbar^2 \left[y \left(\frac{\partial z}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} + z \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} \right) - z \left(\frac{\partial z}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} + z \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \right) \right. \\
 &\quad \left. - y \left(\frac{\partial x}{\partial z} \frac{\partial}{\partial z} + x \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + z \left(\frac{\partial x}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} + x \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \right) \right] \\
 &= i^2 \hbar^2 \left[y \frac{\partial}{\partial x} + yz \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} - z^2 \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \right. \\
 &\quad \left. - xy \frac{\partial^2}{\partial z^2} + zx \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \right] \tag{10.10}
 \end{aligned}$$

Procediendo de igual manera para el producto $\widehat{L}_y \widehat{L}_x$ se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \widehat{L}_y \widehat{L}_x &= i^2 \hbar^2 \left[yz \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} - xy \frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right. \\
 &\quad \left. + x \frac{\partial}{\partial y} + xz \frac{\partial^2}{\partial z \partial y} \right] \tag{10.11}
 \end{aligned}$$

Como las funciones a las cuales se aplican estos operadores son continuas, se cumple que:

$$\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \quad \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} = \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} \quad \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} = \frac{\partial^2}{\partial z \partial y}$$

Al efectuar la resta entre las ecuaciones (10.10) y (10.11) el resultado final es:

$$\widehat{L}_x \widehat{L}_y - \widehat{L}_y \widehat{L}_x = i\hbar \left[-i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] = i\hbar \widehat{L}_z$$

Trabajando de la misma forma se obtienen las otras dos ecuaciones para las componentes del momento angular orbital. \square

10.1.3 Reglas de selección

El último postulado de Bohr predecía cuál debía ser la energía del fotón emitido (o absorbido) en una transición electrónica entre dos niveles energéticos de átomos hidrogenoides, pero no podía discernir cuáles de esas transiciones eran más probables.

Desde el punto de vista de la mecánica cuántica, el hecho de que cada nivel de energía de los átomos hidrogenoides (con excepción del estado base) está formado por varios estados de momento angular orbital permite determinar las posibles transiciones de un estado de energía a otro. Como el fotón emitido (o absorbido) durante una transición electrónica tiene un momento angular, el átomo debe cambiar su propio momento angular para compensar el que es llevado (o adquirido) por el fotón al ser emitido (o absorbido) ya que el *momento angular total* del sistema átomo-fotón debe conservarse.

La conservación del momento angular orbital impone dos condiciones denominadas *reglas de selección* que indicarán qué transiciones son permitidas entre dos niveles energéticos del átomo, el inicial determinado por los números cuánticos n_i, ℓ_i, m_{ℓ_i} y el final por los números cuánticos n_f, ℓ_f, m_{ℓ_f} :

$$\Delta\ell = \ell_i - \ell_f = \pm 1 \quad \Delta m_\ell = m_{\ell_i} - m_{\ell_f} = 0, \pm 1 \quad (10.12)$$

En la figura 10.3 se muestran algunas transiciones electrónicas permitidas entre estados con los valores para la cantidad de momento angular orbital. Como notarán, cada estado se ha representado por medio de letras y números; esto se debe a que cada nivel de energía puede tener n diferentes estados de momento angular orbital, todos con la misma energía E ; para diferenciarlos se les denomina ns, nd, \dots etc., donde la letra n se refiere al nivel de energía y las letras s, p, d, f, g etc. corresponden a los valores del número cuántico $\ell : 0, 1, 2, \dots$ respectivamente.

Este código se originó a partir de la clasificación empírica de los espectros atómicos en las series llamadas *principal*, *difusa* y *fundamental*. Esta clasificación se llevó a cabo antes de que se desarrollaran los modelos atómicos y se sigue utilizando hoy día. Así, un estado s es aquel que no tiene momento angular orbital; un estado p es aquel que tiene un momento angular orbital con número cuántico orbital igual a 1; y así sucesivamente. Observen que las transiciones entre estados de momento angular orbital sólo ocurren entre columnas adyacentes, de acuerdo con la figura 10.3.

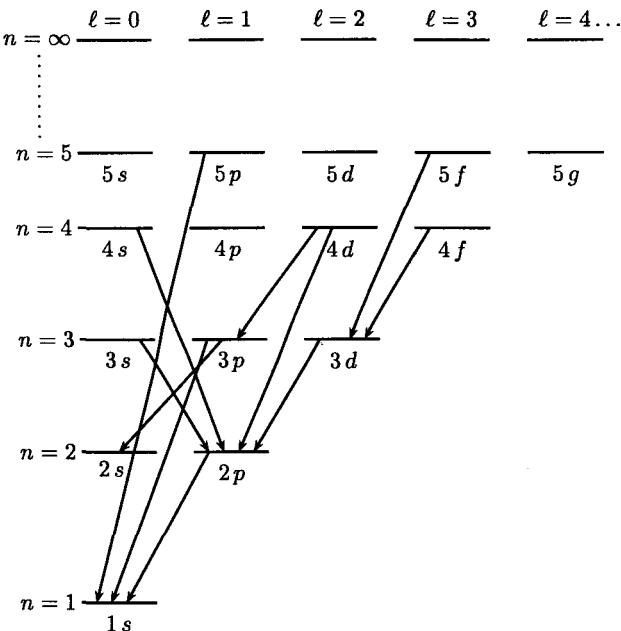


FIGURA 10.3. Transiciones permitidas entre estados con valores de momento angular orbital mostrados.

10.2 Efecto Zeeman

La cuantización del espacio se manifiesta claramente cuando se observa el espectro de emisión de un átomo que se encuentra en presencia de un campo magnético externo suficientemente fuerte. Cada línea del espectro se divide en tres componentes entre las cuales el espaciamiento es el *mismo para todos los átomos* y proporcional a la magnitud del campo magnético aplicado.

El efecto fue observado por primera vez en 1896 por el físico P. Zeeman (basándose en unas experiencias realizadas por Faraday en 1862) y el conjunto de las tres líneas se denominó *triplete de Lorentz* quien desarrolló la teoría de este efecto. Veamos en qué consiste.

De acuerdo con la teoría clásica, un electrón que gira alrededor del núcleo con una velocidad angular $\omega = 2\pi\nu$ da lugar a una espira de corriente (de igual radio a su órbita) cuya magnitud está dada por la relación:

$$i = \frac{q}{t} = e\nu = e \frac{\omega}{2\pi}$$

Como la espira de corriente es muy pequeña, equivale a su vez a un

dipolo magnético de momento magnético igual a la corriente por el área de la espira. Por consiguiente, el momento magnético del electrón en el átomo estará dado por la relación:

$$M_t = i \times A = \frac{e \omega}{2\pi} \pi r^2 = \frac{e \omega r^2}{2} \quad (10.13)$$

También sabemos que el electrón, por estar girando alrededor del núcleo, tiene un momento angular orbital $L = m_e \omega r^2$; entonces¹:

$$M_t = \frac{e}{2m_e} L \quad (10.14)$$

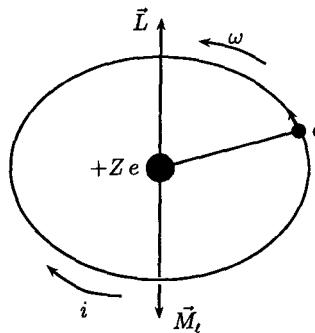


FIGURA 10.4. Momento angular orbital y momento magnético orbital del electrón en un átomo.

Esta es la relación entre las magnitudes de los vectores momento angular orbital y momento magnético. Pero tanto el momento angular orbital como el momento magnético son vectores cuyas direcciones dependen de la dirección del movimiento del electrón en el primer caso y del sentido de la corriente en el segundo, siendo ésta opuesta a la dirección del movimiento del electrón (figura 10.4). Entonces, el momento magnético orbital, como lo llamaremos, tiene dirección opuesta al momento angular orbital; esto es:

$$\vec{M}_t = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad (10.15)$$

Este resultado, a pesar de haber utilizado la electrodinámica clásica para deducirlo, sigue siendo válido en mecánica cuántica para un movimiento

¹No confundir m_e masa del electrón con m_t número cuántico magnético.

arbitrario con momento angular orbital L ya que la razón M_ℓ/L es independiente de la física utilizada para determinarla: e y m_e son constantes universales.

De acuerdo con lo anterior, la componente z del momento magnético orbital es:

$$M_{\ell z} = -\frac{e}{2m_e} L_z = -\frac{e}{2m_e} m_\ell \hbar = -\mu_B m_\ell \quad (10.16)$$

donde $\mu_B = e\hbar/2m_e = 9.27 \times 10^{-24} \text{ J m}^2/\text{Wb}$ se denomina *magnetón de Bohr* y es la cantidad mínima de magnetismo que puede crear el movimiento del electrón alrededor del núcleo.

Cuando se coloca un dipolo magnético dentro de un campo magnético externo de intensidad B , adquiere una energía ${}^2E_B = -\vec{M}_\ell \cdot \vec{B}$. Esto significa que al colocar un átomo hidrogenoide en un campo magnético, su electrón (que se comporta como un dipolo magnético) adquiere una energía adicional igual a:

$$E_B = -\vec{M}_\ell \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_e} \vec{L} \cdot \vec{B} \quad (10.17)$$

y al mismo tiempo experimenta un torque dado por la relación:

$$\vec{\tau} = \vec{M}_\ell \times \vec{B} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \times \vec{B} \quad (10.18)$$

que tiende a alinear el momento magnético orbital (y por lo tanto el momento angular orbital) en la dirección del campo magnético.

El efecto de este torque es hacer girar el momento angular orbital alrededor de la dirección del campo magnético \vec{B} , describiendo un cono como se muestra en la figura 10.5.

Si suponemos, de manera arbitraria, que la dirección del campo magnético coincide con el eje z ,³ la energía adicional que adquiere el electrón atómico es:

$$E_{Bz} = -M_{\ell z} B = \mu_B B m_\ell \quad (10.19)$$

y nuevamente aparece la cuantización de la energía: E_B puede tomar solamente $2\ell+1$ valores diferentes, correspondientes a las $2\ell+1$ posibles orientaciones del momento angular orbital con respecto a la dirección del campo magnético \vec{B} . Noten que la separación entre los niveles energéticos es constante e igual a $\mu_B B$.

²En general: $E_B = -\vec{M} \cdot \vec{B} = -MB \cos \theta = -M_z B$ donde \vec{M} es el momento magnético y \vec{B} el campo magnético externo aplicado.

³En el momento en que se establece el campo magnético \vec{B} se tiene una dirección espacial bien específica. Hacemos que el “eje z ” del sistema de referencia coincida con tal dirección.

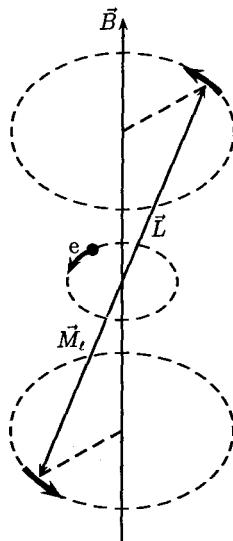


FIGURA 10.5. Precesión del momento angular orbital alrededor de la dirección del campo magnético \vec{B}

Entonces, la energía del electrón de un átomo hidrogenoide que se encuentra dentro de un campo magnético externo es:

$$E = E_n + E_{Bz} = E_n + \mu_B B m_\ell \quad (10.20)$$

donde E_n es su energía en ausencia de campo magnético externo.

Del resultado anterior observamos que cada nivel de energía con números cuánticos n, ℓ se separa en $2\ell + 1$ niveles en presencia de un campo magnético externo. Además, noten que ahora la energía total del electrón depende de los tres números cuánticos.

Debido a las reglas de selección, no todas las transiciones electrónicas son posibles entre los diferentes niveles que existen cuando un átomo hidrogenoide se encuentra dentro de un campo magnético.

Consideremos una transición electrónica entre un estado de energía E_{ni} y otro E_{nf} , $E_{ni} > E_{nf}$, para los cuales se cumple $\Delta\ell = \pm 1$.

En ausencia de campo magnético, la energía del fotón emitido es:

$$h\nu_0 = E_{ni} - E_{nf} \quad (10.21)$$

En presencia de un campo magnético B , paralelo al eje z , tenemos que:

$$E_i = E_{ni} + \mu_B B m_{ti} \quad E_f = E_{nf} + \mu_B B m_{tf}$$

y la energía del fotón emitido es:

$$h\nu = E_i - E_f = (E_{ni} - E_{nf}) + \mu_B B(m_{ti} - m_{tf}) \quad (10.22)$$

$$= h\nu_0 + \mu_B B\Delta m_t \quad (10.23)$$

Pero solamente son permitidas las transiciones que cumplan la condición $\Delta m_t = 0, \pm 1$.

Por consiguiente, en presencia de un campo magnético externo, la transición original de frecuencia ν_0 se transforma en tres transiciones cuyas frecuencias son:

$$\nu_0 - \frac{\mu_B B}{h}; \quad \nu_0; \quad \nu_0 + \frac{\mu_B B}{h} \quad (10.24)$$

Consideremos los casos con número cuántico orbital 0, 1 y 2.

Estados energéticos con $\ell = 0$ (estados s), no son afectados por la presencia de un campo magnético externo porque el número cuántico magnético es cero.

Estados con $\ell = 1$ (estados p), se separan en tres estados igualmente espaciados que corresponden a los tres posibles valores de $m_\ell : -1, 0, +1$. Entonces, una transición $p \rightarrow s$ en presencia de campo magnético externo se transforma en tres transiciones: una de $m_{ti} = 0$ a $m_{tf} = 0$ con la frecuencia original y dos más que corresponden a las transiciones de $m_{ti} = \pm 1$ a $m_{tf} = 0$ con una diferencia de frecuencia de:

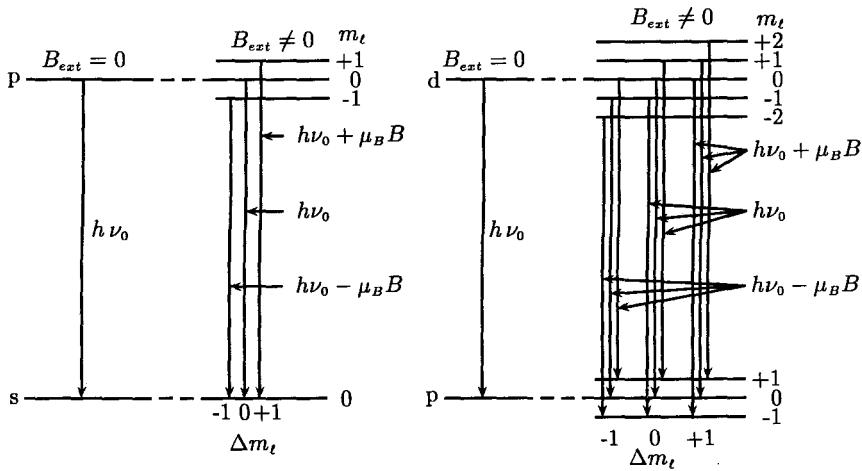
$$\Delta\nu = \pm \frac{\mu_B B}{h} = 1.4 \times 10^{10} \times B \text{ s}^{-1}$$

En la figura 10.6a. se encuentra el esquema de la transición $p \rightarrow s$.

Estados con $\ell = 2$ (estados d), se separan en cinco estados que corresponden a los valores de $m_\ell = \pm 2, \pm 1, 0$. La transición $p \rightarrow d$ tiene nueve posibilidades de acuerdo con la regla de selección $\Delta m_\ell = 0, \pm 1$; pero, transiciones con igual Δm_ℓ tienen también la misma energía y, por consiguiente, la misma líneapectral en el espectro correspondiente. La diferencia de frecuencia de las tres transiciones sigue siendo $\pm \mu_B B/h$. En la figura 10.6b. se encuentra el esquema de la transición $p \rightarrow d$ en presencia de campo magnético externo y en la figura 10.6c. se muestra el espectro correspondiente.

Los resultados experimentales observados en el efecto Zeeman sólo son explicables a partir de la cuantización del espacio. Si el momento angular orbital pudiese tener cualquier orientación en el espacio, en presencia de un campo magnético externo lo suficientemente fuerte los

estados de momento angular se dividirían en una cantidad muy grandes de ellos y no en $2\ell + 1$, con el resultado que en el espectro correspondiente se observaría una serie de bandas más o menos anchas y no líneas bien definidas como es el caso.



a. Transición $p \rightarrow s$ sin y con campo magnético.

b. Transición $d \rightarrow p$ sin y con campo magnético.

c. Espectro atómico sin y con campo magnético.

FIGURA 10.6. Esquema de transiciones típicas debidas al efecto Zeeman.

Ejemplo 10.2.

Se coloca una muestra de hidrógeno en un campo magnético de intensidad igual a 0.3 Wb/m^2 . ¿Cuál es la separación entre las líneas espectrales debido al efecto Zeeman de una línea de longitud de onda igual a 4500 Å ?

Solución

De acuerdo con la teoría del efecto Zeeman, la diferencia de frecuencia entre las líneas espectrales debido a dicho efecto es:

$$\Delta\nu = 1.4 \times 10^{10} \times 0.3 \text{ s}^{-1} = 0.42 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$$

De la relación $\lambda = c/\nu$ se tiene que:

$$\Delta\lambda = -\frac{c}{\nu^2} \Delta\nu = \frac{\lambda^2}{c} \Delta\nu$$

donde el signo negativo solamente indica la relación inversa que existe entre la frecuencia y la longitud de onda. Reemplazando datos:

$$\Delta\lambda = 2.83 \times 10^{-2} \text{ Å}$$

□

10.3 Momento angular de spín

Como ya se había mencionado en el capítulo 4, un estudio más detallado de los espectros hidrogenoides mostró que las líneas eran realmente dos líneas muy cercanas entre sí, fenómeno que se denominó *estructura fina del espectro*. Esto indicaba una división de los correspondientes estados energéticos del átomo. La pareja de líneas llamada *doblete*, parecía indicar la existencia de otro número cuántico que solo podía tomar dos valores.

En 1925 S. Goudsmith y G. Uhlenbeck sugirieron que el electrón, además de su masa y carga, tenía otra propiedad que llamaron *spín*: un momento angular intrínseco característico de cada partícula.

Debido a que el electrón posee carga eléctrica, el momento angular de spín, que se designa con la letra \vec{S} , debe tener asociado un momento magnético \vec{M}_s y la relación entre el momento angular de spín y el momento magnético de spín deberá ser de la misma forma que la que existe entre el momento angular orbital \vec{L} y el momento magnético orbital \vec{M}_l . Experimentalmente se demostró que esta relación es:

$$\vec{M}_s = -\frac{2e}{m_e} \vec{S} \quad (10.25)$$

En forma análoga al momento angular orbital, el momento angular de spín \vec{S} y su componente z , S_z , tienen asociados un número cuántico que designamos con las letras s y m_s , respectivamente. Los posibles

valores de m_s estarán comprendidos entre $-s$ y s y habrá $2s + 1$ posibles orientaciones del vector momento angular de spín en el espacio.

A partir de datos espectrales y de la teoría desarrollada por P. Dirac se encontró que el número cuántico de spin para el electrón sólo podía tener un valor: $s = 1/2$. Por consiguiente, los posibles valores del número cuántico magnético de spin m_s son $-1/2$ y $1/2$ solamente. Los valores de la magnitud del momento angular de spin y de su componente z son:

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{1}{2}\sqrt{2}\hbar$$

$$S_z = m_s\hbar = \pm \frac{1}{2}\hbar \quad (10.26)$$

A diferencia del momento angular orbital, el momento angular de spin del electrón sólo tiene dos orientaciones posibles en el espacio y su magnitud es constante (figura 10.7).

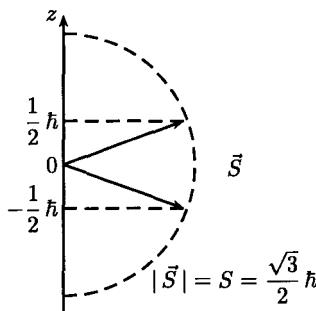


FIGURA 10.7. Posibles orientaciones del spín del electrón en el espacio.

La comprobación experimental de la doble orientación del spin en el espacio fue realizada por O. Stern y W. Gerlach en 1921, esto es, antes de que se postulara su existencia. Este experimento mostró claramente, en presencia de un campo magnético paralelo al eje z , la división de un haz de átomos en dos haces: uno en dirección $+z$ y otro en dirección $-z$, correspondientes a las dos orientaciones de spin.

Se acostumbra a llamar “spin hacia arriba” (\uparrow) a $m_s = 1/2$ y “spin hacia abajo” (\downarrow) a $m_s = -1/2$; aunque en ningún momento el spin del electrón sea paralelo o antiparalelo a la dirección del eje z .

Al ser definido el cuarto número cuántico, Pauli enuncia su *principio de exclusión* con el cual se puede explicar en forma simple y completa

la distribución de los electrones en los átomos de más de un electrón⁴:

En un átomo no pueden existir dos electrones con el mismo conjunto de números cuánticos n, ℓ, m_ℓ, m_s . Por lo menos uno de ellos debe ser diferente.

Ejemplo 10.3.

Un haz de electrones entra en un campo magnético de intensidad $B = 1.2 \text{ Wb/m}^2$. ¿Cuál es la diferencia de energía entre electrones con spin hacia arriba y electrones con spin hacia abajo en este campo?

Solución

Supongamos que el campo magnético es paralelo al eje z . Entonces el momento magnético de spin y su componente z son respectivamente:

$$\vec{M}_s = -\frac{2e}{m_e} \vec{S}$$

$$M_{Sz} = -\frac{2e}{m_e} S_z = -\frac{2e}{m_e} m_s \hbar = -2\mu_B m_s$$

La energía adicional que adquiere el electrón debido a su momento magnético de spin es:

$$E_{Bz} = -M_{Sz} B = 2\mu_B B m_s = \pm \mu_B B$$

puesto que $m_s = \pm 1/2$.

La diferencia de energía entre electrones con spin opuesto es:

$$E = E_{B+} - E_{B-} = \mu_B B - (-\mu_B B) = 2\mu_B B$$

Reemplazando datos, el resultado es:

$$E = 2.3 \times 10^{-23} J$$

□

⁴La distribución electrónica de todos los elementos se encuentra en el apéndice F.

10.4 Momento angular total

En las secciones anteriores vimos que el electrón en el átomo tiene un momento angular orbital y un momento angular de spin (lo cual es cierto para cualquier átomo). Entonces, tiene un momento angular total dado por la suma vectorial:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (10.27)$$

y, como todo momento angular, es cuantizado. Los números cuánticos de momento angular total y su componente z son j y m_j respectivamente y su magnitud y componente z son:

$$J = \sqrt{j(j+1)\hbar} \quad J_z = m_j\hbar \quad (10.28)$$

donde:

$$j = \ell + s = \ell \pm \frac{1}{2} \quad m_j = -j, \dots, j \quad (10.29)$$

El momento angular total del electrón tiene dos valores por cada valor del número cuántico orbital, excepto para $\ell = 0$ (estados s) donde solo tiene el valor $1/2$. En la figura 10.8 se muestran las posibles orientaciones de los vectores \vec{L} y \vec{S} para formar el vector \vec{J} .

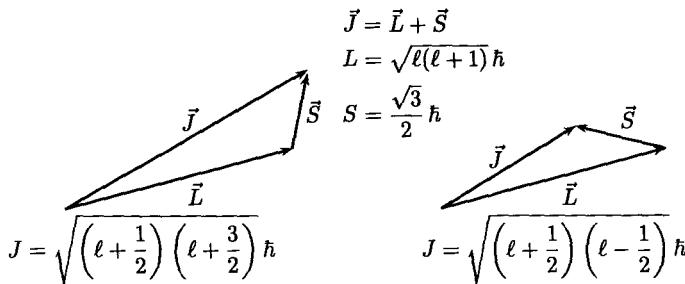


FIGURA 10.8. Posibles orientaciones relativas de los vectores \vec{L} y \vec{S} para formar el vector \vec{J} .

Las transiciones electrónicas entre estados de momento angular total deben cumplir las reglas de selección:

$$\Delta j = 0, \pm 1 \quad \Delta m_j = 0, \pm 1 \quad (10.30)$$

En presencia de un campo magnético externo, el momento angular total conduce a otra división de los niveles de energía del átomo y de las correspondientes líneas espectrales en cuatro o más componentes denominado *efecto Zeeman anómalo*.

La doble orientación del spin del electrón con respecto al momento angular orbital (ecuación (10.29)) permite explicar, sin entrar en detalles, el desdoblamiento de los niveles de energía o presencia de dobletes en los espectros atómicos (exceptuando el estado s).

Este efecto es una consecuencia de la interacción de naturaleza magnética que se presenta entre el momento angular orbital y el momento angular de spin del electrón, denominada *interacción spin-órbita*. El resultado de esta interacción es proporcionarle al electrón una energía adicional (que no se debe a la presencia de un campo magnético externo) que es proporcional al producto escalar $\vec{S} \cdot \vec{L}$:

$$E = E_n + E_{SL} = E_n + b \vec{S} \cdot \vec{L} \quad (10.31)$$

donde E_n es la energía del electrón cuando no hay interacción spin-órbita. La constante b se obtiene a partir de consideraciones clásicas del movimiento del electrón alrededor del núcleo y está dada por la relación:

$$b = \frac{2\alpha^2 Z^2 |E_n|}{\hbar^2 n \ell (\ell + 1) (2\ell + 1)} \quad (10.32)$$

donde n , ℓ son los números cuánticos principal y orbital respectivamente y $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) = 1/137$ es la llamada *constante de estructura fina* de los espectros atómicos.

Los efectos mencionados en este texto que dan lugar a la división de líneas espectrales en los espectros atómicos son solamente algunos de ellos, los demás están fuera del alcance de este curso.

Para terminar, veamos cómo es la nomenclatura de los estados de momento angular orbital del electrón teniendo en cuenta el número cuántico j y cómo se modifica esta nomenclatura para átomos con más de un electrón.

Es costumbre agregar a los estados de momento angular orbital del electrón (s, p, d, f, \dots) un subíndice con el valor del número cuántico j como se muestra en la tabla 10.1.

TABLA 10.1. Estados de momento angular orbital del electrón

ℓ	0	1	2	3
j	1/2	1/2, 3/2	3/2, 5/2	5/2, 7/2
Símbolo	$s_{1/2}$	$p_{1/2}, p_{3/2}$	$d_{3/2}, d_{5/2}$	$f_{5/2}, f_{7/2}$

Cuando el átomo tiene varios electrones los vectores de momento angular orbital y de spin, \vec{L} y \vec{S} , serán la suma vectorial de los momentos

angulares de todos los electrones presentes en el átomo:

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^k \vec{L}_i \quad \vec{S} = \sum_{i=1}^k \vec{S}_i \quad (10.33)$$

donde k es el número de electrones que hay en el átomo.

Los estados de momento angular orbital se designan ahora con letras mayúsculas:

TABLA 10.2. Estados de momento angular orbital.

L	0	1	2	3	4	5	...
Símbolo	S	P	D	F	G	H	...

Antes y después de la letra correspondiente del momento angular orbital se colocan un superíndice y un subíndice respectivamente. El superíndice indica la *multiplicidad* del estado, esto es, las diferentes orientaciones posibles de los vectores \vec{L} y \vec{S} (y por lo tanto \vec{J}) en el átomo. Esta multiplicidad es igual a $2S + 1$. El subíndice indica el valor del momento angular total \vec{J} . Lo anterior se representa por medio del símbolo:

$$^{2s+1}L_j \quad (10.34)$$

Por ejemplo: el símbolo $^2P_{3/2}$ representa una configuración electrónica en la cual:

$$S = \frac{1}{2} \quad L = 1 \quad J = \frac{3}{2}$$

Preguntas

- Comparando las expresiones para el momento angular orbital de Bohr y la que se obtiene a partir de la mecánica cuántica ¿cuál da un valor mayor?
- Si el número cuántico principal es muy grande y el número cuántico orbital correspondiente tiene su máximo valor, ¿cuál es la razón del momento angular de Bohr al momento angular mecanocuántico? Este resultado está de acuerdo con un principio. ¿Cuál es?
- Explique en sus propias palabras qué se entiende por cuantización del espacio.
- ¿Cuál es la razón por la cual no todas las transiciones electrónicas son posibles en un átomo?

5. ¿Cuáles son las diferencias entre el número cuántico de spin y los números cuánticos principal, orbital y magnético?
6. ¿En qué se diferencia el número cuántico j de los números cuánticos n, ℓ, m_ℓ ?
7. La división de líneas espectrales en varias componentes se debe, entre otros, al efecto Zeeman y a la interacción spin-órbita. ¿Qué causa la aparición de estos fenómenos? ¿Es la misma en ambos casos?
8. Para un átomo en su estado base no se observa estructura fina en su espectro. ¿Por qué?
9. ¿Qué se entiende por multiplicidad de estados en un átomo?
10. Cuando en un átomo de varios electrones el momento angular de spin es cero, ¿cuáles son los posibles valores del número cuántico de momento angular total?

Problemas

1. Exprese los operadores \hat{L}_x y \hat{L}_y en coordenadas esféricas.

Ayuda:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} = \frac{\partial x}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial z} \quad \alpha = \begin{cases} \theta \\ \phi \end{cases}$$

Obtendrá dos ecuaciones entre las cuales puede eliminar sucesivamente d/dx y d/dy para llegar al resultado pedido.

2. A partir de las ecuaciones para los operadores de momento angular orbital en coordenadas esféricas (ecuación (10.5)) obtenga la expresión para \hat{L}^2 . Recuerde que debe respetar el orden de los productos.
3. Demuestre que las funciones armónicas esféricas:

$$Y_{2,0} = A(3\cos^2 \theta - 1) \quad Y_{2,1} = B \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$$

son funciones propias de los operadores \hat{L}_z y \hat{L}^2 .

4. Utilizando las ecuaciones del ejemplo 1, demuestre que:

$$\hat{L}_z \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{L}_z = 0$$

5. Encuentre la corriente equivalente al movimiento del electrón en las dos primeras órbitas de Bohr y calcule el momento de dipolo magnético orbital del electrón en cada caso. R/: $1.05 \times 10^{-3} A$; $1.31 \times 10^{-4} A$; $9.26 \times 10^{-24} A - m^2$; $1.55 \times 10^{-23} A - m^2$.
6. El valor de e/m_e se puede hallar experimentalmente observando el efecto Zeeman. Calcule este valor si la separación entre líneas espectrales en presencia de un campo magnético de $0.45 Wb/m^2$ es de $0.629 \times 10^{10} s^{-1}$. R/: $1.755 \times 10^{11} C/Kg$.
7. Dibuje los niveles de energía para los estados $4f$ y $3d$ del hidrógeno en presencia de campo magnético y muestre que en la transición $4f \rightarrow 3d$ el número de líneas espectrales es tres.
8. Usando la ley del coseno, muestre que el ángulo θ formado por los vectores \vec{L} y \vec{S} está dado por la expresión:

$$\cos \theta = \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)}{2[s(s+1)]^{1/2} [\ell(\ell+1)]^{1/2}}$$

9. (a) Muestre que la diferencia de energía entre los niveles energéticos debidos a la interacción spin-órbita es:
- $$\Delta E_{LS} = E_{LS}(\uparrow) - E_{LS}(\downarrow) = \frac{b \hbar^2 (2\ell + 1)}{2}$$
- (b) Reemplazando b por su expresión calcule ΔE_{ls} para los estados con $n = 100$, $\ell = 1$ y $n = 2$, $\ell = 1$. ¿Qué concluye de sus resultados? $\alpha^2 = 5.328 \times 10^{-5} = (1/137)^2$
10. Encuentre los valores L , S y J que corresponden a los siguientes estados y diga cuáles tienen $J = L + S$ y cuáles $J = L - S$

$$^1S_0 \quad ^2S_{1/2} \quad ^3P_2 \quad ^2D_{3/2} \quad ^4P_{5/2} \quad ^5F_5 \quad ^6H_{5/2}$$

Capítulo 11

Elementos de la física nuclear

Hasta el momento hemos considerado el núcleo del átomo como una partícula muy pequeña, de carga eléctrica positiva, en la cual se halla concentrada casi toda la masa del átomo.

Las propiedades principales (excepto la masa) de los átomos, moléculas y la materia en general, se deben a los electrones y no al comportamiento del núcleo. Pero éste en sí también es muy importante: varios de los fenómenos naturales que se descubrieron a finales del siglo 19 y durante los primeros 40 años del siglo XX se deben a procesos que ocurren en el interior del núcleo.

La explicación, estudio y consecuencias de estas propiedades es el problema central de la física nuclear.

11.1 Conceptos básicos

11.1.1 Componentes del núcleo

En este numeral comenzaremos por ver algunos conceptos y definiciones de la física nuclear, que nos proporcionarán el vocabulario y la herramienta necesarios para entender los desarrollos posteriores.

Como se vió al estudiar los modelos atómicos, el átomo se compone de un núcleo con carga positiva y electrones en movimiento alrededor de él. Siendo el átomo eléctricamente neutro, el número de cargas positivas en el núcleo es igual al número de electrones presentes en el átomo, cantidad que se denomina *número atómico*, Z . La partícula de carga positiva que forma el núcleo del átomo de hidrógeno se llamó *protón* y se supuso que los núcleos de los demás elementos químicos estaban constituidos por protones. El tercer elemento de la tabla tiene tres

protones, y así sucesivamente. En general la carga del núcleo es igual a $+Ze$ donde e es la carga del electrón y Z es el número atómico.

La confirmación experimental de la presencia de protones en el núcleo fue realizada por E. Rutherford en 1919, cuando por primera vez logró transformar un núcleo de nitrógeno en un núcleo de oxígeno (proceso llamado transmutación, largamente buscado por los antiguos alquimistas). Para ello bombardeó nitrógeno con partículas α . En el momento de la explosión del núcleo de nitrógeno se emite un protón (figura 11.1).

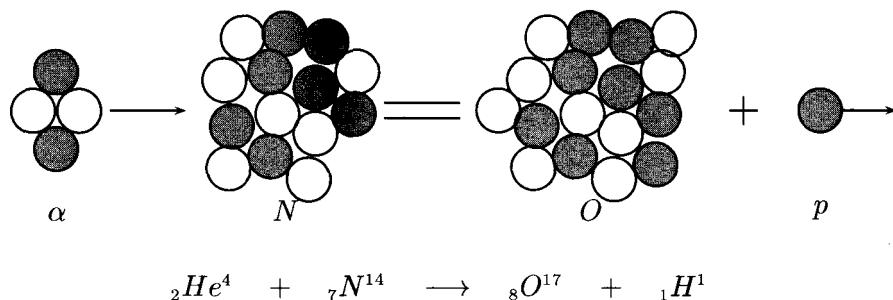


FIGURA 11.1. Esquema y ecuación de la transmutación de nitrógeno en oxígeno.

Al determinar las masas de los núcleos conocidos se presentó un problema. A medida que aumenta el número atómico la masa nuclear no es precisamente la masa correspondiente a Z protones, sino mayor. Por ejemplo la masa del núcleo de helio, que tiene dos protones, es cuatro veces mayor que la de un solo protón. Entonces se supuso que debía existir otra partícula sin carga eléctrica y con la misma masa del protón, lo cual solucionaba el problema de las masas nucleares siempre y cuando se pudiera comprobar su existencia por medio de algún experimento. En 1920 Rutherford realizó los primeros experimentos encaminados a descubrir la nueva partícula, pero sus resultados fueron negativos y los trabajos se suspendieron.

En 1930 W. Bothe y H. Becker observaron que al bombardear berilio con partículas α la reacción producía una radiación muy penetrante, que inicialmente se pensó eran fotones de alta energía (rayos γ). Al año siguiente F. Joliot e I. Curie observaron el mismo efecto y demostraron que la radiación podía ser detectada por su acción sobre substancias hidrogenadas, de las cuales expulsaba protones con grandes energías. En el mismo año (1931) J. Chadwick demostró que cuando la radiación incidía sobre substancias como helio, berilio y carbono se producía la

emisión de átomos que tenían grandes velocidades, resultado imposible de explicar si la radiación en cuestión eran rayos γ . Finalmente en 1932 el mismo Chadwick encontró la respuesta: los resultados anteriores sólo son explicables si la radiación estaba formada por partículas de masa parecida a la del protón y sin carga eléctrica. Esta partícula se identificó con la que buscaba Rutherford en 1920 y se le dio el nombre de *neutrón*. Su masa es un poco mayor que la del protón:

$$m_p = 1.6725 \times 10^{-24} \text{ g} \quad m_n = 1.6748 \times 10^{-24} \text{ g}$$

Con la demostración experimental de la existencia del neutrón y que éste forma parte del núcleo, se solucionó el problema de las masas nucleares. El número de neutrones en un núcleo se designa con la letra N . En la figura 11.2 se muestra el esquema y la reacción del proceso mediante el cual se puede obtener un neutrón.

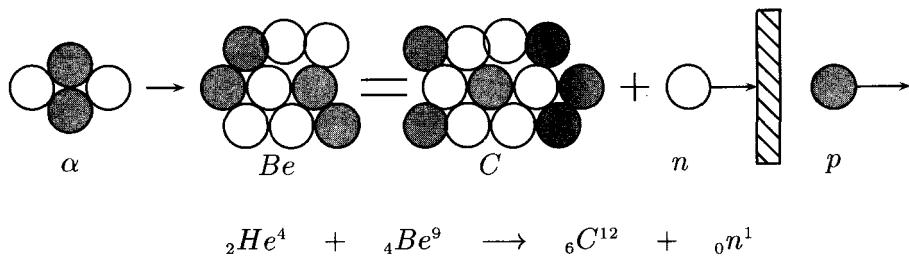


FIGURA 11.2. Esquema y reacción de la obtención de un neutrón.

Tanto a los neutrones como a los protones se les ha dado el nombre genérico de *nucleones*, indicando que son los constituyentes del núcleo. Un núcleo se designa mediante el símbolo:

$${}_Z^A X \quad (11.1)$$

donde X es el símbolo químico del elemento, Z su número atómico (número de protones o electrones presentes en el átomo) y $A = Z + N$ su *número de masa* que es el número entero más cercano a la masa atómica del elemento.

Lo anterior se encuentra esquematizado con algunos ejemplos en la tabla 11.1.

En cuanto a la forma del núcleo, suponemos que es esférica y resultados experimentales han mostrado que el radio nuclear es directamente

proporcional a la raíz cúbica de su número de masa correspondiente:

$$R = R_0 A^{1/3} \quad (11.2)$$

donde R_0 es igual a $1.2 \times 10^{-15} \text{ m}$ para todos los núcleos de los elementos con A mayor que 10.

TABLA 11.1. Ejemplo de algunos núcleos.

Núcleo	$z X^A$	Diagrama del átomo	Electrones	Neutrones	Protones
Hidrógeno	$_1 H^1$		•	ninguno	•
Deuterio	$_1 H^2$		•	○	•
Tritio	$_1 H^3$		•	○ ○	•
Helio	$_2 He^4$		• •	○ ○	• •

11.1.2 Unidad de masa atómica

Las masas involucradas en la física nuclear son muy pequeñas y el gramo no es una unidad de masa conveniente en este caso. En su lugar se usa la llamada *unidad de masa atómica, uma*, que es igual a un doceavo de la masa del átomo de carbono 12, unidad que incluye los electrones del átomo. Esto es¹:

$$1 \text{ uma} = \frac{1}{2} (\text{masa del átomo } {}_6 C^{12})$$

En términos de gramos el valor de una *uma* es:

$$1 \text{ uma} = 1.6604 \times 10^{-24} \text{ g} \quad (11.3)$$

De acuerdo con la relación de equivalencia masa-energía, $E = m c^2$, la energía correspondiente a una unidad de masa atómica es:

$$1 \text{ uma} = 931.4 \frac{\text{MeV}}{c^2} \quad (11.4)$$

¹ También se acostumbra a usar el O^{16} para determinar la unidad de masa atómica, de ahí la necesidad de definir con exactitud la unidad de masa con la cual se va a trabajar.

Otra cantidad que usaremos con frecuencia en este capítulo es el número de Avogadro, N_A , que es el número de átomos (o moléculas) que hay en M gramos de cualquier sustancia de masa atómica (o molecular) M expresada en gramos:

$$N_A = \frac{M \text{ g}}{M_{\text{atómica}} (\text{g})} = \frac{M \text{ g}}{M \times 1.6604 \times 10^{-24} \text{ g}}$$

$$= 6.0226 \times 10^{23} \text{ átomos(o moléculas)}$$

Así, el número de átomos N que hay en una cantidad W gramos de una substancia de masa atómica M será:

$$N = \frac{W N_A}{M} \text{ átomos} \quad (11.5)$$

11.1.3 Fuerza nuclear y energía de enlace

Al considerar las partículas que componen el núcleo atómico, se observan dos hechos:

- a) Las partículas tienen prácticamente la misma masa y
- b) Tienen cargas positivas o neutras.

El segundo punto nos indica que no podemos atribuir la estabilidad del núcleo a fuerzas electrostáticas. Más bien parecería que las fuerzas de repulsión eléctrica entre los protones harían que el núcleo se desintegrase. Puesto que esto no ocurre, debe existir una fuerza de atracción diferente a la fuerza eléctrica que mantiene unidos los protones y los neutrones.

Esta fuerza de atracción se denomina *fuerza nuclear*. Es muy fuerte y de corto alcance, lo cual significa que sólo se puede apreciar cuando las partículas interactantes están muy cerca unas de otras. Para los núcleos esta distancia es del orden de 10^{-15} m o menos. A distancias mayores es despreciable como lo confirma la interacción electromagnética que gobierna la dispersión de nucleones y la agrupación de átomos en moléculas. Además, se ha observado que la fuerza nuclear actúa solamente entre protones y neutrones: esto es, sólo nucleones.

En forma análoga al átomo, el núcleo también tiene momento angular, momento de dipolo magnético, spin y estados energéticos entre los cuales pueden ocurrir transiciones y presenta una fuerte interacción spin-órbita.

Cuando se quieren separar los componentes de un núcleo, por ejemplo sacar un protón o un neutrón, es necesario suministrarle cierta cantidad de energía llamada *energía de enlace* o *ligadura*. Al unir los componentes de un núcleo se libera la misma cantidad de energía.

Podemos obtener una idea de la magnitud de las interacciones nucleares calculando la energía de enlace de un núcleo de deuterio (${}_1H^2$). Este núcleo está formado por un protón y un neutrón y su masa es de $2.014102\text{ }uma$. La suma de las masas individuales es mayor que la masa del núcleo formado por ellas en la cantidad:

$$\Delta m = m_p + m_n - m_{\text{deuterio}} = 0.002388\text{ }uma$$

que de acuerdo con el principio de equivalencia masa-energía corresponde a una energía:

$$E = 931.4 \times 0.002388 = 2.224\text{ }MeV$$

Pero esta energía es la que se necesita para separar el protón o el neutrón del núcleo de deuterio, como también la que se libera cuando se juntan el protón y el neutrón para formar dicho núcleo, ya que la energía total del sistema se conserva.

Comparando la energía anterior con la energía necesaria para liberar al electrón del átomo de hidrógeno ($13.6\text{ }eV$), podemos concluir que la interacción nuclear es del orden de 10^6 veces más fuerte que la interacción electromagnética.

En general, para un núcleo de masa M_{nuc} formado por A nucleones de los cuales Z son protones y N son neutrones, la energía de enlace es:

$$E_{en} = (Z m_p + N m_n - M_{\text{nuc}})c^2 \quad (11.6)$$

donde m_p y m_n son las masas del protón y del neutrón respectivamente. La masa del núcleo se obtiene a partir de la masa del átomo restándole la masa de los electrones que tenga; esto es: $M_{\text{nuc}} = M - Z m_e$. Entonces la ecuación anterior también se puede escribir como:

$$E_{en} = [Z(m_p + m_e) + N m_n - M]c^2$$

Pero $m_p + m_e$ es la masa del átomo de hidrógeno (${}_1H^1$); entonces:

$$\begin{aligned} E_{en} &= (Z m_H + N m_n - M)c^2 \\ &= 931.4(Z m_H + N m_n - M)MeV \end{aligned} \quad (11.7)$$

En la segunda ecuación todas las masas deben expresarse en uma .

La energía de enlace por nucleón, E_{en}/A , es una buena indicación de la estabilidad de un núcleo, ya que cuanto mayor sea, más difícil será de separar un neutrón o un protón de él.

En la figura 11.3 se muestra cómo varía la energía de enlace por nucleón en función del número de masa. Como se puede ver, es máxima

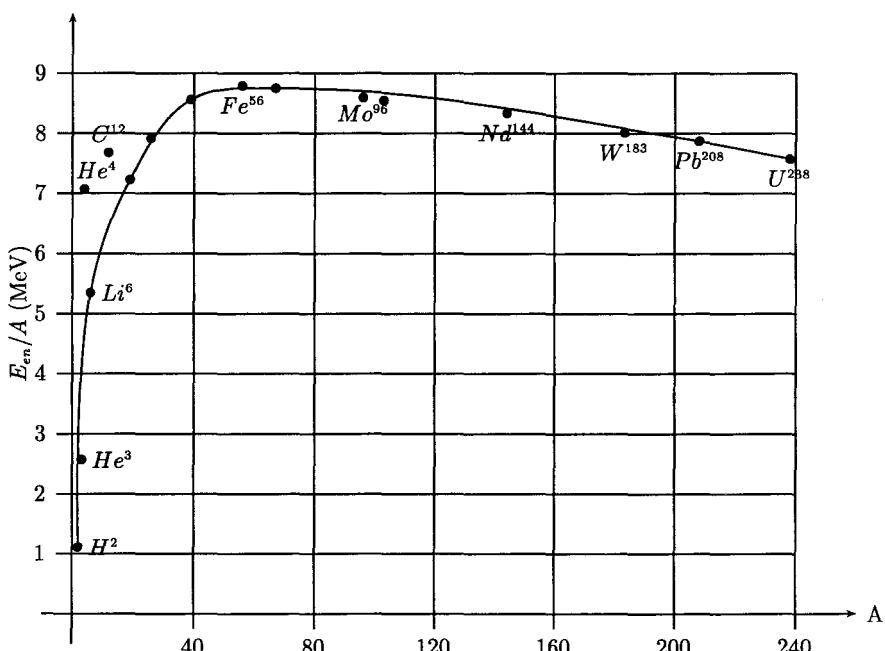


FIGURA 11.3. Curva de energía de enlace por nucleón en función del número de masa.

para núcleos cuyo número de masa se encuentra entre 50 y 60, siendo el más estable el del hierro 56 ($^{56}Fe^{56}$).

También nos muestra que cuando dos núcleos livianos se unen para formar uno más pesado, o uno pesado se divide en dos más livianos, aumenta la energía de enlace del producto final y por consiguiente se libera energía.

Más adelante hablaremos nuevamente de la energía liberada en un proceso nuclear y su relación con la energía de enlace.

Es de notar que en el mundo nuclear la equivalencia masa-energía postulada por Einstein juega un papel fundamental. A su vez estos procesos son una confirmación de su veracidad.

Ejemplo 11.1.

Cuando un neutrón lento (de poca energía) incide sobre un núcleo de uranio 235 ($^{92}U^{235}$) este se divide en dos núcleos y alguna partículas, entre ellas neutrones. Existen varias reacciones típicas para este proceso y en una de ellas el núcleo de uranio se divide en un núcleo de cerio ($^{58}Ce^{140}$), un núcleo de circonio ($^{40}Zr^{94}$), seis partículas β^- (electrones de alta energía) y dos neutrones. Las masas de las partículas que

intervienen en este proceso (llamado *fisión nuclear*) son las siguientes:

$$U = 235.0439 \text{ uma} \quad Ce = 139.9054 \text{ uma} \quad Zr = 93.9036 \text{ uma}$$

$$n = 1.0087 \text{ uma} \quad e = 0.0033 \text{ uma}$$

Las masas inicial y final del proceso son:

$$M_i = U + n = 236.0526 \text{ uma}$$

$$M_f = Zr + Ce + 6e + 2n = 235.8296 \text{ uma}$$

Nuevamente la masa final es menor que la masa inicial y por consiguiente también lo es la energía; es decir, en el proceso se liberó energía que para el caso considerado es del orden de 207 MeV.

La energía de enlace por nucleón para los núcleos uranio, circonio y cerio son respectivamente 7.6, 8.69, y 8.38 MeV, siendo mayor para los núcleos producto como los muestra la gráfica de la figura 11.3 □

11.2 Radiactividad natural

La emisión de partículas o radiación electromagnética de alta frecuencia por un núcleo en forma espontánea se denomina *radiactividad* y el núcleo correspondiente es un *núcleo radiactivo*.

11.2.1 Descubrimiento de la radiactividad natural

En 1896 A. Bequerel descubrió en forma accidental la radiactividad natural. Había dejado una sal de uranio sobre una placa fotográfica que una vez revelada mostró claramente la imagen de los cristales de la sal. Esto indicó que la sal de uranio emitía naturalmente cierta radiación.

Después de este descubrimiento algunos físicos se dedicaron a estudiar las sales de uranio siendo los más célebres los esposos Pierre y Marie Curie, quienes pronto notaron que minerales que contenían sales de uranio eran más radiactivos que la sal pura. En 1898 tratando una gran cantidad de plechbenda (mineral de uranio) encontraron dos nuevos elementos radiactivos: el polonio (*Po*) y el radio (*Ra*), ambos con un poder radiante superior al del uranio.

Luego se descubrió el torio (*Th*), el radón (*Rn*) y el actinio (*Ac*) así como los elementos llamados *productos*, en los cuales se transforman los anteriores.

Estos elementos se clasificaron en tres familias o series radiactivas: la del uranio, la del torio y la del actinio. Existe una cuarta serie radiactiva, la del neptunio (*Np*), que se obtiene en el laboratorio artificialmente, debido a que este elemento ya no se encuentra en su forma natural.

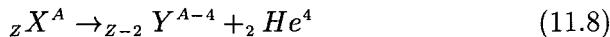
En la naturaleza se encuentran catorce elementos radiactivos de los cuales once se transforman en un elemento estable (no emite radiación) y los tres restantes dan origen a las series radiactivas mencionadas, de las cuales volveremos a hablar más adelante.

11.2.2 Isótopos y estabilidad isotópica

Al comienzo del siglo XX cuando se desarrollaron los métodos para la determinación de las masas atómicas se descubrió que no todos los átomos de un mismo elemento tienen la misma masa. Las diferentes variedades del mismo elemento reciben el nombre de *isótopos* lo que significa que ocupan el mismo lugar en la tabla periódica, tienen propiedades químicas idénticas pero son físicamente diferentes. Esto es, tienen igual Z y diferente A .

Un isótopo naturalmente radiactivo emite una partícula α o una partícula β^- . Algunas veces puede emitir al mismo tiempo rayos γ^2 .

Cuando un núcleo atómico emite una partícula α , el átomo se transforma en otro debido a que su masa atómica disminuye en cuatro unidades y su número atómico en dos. El esquema de la desintegración es el siguiente:



Por ejemplo, el radio (*Ra*) con número atómico $Z = 88$ y número de masa $A = 226$, conocido emisor de partículas α , se transforma en radón (*Rn*) con número atómico $Z = 86$ y número de masa $A = 222$. La transformación nuclear es evidente porque el radio, que es un sólido, se encuentra en el mismo grupo químico del bario, mientras que el radón es uno de los gases nobles. En este caso es fácil separar el producto de su antecesor inmediato en el sentido de que son dos elementos completamente diferentes.

Cuando hay emisión de partículas β^- , el número atómico del nuevo elemento es $Z + 1$ y su masa nuclear permanece igual, porque la masa de un electrón es despreciable comparada con la masa del núcleo. Cuando las masas de dos elementos son las mismas los núcleos se denominan *isóbaros*. El esquema de la desintegración es el siguiente:



No todos los isótopos son radiactivos y algunos elementos no radiactivos poseen isótopos que si lo son. Por ejemplo, el cloro (*Cl*), tiene nueve isótopos de los cuales dos son estables y existen en la naturaleza y los

²Partícula α : núcleo de helio; $Z = 2$ y $A = 4$, partícula β^- : electrón de gran energía; $Z = 1$ y $A = 0$, partícula γ o también rayo γ : fotón de alta frecuencia.

siete restantes son radiactivos. Los isótopos estables del cloro son los de número de masa 35 y 37.

El hidrógeno tiene tres isótopos de número con masa 1, 2 y 3. Los dos últimos se llaman deuterio y tritio. El tritio es un elemento radiactivo que ya no se encuentra en la naturaleza.

La mayoría de los elementos naturales son una mezcla de isótopos, algunos de los cuales son radiactivos.

También existen núcleos que tienen igual número de neutrones pero diferente número atómico y por lo tanto diferente número de masa. Se les denomina *isótonos* y necesariamente pertenecen a elementos diferentes.

Ejemplo 11.2.

Consideremos la desintegración del uranio 238 en torio 230. El esquema de la desintegración es el siguiente:



El uranio 238 y el uranio 234 (ambos con $Z = 92$) serán idénticos en sus propiedades químicas. Su mezcla constituye un solo elemento y es imposible separarlos por métodos químicos. Entonces son isótopos del elemento uranio.

El torio 234 y el torio 230 también son isótopos del elemento torio. Además, en la naturaleza se encuentra el torio con $A = 232$ y $Z = 90$; así éste también es un isótopo del mismo elemento torio. \square

Como se vió, no todas las combinaciones de protones y neutrones forman núcleos estables. En general, los núcleos livianos ($A < 20$) tienen aproximadamente el mismo número de protones que de neutrones ($Z = N$), mientras que los núcleos pesados presentan más neutrones que protones. En el primer caso la experiencia muestra que tales núcleos son estables.

En forma análoga a los átomos, los núcleos tienden a estar en un estado de mínima energía. Esto es, tener una máxima energía de enlace. Pero la repulsión electrostática entre protones se va haciendo cada vez más grande a medida que el número de éstos aumenta y así se necesita un exceso de neutrones para que se produzca la fuerza nuclear suficiente para mantener unidas las partículas.

Por ésto los núcleos con $Z > 20$, se van alejando de la recta $Z = N$ y van siendo cada vez menos estables a medida que Z crece (figura 11.4).

Debido a que la repulsión coulombiana entre protones es apreciable en todo el núcleo, existe un límite para el cual los neutrones ya no pueden hacer que sea estable. Este límite se presenta para el bismuto ($Z = 83$, $A = 209$), que es el isótopo estable más pesado. *Todos los núcleos con $Z > 83$ y $A > 209$ son inestables o radiactivos.*

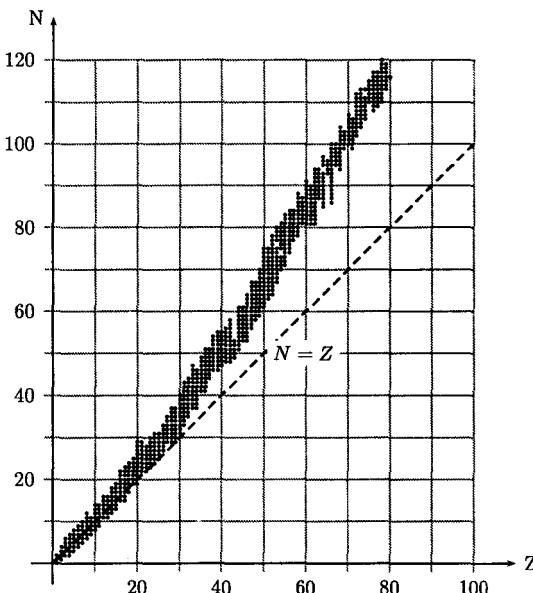


FIGURA 11.4. Gráfica de N en función de Z para los núcleos. La gráfica se aleja de la recta $Z = N$ para $Z > 20$.

Además de lo expuesto, influyen otros factores como la paridad de los números atómico y de neutrones (Z y N).

Por ejemplo, un núcleo con Z y N par o impar es generalmente estable; y los núcleos con Z ó N iguales a 2, 8, 20, 28, 50, 82 y 126 son excepcionalmente estables, como también lo son los llamados gases nobles: helio (${}_2He^4$), neón (${}_{10}Ne^{20}$), argón (${}_{18}Ar^{36}$), kriptón (${}_{36}Kr^{84}$) y xenón (${}_{54}Xe^{132}$). Estas reglas y otras que existen para determinar la estabilidad de un núcleo son empíricas; todas se obtuvieron a partir de resultados experimentales.

En la tabla 11.2 se encuentra la distribución de los isótopos estables de acuerdo con la paridad de sus nucleones.

TABLA 11.2. Distribución de los isótopos estables de acuerdo con la paridad de Z , N y A .

A	par	par	impar	impar
Z	par	impar	par	impar
N	par	impar	impar	par
casos	166	8	53	57

11.2.3 Determinación de la masa isotópica y abundancia

Como ya se dijo, el método químico no es adecuado para determinar la masa de isótopos. Por tanto se debe hacer a partir de métodos físicos.

Para ello se ideó un instrumento denominado *espectrógrafo de masa*, que como su nombre lo indica, proporciona un espectro de líneas en el cual cada una corresponde a una masa dada. El primero fue diseñado por F. Aston en 1919 y permitió determinar masas isotópicas con una precisión de 1/1000. En la figura 11.5 se encuentra un esquema de este instrumento.

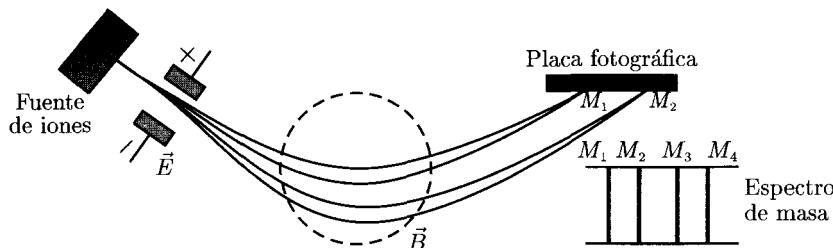


FIGURA 11.5. Esquema del espectrógrafo de masa de Aston y de un espectro de masa.

Una fuente emite iones positivos de un elemento determinado, los cuales son separados de acuerdo con sus velocidades mediante un campo eléctrico³. Luego, el haz dispersado atraviesa un campo magnético donde los iones son nuevamente deflectados en una cantidad inversamente proporcional a su velocidad describiendo una trayectoria curva. Esto hace que todos los iones con igual q/m lleguen al mismo punto de observación, generalmente una placa fotográfica. Al revelar la placa fotográfica en los sitios donde incidieron los iones aparecen líneas. Con este instrumento Aston encontró los dos isótopos del neón y los dos isótopos no radiactivos del cloro.

Además de la masa isotópica es importante conocer la proporción relativa en que se encuentra este en un elemento. Esto es, su *abundancia relativa*. Para ello se utiliza un instrumento denominado *espectrómetro de masa* (figura 11.6), diseñado por A. J. Dempster casi al mismo tiempo que el espectrógrafo de masa de Aston. Este instrumento no puede medir con precisión masas isotópicas. Su nombre se debe a que mide corrientes iónicas en lugar de obtener registros en placas fotográficas.

En forma esquemática, el instrumento funciona de la siguiente manera: una vez que los iones emitidos por la fuente apropiada son acelerados

³ Consulte en cualquier libro de física general los efectos de campos electromagnéticos sobre cargas en movimiento.

por una diferencia de potencial, entran a un campo magnético que hace que describan una trayectoria circular definida por la relación:

$$\frac{m v^2}{r} = q v B \quad (11.10)$$

donde r es el radio de la trayectoria⁴, m la masa del ion, q su carga, v su velocidad y B el campo magnético.

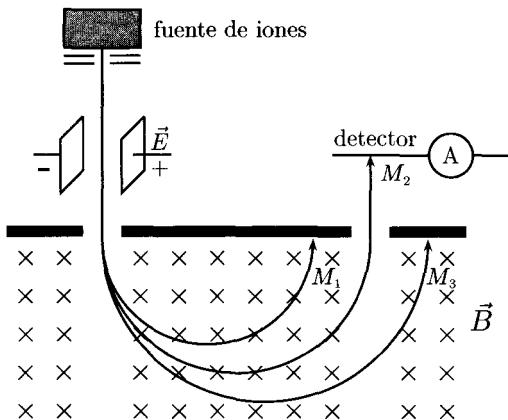


FIGURA 11.6. Espectrómetro de masa de Dempster.

Como el radio del círculo debe tener un valor determinado para que un ión dado llegue al detector, sólo los que tengan la relación q/m adecuada lo harán y podrán ser medidos.

Los iones con otras masas llegarán al detector cuando sean acelerados por una diferencia de potencial adecuada. La corriente resultante es proporcional al número de iones positivos que llegan al detector por unidad de tiempo y como cada potencial acelerador es proporcional a una masa ($K = mv^2/2 = qV$) se puede graficar la corriente en función de la masa de los iones.

Con el tiempo los espectrómetros de masa se han modificado de tal forma que hoy día los hay especialmente diseñados para buscar isótopos raros y medir simultáneamente sus masas y abundancia con gran precisión.

⁴La ecuación (11.10) representa, simplemente, la trayectoria circular de una partícula cargada en una región con un campo magnético perpendicular al vector \vec{v} .

Ejemplo 11.3.

En un espectrómetro de masa se acelera un ión de carga e a través de una diferencia de potencial de 1000 V . Luego el ión atraviesa una región donde el campo magnético tiene una intensidad de 0.1 Wb/m^2 describiendo una trayectoria circular de radio igual a 25.75 cm . ¿Cuál es la masa de este ión y su número de masa?

Al ser acelerado por una diferencia de potencial V , el ion adquiere una energía cinética igual a:

$$K = \frac{1}{2} m v^2 = q V$$

y describe una trayectoria circular determinada por la relación:

$$\frac{m v^2}{r} = q v B$$

Combinando las dos expresiones anteriores, se obtiene para la masa:

$$m = \frac{q(B r)^2}{2V}$$

Reemplazando datos y efectuando operaciones, el resultado es:

$$m = 5.3045 \times 10^{-25} \text{ g} = 31.9471 \text{ uma}$$

Como el número de masa es el número entero más cercano a la masa atómica del elemento, entonces el número de masa de este ion es 32 y corresponde a un ion de azufre. \square

Sería muy útil tener una fórmula matemática que permitiera calcular teóricamente la masa de los isótopos pero la física no ha progresado todavía lo suficiente en este campo para obtenerla. Sin embargo en 1935 Von Weizsäcker encontró una relación semiempírica para calcular masas, teniendo en cuenta una serie de efectos que tienen lugar dentro de los núcleos.

La masa de un isótopo es igual a la suma de las masas de los nucleones que lo componen menos una cantidad de masa correspondiente a la energía que se libera al unir las partículas (ecuación (11.7)):

$$\begin{aligned} M(Z, A) &= Z m_H + (A - Z) m_n - \frac{E_{en}}{c^2} \\ &= Z(m_H - m_n) + A m_n - \Delta m \end{aligned} \tag{11.11}$$

donde Δm incluye ciertos efectos que tienen lugar dentro del núcleo y su expresión es la siguiente:

$$\Delta m = a A - b A^{2/3} - c Z^2 A^{-1/3} - d \left(Z - \frac{1}{2} A \right)^2 A^{-1} - F(A) \quad (11.12)$$

donde cada uno de los términos corresponde a los siguientes efectos:

$a A$: efecto de volumen. Expresa el hecho de que la energía de enlace es proporcional al volumen del núcleo o al número total de nucleones, ya que es la misma para cada partícula.

$b A^{2/3}$: efecto de superficie. La superficie del núcleo presenta una tensión superficial (similar a lo que ocurre en una gota de líquido) y la energía en la superficie es proporcional al área de la misma.

$c Z^2 A^{-1/3}$: efecto debido a la repulsión electrostática entre protones, que es igual a la energía potencial de Z protones agrupados en un volumen esférico de radio $R = R_0 A^{1/3}$.

$d \left(Z - \frac{1}{2} A \right)^2 A^{-1}$: efecto debido a la falta de simetría entre el número de protones y neutrones.

$F(A)$: efecto debido a la paridad del número de protones, neutrones y número de masa.

Las constantes a , b , c , d y una que aparece en el término $F(A)$ se determinan combinando la teoría y resultados experimentales. Sus valores difieren según las aproximaciones que se hayan hecho para calcularlas. Con los siguientes valores para las constantes:

$$a = 16.9 \times 10^{-3} \text{ uma} \quad b = 19.11 \times 10^{-3} \text{ uma} \quad c = 0.762 \times 10^{-3} \text{ uma} \\ d = 101.6 \times 10^{-3} \text{ uma} \quad e = 41.8 \times 10^{-3} \text{ uma}$$

la ecuación (11.11) toma la forma:

$$M(Z, A) = [991.75 A - 0.84 Z + 19.11 A^{2/3} + 0.762 Z^2 A^{-1/3} \\ + 101.6 \left(Z - \frac{1}{2} A \right)^2 A^{-1} + F(A)] \times 10^{-3} \text{ uma} \quad (11.13)$$

donde:

$$F(A) = \begin{cases} -41.8 A^{-3/4} & \text{para } Z \text{ y } N \text{ pares} \\ 0 & \text{para } A \text{ impar} \\ +41.8 A^{-3/4} & \text{para } Z \text{ y } N \text{ impares} \end{cases}$$

TABLA 11.3. Masas isotópicas calculadas mediante la ecuación (11.13) y sus correspondientes masas medidas.

Elemento	Número atómico	Número masa	Masa calculada	Masa medida
Carbono	6	12	12.0017	12.0000
Nitrógeno	7	14	14.0110	14.0030
Sodio	11	23	22.9893	22.9897
Hierro	26	56	55.9363	55.9393
Molibdeno	42	98	97.9044	97.9054
Plata	47	107	106.9042	106.9045

Esta fórmula reproduce bastante bien los valores de las masas isotópicas para $A > 10$ como se puede observar en la tabla 11.3. Además, también puede explicar las reglas empíricas de la estabilidad nuclear.

En general un átomo, o mejor su núcleo, será estable si su masa $M(Z, A)$ es menor o igual a la suma de las masas de sus nucleones. Si es mayor emitirá una de las partículas que lo constituye para reducir su masa. Este criterio para determinar la estabilidad nuclear y otros que se obtienen de la ecuación de masa (que están fuera del alcance del curso), permiten predecir con cierta exactitud cuándo un núcleo es estable o no. Puede haber emisión de:

$$\text{un protón si: } M(Z, A) > M(Z - 1, A - 1) + m_p$$

$$\text{un neutrón si: } M(Z, A) > M(Z, A - 1) + m_n$$

$$\text{una partícula } \alpha \text{ si: } M(Z, A) > M(Z - 2, A - 4) + m_\alpha$$

$$\text{una partícula } \beta^- \text{ si: } M(Z, A) > M(Z + 1, A) + m_e$$

Ejemplo 11.4.

Encontrar el número atómico del núcleo más estable para un número de masa dado.

Cuando el núcleo es estable, su energía de enlace es máxima. Por consiguiente el máximo valor de Z para un A dado estará determinado por la condición:

$$\left. \frac{dE_{en}}{dZ} \right|_{Z=z_{\max}} = \left. \frac{d(\Delta mc^2)}{dZ} \right|_{Z=z_{\max}} = 0$$

donde:

$$\Delta m = a A - b A^{2/3} - c Z^2 A^{-1/3} - d \left(Z - \frac{A}{2} \right)^2 A^{-1} - F(A)$$

Efectuando las operaciones, el resultado es:

$$Z_{\max} = \frac{d}{2 A^{-1} (d + c A^{2/3})} = \frac{A}{2} \left[\frac{1}{1 + (c/d) A^{2/3}} \right]$$

Pero $c/d = 7.5 \times 10^{-3}$, lo cual es pequeño comparado con la unidad. Entonces, para átomos livianos (A pequeño) la cantidad entre paréntesis se puede aproximar a la unidad y:

$$Z_{\max} = \frac{A}{2}$$

Por ejemplo, con $A = 10$: $(c/d)A^{2/3} = 0.03$ y $(1 + 0.03)^{-1} = 0.97$. Entonces:

$$Z_{\max} = \frac{10}{2} \times 0.97 = 4.85 = 5$$

ya que el número atómico es un número entero. □

11.2.4 Vida media y vida promedio

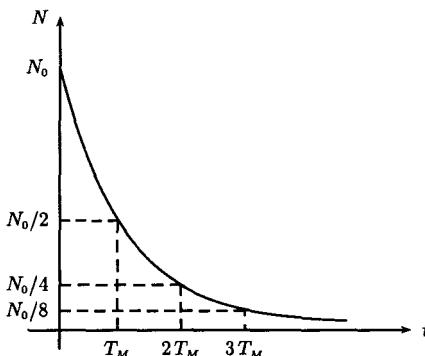


FIGURA 11.7. Comportamiento de la desintegración radiactiva en el tiempo

Se ha observado que todos los procesos radiactivos siguen una ley exponencial. Si N_0 es el número inicial de núcleos radiactivos presentes en una muestra, el número N de núcleos radiactivos *que quedan* después de un tiempo t está dada por la siguiente expresión:

$$N = N_0 e^{-\lambda t} \quad (11.14)$$

donde λ es una constante característica del elemento radiactivo denominada *constante de desintegración*. En la figura 11.7 se muestra la gráfica de N en función del tiempo.

Para cada elemento radiactivo existe un intervalo de tiempo denominado *período de semidesintegración* o *vida media*, T_m , durante el cual el número de núcleos presentes al comienzo del intervalo se reduce a la mitad. Si inicialmente había N_0 núcleos (N_0 átomos), después de un período quedarán $N_0/2$ núcleos; después de dos períodos quedarán $N_0/4$; y así sucesivamente. De la ecuación (11.14) se obtiene una expresión que permite calcular el período de desintegración. Cuando t es igual al período T_m , el número de núcleos radiactivos presentes en la muestra se ha reducido a la mitad ($N_0/2$). Reemplazando estos datos en la ecuación (11.14) y despejando T_m :

$$T_m = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0.693}{\lambda} \quad (11.15)$$

Los períodos de desintegración, o vida media, de los elementos radiactivos tienen un rango de valores muy grande que va desde millones de años, como en el caso del isótopo del vanadio V^{50} (4×10^{14} años), hasta valores del orden de fracciones de segundos como en el caso del isótopo del helio He^5 , que tiene un período del orden de 10^{-21} segundos.

La velocidad con la cual se desintegran los núcleos radiactivos se obtiene derivando la ecuación (11.14):

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N_0 e^{-\lambda t} = -\lambda N \quad (11.16)$$

y el valor absoluto $|dN/dt|$ se denomina *actividad*, a_c , de la substancia radiactiva.

La actividad se expresa en unidades llamadas *curie*, Ci , y se define como la cantidad de cualquier substancia radiactiva que decrece a razón de 3.7×10^{10} núcleos por segundo. Es aproximadamente igual a la actividad de un gramo de radio (Ra).

La vida real de un núcleo radiactivo puede ser cualquiera, desde cero hasta un valor infinito. No podemos predecir cuándo se va a desintegrar. Así, le asignamos un tiempo promedio de vida denominado *vida promedio* cuya expresión es:

$$t_p = \frac{1}{\lambda} \quad (11.17)$$

Comparando las ecuaciones (11.15) y (11.17), encontramos que la relación entre la vida media de un núcleo y su vida promedio es:

$$T_m = 0.693 t_p \quad (11.18)$$

Cuando una substancia radiactiva da lugar a una serie radiactiva, es decir, un núcleo se desintegra en otro que a su vez también se desintegra y así sucesivamente, podemos hallar el número de núcleos presentes en cualquier instante para cada uno de los elementos que se forman.

Consideremos el caso sencillo en que una substancia radiactiva A se desintegra en otra substancia radiactiva B que a su vez se desintegra en una tercera substancia C estable. Inicialmente en la muestra radiactiva sólo hay núcleos de la substancia A .

La velocidad a la cual se desintegra la substancia A es:

$$\frac{dN_A}{dt} = -\lambda_A N_A = -\lambda_A N_{0A} e^{-\lambda_A t} \quad (11.19)$$

donde λ_A es su constante de desintegración y N_{0A} el número de núcleos (o átomos) de A presentes inicialmente en la substancia. Al mismo tiempo se habrán formado $N_B = N_{0A} - N_A$ núcleos de la substancia B . Pero ésta, a medida que crece con una velocidad igual a $\lambda_A N_A$, decrece con una velocidad $\lambda_B N_B$ donde λ_B es su constante de desintegración. Por tanto, la velocidad real con la cual se desintegra la substancia B será la diferencia entre su velocidad de formación y su velocidad de desintegración:

$$\frac{dN_B}{dt} = \lambda_A N_A - \lambda_B N_B \quad (11.20)$$

y la velocidad de formación de la tercera substancia, que es estable, es:

$$\frac{dN_C}{dt} = \lambda_B N_B \quad (11.21)$$

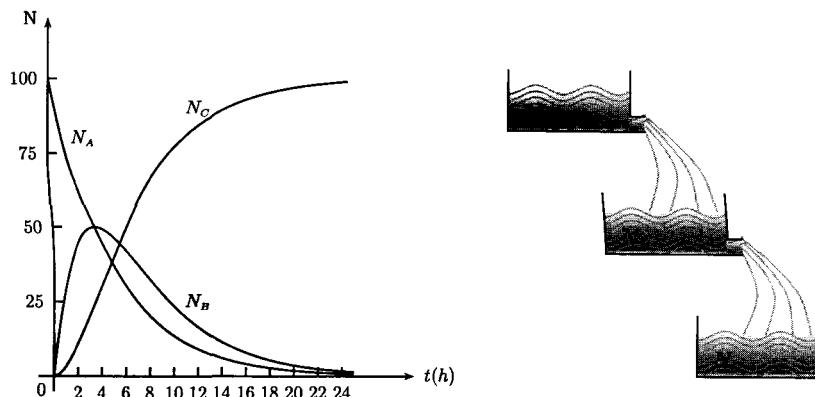
Para obtener el número de núcleos de cada substancia, presentes en un momento dado, debemos integrar las ecuaciones (11.19) a (11.21) teniendo en cuenta que N_{0B} y N_{0C} son nulos. El resultado es el siguiente:

$$N_A = N_{0A} e^{-\lambda_A t} \quad (11.22a)$$

$$N_B = N_{0A} \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A} (e^{-\lambda_A t} - e^{-\lambda_B t}) \quad (11.22b)$$

$$N_C = N_{0A} \left(1 + \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A} e^{-\lambda_B t} - \frac{\lambda_B}{\lambda_B - \lambda_A} e^{-\lambda_A t} \right) \quad (11.22c)$$

La substancia C aumentará continuamente hasta que después de un tiempo suficientemente largo, comparado con los períodos de las substancias A y B , el número de núcleos de C será igual al número de núcleos de A presentes inicialmente.



- a. Decaimiento de la substancia $A(T_m = 2h)$, creación y decaimiento de la substancia $B(T_m = 5h)$, y creación de la substancia estable C .
- b. Analogía hidrodinámica para el mismo caso.

FIGURA 11.8. Serie radiactiva de tres elementos.

En la figura 11.8 se puede observar cómo varía en el tiempo el número de núcleos de las tres substancias del ejemplo. Las gráficas se calcularon con $T_{m_A} = 2\text{ h}$ y $T_{m_B} = 5\text{ h}$. Además se muestra una analogía hidrodinámica en la cual el área de los orificios de salida de los tanques es proporcional a la constante de desintegración.

En general si la substancia radiactiva da origen a una serie de muchos elementos, las velocidades de desintegración están dadas por ecuaciones diferenciales similares a las ecuaciones (11.19) a (11.21). Sin embargo, mientras más ecuaciones diferenciales haya, más difícil es encontrar las soluciones.

Cuando un elemento de vida media larga se desintegra en otro elemento radiactivo de vida media corta, después de un tiempo suficientemente grande la relación entre las velocidades de desintegración de los dos elementos se hace constante. Este equilibrio se denomina *equilibrio secular o radiactivo*.

La ecuación que satisface esta condición se obtiene de las ecuaciones (11.22a) y (11.22b) para $\lambda_A \ll \lambda_B$. Para un tiempo grande, $e^{-\lambda_B t}$ es despreciable comparado con $e^{-\lambda_A t}$ y $\lambda_B - \lambda_A = \lambda_B$. Entonces:

$$N_B = \frac{\lambda_A}{\lambda_B} N_{0A} e^{-\lambda_A t} = \frac{\lambda_A}{\lambda_B} N_A = \frac{T m_B}{T m_A} N_A$$

de donde:

$$N_A T m_B = N_B T m_A \quad (11.23)$$

Esta ecuación es muy útil para calcular períodos que son muy grandes o muy pequeños de substancias radiactivas, cantidades imposibles de medir experimentalmente.

Por ejemplo, en el mineral de uranio, donde ya se ha establecido el equilibrio radiactivo, existe un átomo de radio 226 por cada 2.8×10^6 átomos de uranio 238. El período del radio se determinó experimentalmente y es de 1620 años, mientras que el del uranio 238 es muy grande y no es posible determinarlo. Entonces, con estos datos y la ecuación (11.23) es muy fácil obtener el período del uranio 238.

Ejemplo 11.5.

- a) ¿Cuántos átomos de Pa 233 (protactinio) se desintegran en un día si se tiene un millón de átomos?
- b) ¿Cuál es la masa de este elemento cuya actividad es igual a un Ci? El período del Pa 233 es de 27 días.

Solución

- a) El número de átomos desintegrados, N' , después de un tiempo t es igual al número inicial de átomos N_0 menos los que no se han desintegrado, N :

$$N' = N_0 - N = N_0(1 - e^{-\lambda t}) \quad \text{donde } \lambda = \frac{\ln 2}{Tm}$$

Efectuando las operaciones con los datos dados, el resultado es:

$$N' = 10^6(1 - e^{-\ln 2/27}) = 25345$$

- b) Sabemos que la actividad de una substancia radiactiva y el número de átomos presentes en cierta cantidad $W g$ de la misma están dados por las ecuaciones (11.16) y (11.5):

$$a_c = \lambda N = N \frac{\ln 2}{Tm} \quad N = W \frac{N_a}{M}$$

donde M es la masa atómica de la substancia y que para efectos de cálculos podemos hacer igual (numéricamente) a su número

de masa. Reemplazando N en la ecuación para la actividad y despejando W :

$$W = a_c A \frac{Tm}{N_a \ln 2}$$

La actividad de un Ci es igual a la desintegración de 3.7×10^{10} átomos por segundo: el período de Pa 233 es de 27 días = 2.33×10^6 s. Entonces:

$$W = \frac{3.7 \times 10^{10} \times 233 \times 2.33 \times 10^6}{6.02 \times 10^{23} \times \ln 2} = 4.8 \times 10^{-5} \text{ g}$$

□

11.2.5 Series radiactivas

Con lo explicado en los numerales anteriores ahora se puede entender los diagramas que representan las series radiactivas (figura 11.9).

Cada serie está formada por una sucesión de elementos radiactivos que proceden de un núcleo inicial y el producto final es estable.

Se encontró que el número de masa de cada miembro de las series se puede expresar mediante las fórmulas $4n$, $4n + 1$, $4n + 2$ y $4n + 3$ donde n es un número comprendido entre 51 y 59. Fue precisamente el hecho de que la serie con $4n + 1$ no se encontró en la naturaleza lo que llevó a descubrirla experimentalmente, correspondiendo a la serie del neptunio.

Las series radiactivas toman su nombre del elemento inicial o uno cercano a él, como es el caso de la serie del actinio. También se conocen como series $4n$, $4n + 1$, $4n + 2$ y $4n + 3$. En la tabla 11.4 se encuentran los períodos de los elementos iniciales así como el elemento estable final para cada serie.

TABLA 11.4. Períodos de semidesintegración de las series radiactivas y sus productos finales

Nombre	Serie	Núcleo inicial	Período (años)	Producto final estable
Torio	$4n$	$_{90}Th^{232}$	1.39×10^{10}	$_{82}Pb^{208}$
Neptunio	$4n + 1$	$_{93}Np^{237}$	2.20×10^6	$_{83}Bi^{209}$
Uranio	$4n + 2$	$_{92}U^{238}$	4.51×10^9	$_{82}Pb^{206}$
Actinio	$4n + 3$	$_{90}U^{232}$	7.10×10^{10}	$_{82}Pb^{207}$

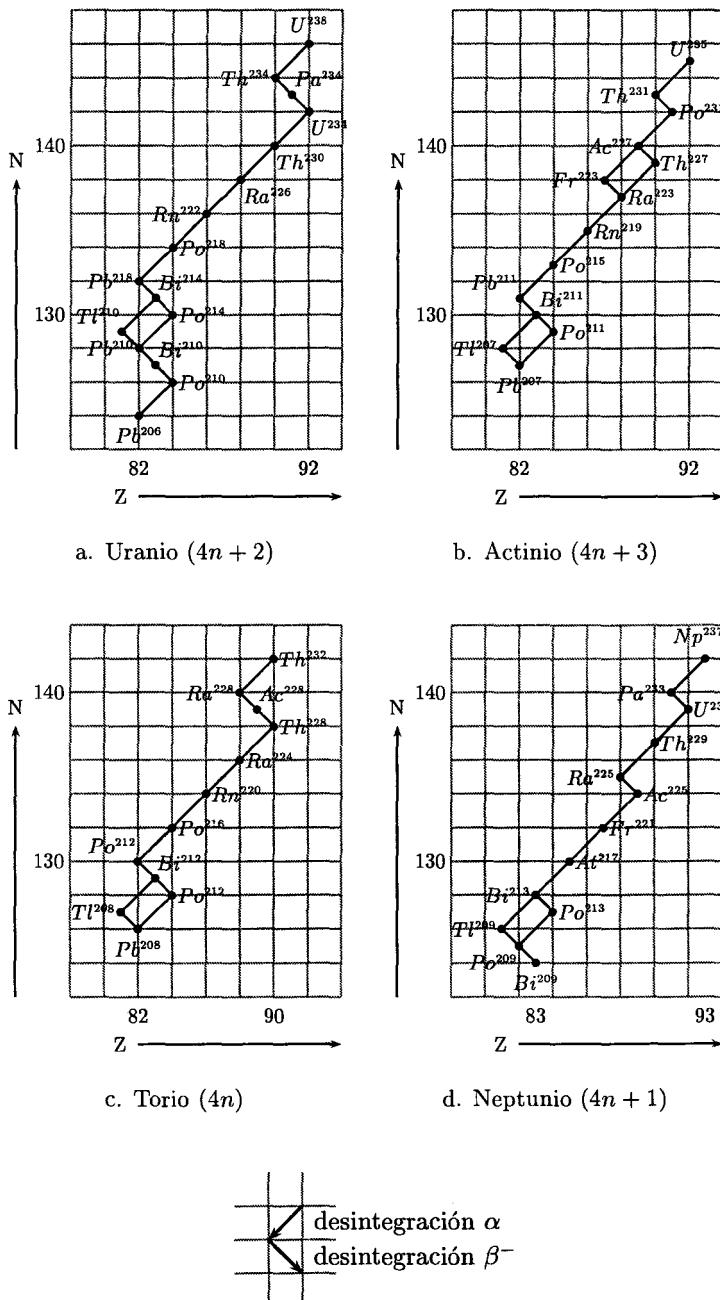


FIGURA 11.9. Esquemas de las desintegraciones de las cuatro series radiactivas.

Los elementos radiactivos que se encuentran en la naturaleza (excepción aparte de los tres que dan origen a las series) se encuentran en la tabla 11.5.

TABLA 11.5. Elementos radiactivos presentes en la naturaleza. Se transforman en un elemento estable.

Nombre	Período (años)	Radiación Observada
Potasio (K^{40})	1.2×10^9	β^- , γ
Vanadio (V^{50})	1×10^6	γ
Rubidio (Rb^{87})	6×10^{10}	β^-
Indio (In^{115})	6×10^{14}	β^-
Lantánio (La^{138})	1×10^{11}	β^-
Neodimio (Nd^{144})	1.5×10^{15}	α
Samario (Sm^{147})	1.4×10^{11}	α
Lutecio (Lu^{176})	7.5×10^{10}	β^- , γ
Renio ($R2^{187}$)	4×10^{12}	β^-

Además de los elementos naturalmente radiactivos antes mencionados, existe otro más que se forma continuamente y en cantidades medibles por la acción de los rayos cósmicos sobre la atmósfera. Es el carbono 14 (C^{14}) producido por la acción de neutrones sobre el nitrógeno atmosférico y luego se transforma emitiendo una partícula β^- . Su período es de 5730 años.

En el ejemplo 11.7 se discutirá el empleo del carbono 14 como un medio bastante aproximado en la determinación de edades arqueológicas.

Ejemplo 11.6.

La edad de la tierra se puede medir a partir de la concentración de uranio 238 y plomo 206 que se encuentre en una muestra dada.

En una serie radiactiva las constantes de desintegración de los diferentes miembros que la componen varían mucho en orden de magnitud, lo cual permite hacer aproximaciones en cálculos matemáticos. En el caso de la serie del uranio, esta comienza con uranio 238 cuyo período es del orden de 109 años y su constante de desintegración es la más pequeña comparada con las de los demás miembros con excepción del plomo 206 que es estable. Entonces, después de 109 años podemos suponer que los únicos elementos presentes en la muestra cuya edad se quiere determinar serán uranio 238 y plomo 206. En términos de la analogía de los tanques de agua, todos los tanques intermedios están vacíos y sirvieron únicamente de conexión entre el primero y el último.

Con estas aproximaciones las ecuaciones (11.22a) y (11.22b) se escribirán:

$$N_U = N_{0U} e^{-\lambda_U t} \quad N_{Pb} = N_{0U} (1 - e^{-\lambda_U t})$$

En este caso la substancia radiactiva se desintegra en otra estable. Siendo el plomo 206 el elemento final de la serie, siempre se encontrarán juntos el uranio 238 y el plomo 206; por tanto el número de átomos de uranio más el número de átomos de plomo presentes en la muestra hoy día, debe ser igual al número inicial de átomos de uranio presentes en dicha muestra cuando se formó; es decir, al formarse la tierra.

La concentración de átomos de uranio y plomo presentes en una muestra se determina experimentalmente y de las ecuaciones anteriores se despeja el tiempo t , que será el tiempo transcurrido desde que la tierra se enfrió y el uranio quedó atrapado dentro de la muestra (generalmente una roca). Entonces:

$$t = \frac{\ln(N_{Pb} + N_U/N_U)}{\lambda_U}$$

□

11.3 Radiactividad artificial

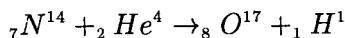
Cuando un núcleo emite radiación debido a causas externas o ajenas a él, el proceso se denomina *radiactividad artificial*.

11.3.1 Reacciones nucleares

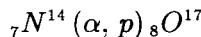
Cuando dos núcleos llegan a quedar muy cerca el uno del otro puede ocurrir que las partículas que los componen se junten. Esto da lugar a una reacción nuclear en forma similar a como el agrupamiento de átomos, para formar una molécula, da lugar a una reacción química.

Las reacciones nucleares tienen lugar cuando se hace incidir un proyectil nuclear (m_i), que puede ser un protón, neutrón o partícula α , sobre un núcleo que sirve de blanco (M_i). En la mayoría de las reacciones se produce la misma partícula proyectil u otra (m_f) y un nuevo núcleo (M_f) que puede estar en su estado base o en un estado excitado.

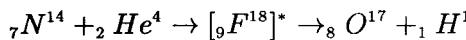
La reacción se designa con el símbolo $M_i(m_i, m_f)M_f$. Por ejemplo, si la reacción es:



en forma abreviada se escribirá:



Cuando la energía de las partículas que intervienen en la reacción no es muy grande, esta tiene lugar en dos etapas: primero se forma un núcleo intermedio que luego se desintegra, o decae, emitiendo la partícula proyectil u otra y transformándose en un nuevo núcleo. El ejemplo anterior se escribe entonces:



donde el símbolo $[]^*$ significa que este núcleo es inestable.

Las reacciones nucleares son esencialmente procesos de choques en los cuales se deben conservar entre otros, la energía total, la cantidad de movimiento, el número de nucleones (masa) y la carga. Se usan métodos clásicos o relativistas, según el caso, para calcularlas.

Consideremos la conservación de energía total para el caso de una reacción nuclear: $m_i + M_i \rightarrow M_f + m_f$. Suponiendo que el núcleo inicial está en reposo, la ecuación de conservación de energía total conduce al siguiente resultado:

$$\Delta K = K_f - K_i = [(M_i + m_i) - (M_f + m_f)] c^2 \quad (11.24)$$

donde K_i es la energía cinética de la partícula proyectil, K_f es la suma de las energías cinéticas de las partículas después de la reacción. Las masas en la ecuación anterior son masas en reposo.

El cambio en la energía cinética del sistema durante la reacción nuclear se denomina el Q de la reacción. Entonces:

$$Q = [(M_i + m_i) - (M_f + m_f)] c^2 \\ = 931.3[(M_i + m_i) - (M_f + m_f)] MeV \quad (11.25)$$

En la segunda ecuación las masas se deben expresar en *uma*.

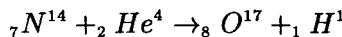
El Q de una reacción nuclear puede ser positivo o negativo. Si es positivo en la reacción nuclear se libera energía en una cantidad igual a Q y el proceso puede ocurrir en forma espontánea. Es una reacción *exotérmica*. Si el Q de una reacción nuclear es negativo, es necesario suministrar energía al sistema para que ella se lleve a cabo. La reacción no tiene lugar espontáneamente. Es una reacción *endotérmica*.

En este caso la partícula proyectil debe tener una energía cinética mínima, llamada *energía umbral* que está dada por la siguiente expresión si no se tienen en cuenta efectos relativistas (caso más común):

$$K_{\min} = -Q \left(1 + \frac{m_i}{M_i} \right) \quad (11.26)$$

Cualquiera sea el signo de Q , de acuerdo con la relación de masa-energía, es equivalente a una variación de masa del sistema, en este caso núcleos. Pero una variación en las masas nucleares también implica un cambio en las energías de enlace de los núcleos (ecuación 11.7).

Una manera clara y sencilla de ver la relación que existe entre el Q de una reacción nuclear y la energía de enlace es reemplazar en la ecuación (11.25) las masas de los núcleos en función de sus energías de enlace. Consideremos nuevamente la reacción:



En esta reacción hay tres núcleos: N^{14} , He^4 y O^{17} que es el núcleo final.

Las energías de enlace de los núcleos iniciales son:

$$E_{en}(N) = 931.4[7m_H + 7m_n - M_N] MeV$$

$$E_{He}(N) = 931.4[2m_H + 2m_n - M_{He}] MeV$$

Por consiguiente la energía de enlace del sistema antes de la reacción es:

$$E_{en}^i = 931.4[9m_H + 9m_n - (M_i + m_i)] MeV$$

La energía de enlace del núcleo final (y después de la reacción) es:

$$E_{en}^f = 931.4[8m_H + 9m_n - M_f] MeV$$

Reemplazando en la ecuación (11.25) $M_i + m_i$ y m_f en función de las energías de enlace y teniendo en cuenta que m_f es igual a m_H el resultado es:

$$\begin{aligned} Q &= 931.4(9m_H + 9m_n) - E_{en}^i - 931.4(8m_H + 9m_n) + E_{en}^f - 931.4m_H \\ &= E_{en}^f - E_{en}^i = \Delta E_{en} \end{aligned}$$

Entonces, la diferencia entre la energía de enlace del sistema después de la reacción nuclear y la energía de enlace del sistema antes de la reacción es precisamente igual a la energía liberada o absorbida durante la misma.

En ocasiones la ecuación que describe una reacción nuclear incluye el Q de la reacción; esto es:

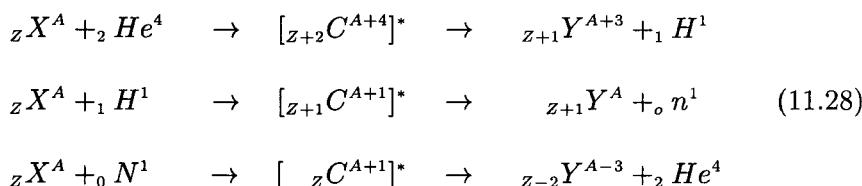
$$M_i + m_i \rightarrow M_f + m_f + Q \quad (11.27)$$

Otra consecuencia del principio de equivalencia masa-energía fue la necesidad de postular la existencia de una nueva partícula. Se había observado que en las transformaciones nucleares con emisión de partículas,

el balance energético de la reacción no era correcto. Como el Q de una reacción se supone igual para todos los núcleos de un mismo elemento se sospechó que debía existir otra partícula en el núcleo que al ser emitida por este, se llevaba la cantidad de energía faltante. Además debía tener una masa nula y carga cero ya que el balance de carga era correcto.

La existencia de esta partícula ya había sido postulada por W. Pauli en 1931, y E. Fermi, quien la llamó *neutrino* (ν), formuló en 1934 una teoría para la desintegración β^- basada en ella. Debido a sus propiedades es muy difícil observarla, y durante muchos años se trató de demostrar su existencia experimentalmente. Finalmente en 1956 F. Reines y C. L. Cowan pudieron detectarla.

Para terminar este numeral, a continuación se encuentran las formas de las ecuaciones de las reacciones nucleares de tipo (α, p) , (p, n) y (n, α) respectivamente:



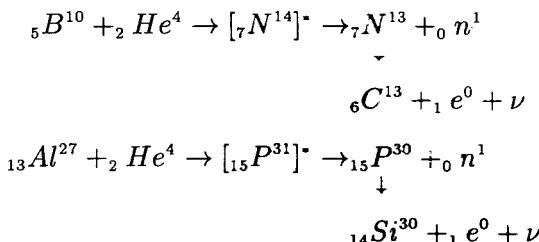
donde X , Y y C son respectivamente el núcleo blanco, el núcleo producto y el núcleo compuesto inestable.

11.3.2 Descubrimiento de radiactividad artificial

En 1934 Frederic e Irene Joliot-Curie observaron que el boro y el aluminio al ser bombardeados con partículas α emitían una radiación, aún después de haber retirado la fuente de partículas α . Además observaron que la intensidad de la radiación decrecía exponencialmente con el tiempo en forma similar a como lo hace la radiactividad natural. En experimentos posteriores se demostró que las partículas emitidas tenían la misma masa y carga del electrón pero esta última era de signo positivo. A esta nueva partícula se la llamó *positrón* y se designa con la letra β^+ ó ${}_1 e^0$.

Las reacciones nucleares de los dos procesos que permitieron el des-

cubrimiento de los positrones son las siguientes:



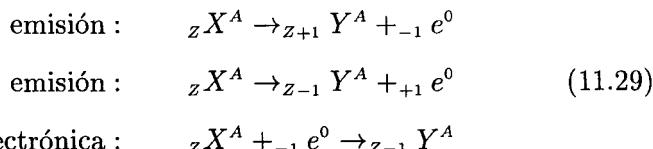
Los núcleos N^{13} y P^{30} son radiactivos, con tiempos de vida media de 10 y 2.5 minutos respectivamente. Los núcleos C^{13} y Si^{30} son estables. Se demostró químicamente que el boro se había convertido en un isótopo radiactivo del nitrógeno y el aluminio en un isótopo radiactivo del fósforo, isótopos que no existen en la naturaleza. Por consiguiente, son artificiales. Con lo anterior se estableció, mediante métodos químicos, la transmutación de un elemento en otro y quedó demostrado que los productos de algunas transformaciones nucleares *inducidas artificialmente* son radiactivos.

Generalmente los núcleos formados por reacciones (α , n) son inestables y decaen emitiendo un positrón y, a veces, rayos gama (γ).

Los isótopos radiactivos artificiales se ubican en la tabla periódica encima o debajo del isótopo estable correspondiente. Tienen un exceso de neutrones o una escasez de ellos para ser estables.

Entonces, para lograr el equilibrio, ya que tienen una deficiencia o un exceso de protones, tienden en el primer caso a aumentar su carga nuclear emitiendo un electrón, mientras que en el segundo caso tienden a disminuirla emitiendo un positrón. Un núcleo con exceso de carga también puede disminuirla capturando un electrón orbital, proceso denominado *captura electrónica* en el cual el protón se transforma en un neutrón y se emite un neutrino.

Estos tres tipos de desintegración nuclear son transformaciones *isobáricas* ya que solo cambia la carga del núcleo. Las reacciones nucleares correspondientes son las siguientes:



Hoy día existen isótopos radiactivos (artificiales) para todos los elementos conocidos.

En 1934 E. Fermi sugirió bombardear elementos pesados con neutrones para obtener nuevos elementos de mayor carga nuclear. Tales

elementos se denominaron *transuránidos*, por encontrarse más allá del uranio en la tabla periódica.

Estos experimentos inicialmente no produjeron resultados hasta que en 1939 se descubrió la fisión nuclear, de la cual hablaremos más adelante, proceso que condujo finalmente a la obtención de los elementos transuránidos. Estos elementos son difíciles de obtener y en el caso de los de número de masa mayor que 101, sus tiempos de vida media son muy cortos.

Ejemplo 11.7.

Los isótopos radiactivos carbono 14 y tritio se encuentran entre la radiactividad natural y la radiactividad artificial. Esto se debe a que son naturalmente radiactivos porque existen en la naturaleza y artificialmente radiactivos porque no se encontrarían en ella, si no fueran creados constantemente en la atmósfera por la acción de neutrones sobre el nitrógeno atmosférico, donde existe un equilibrio entre su producción y su desintegración.

Todo ser viviente contiene una pequeña cantidad de carbono 14, además de carbono normal (C^{12}), que asimila del aire que respira y esta cantidad está en equilibrio con el carbono 14 de la atmósfera. Pero cuando muere, la asimilación de carbono 14 cesa y se rompe el equilibrio. De ahí que cualquier materia orgánica muerta contenga menos carbono 14 que la materia viva. Por tanto, midiendo la cantidad de carbono 14 presente en una muestra material orgánico se puede determinar el tiempo transcurrido desde que ocurrió su muerte.

El carbono 14 es el reloj radiactivo de los antropólogos así como el uranio 238 lo es para geólogos.

Veamos un caso concreto. El carbono 14 encontrado en un gramo de ceniza de una hoguera en un antiguo poblado tiene una actividad de 21.5×10^{-2} desintegraciones por segundo. Si se sabe que por cada átomo de carbono 12 hay 1.3×10^{-12} átomos de carbono 14 en todo ser vivo, ¿cuál es la edad del poblado?

De acuerdo con la ley de desintegración, el tiempo transcurrido desde que se quemó la madera hasta nuestros días estará dado por la relación:

$$t = \frac{1}{\lambda} \ln \left(\frac{N_0}{N} \right) = \frac{Tm}{\ln 2} \left(\frac{N_0}{N} \right)$$

donde $N = a_c / \lambda = a_c Tm / \ln 2$ es el número actual de átomos de C^{14} .

El número de átomos de carbono 14 presentes en un gramo de materia de un árbol vivo será igual a 1.3×10^{-12} veces el número de átomos de carbono 12 en la misma cantidad, esto es:

$$N_0 = \frac{1.3 \times 10^{-12} Na}{12}$$

Llevando estos resultados a la ecuación para el tiempo y sabiendo que $T_m = 5730 \text{ años} = 1.81 \times 10^{11} \text{ s}$, la edad del poblado es aproximadamente igual a:

$$t = 1238 \text{ años}$$

□

11.4 Fisión y fusión nuclear

Otro año importante en la física fue 1939, cuando se descubrió uno de los dos procesos más importantes de la física nuclear: la *fisión nuclear*. El segundo proceso es la *fusión nuclear*, predicho en 1932 y confirmado experimentalmente en 1952.

11.4.1 Fisión nuclear

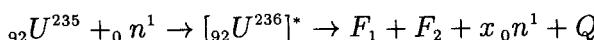
En 1939 los físicos O. Hahn y F. Strassman, estudiando reacciones nucleares producidas cuando neutrones lentos (de poca energía cinética) inciden sobre núcleos de uranio 235, descubrieron que algunos núcleos productos de la reacción mostraban propiedades químicas del bario. Investigaciones posteriores mostraron la presencia de otros isótopos radiactivos con números atómicos comprendidos entre 35 y 57, esto es, situados hacia la mitad de la tabla periódica.

Este resultado fue interpretado por L. Meitner y O. Frisch como los dos fragmentos casi iguales en que se dividió el núcleo de uranio por efecto de la colisión con el neutrón incidente. El proceso se denominó *fisión nuclear*.

A diferencia de la radiactividad natural y artificial, donde el núcleo emite una pequeña parte de sus componentes, en la fisión nuclear el núcleo se divide en dos nuevos núcleos y libera algunos neutrones.

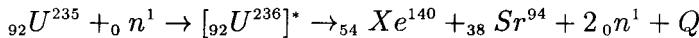
La fisión como proceso natural es muy rara, creyéndose que el uranio 238 se fisiona espontáneamente con una vida media del orden de 10^{16} años, algo imposible de observar experimentalmente. Por consiguiente, para obtener la fisión de un núcleo hay que hacerlo artificialmente y el método usual consiste en excitar el núcleo, suministrándole la energía necesaria para que el proceso tenga lugar. Esta energía se suministra mediante un proceso de colisión y es del orden de 4 a 6 MeV.

La reacción nuclear de la fisión del uranio 235 es la siguiente:

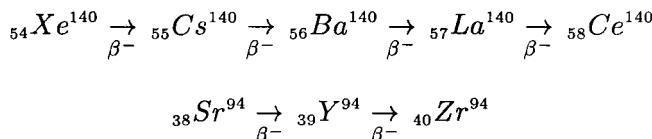


donde el producto intermedio es muy inestable y x es el número de neutrones liberados durante la reacción.

Los fragmentos F_1 y F_2 no son determinados en forma única; existen varias combinaciones posibles de fragmentos y cierto número de neutrones liberados. Una reacción típica es la siguiente:



Los fragmentos son inestables y se desintegran de la siguiente manera:



Los elementos finales de las series son estables y durante el proceso se emiten seis electrones.

Cuando se quiere desintegrar un núcleo de uranio 238, el neutrón incidente debe tener una gran energía cinética. El comportamiento diferente se debe a la estructura de los núcleos, concretamente a la paridad del número de nucleones.

También se puede lograr la fisión nuclear haciendo que el núcleo absorba rayos γ de energía mayor o igual a la energía mínima necesaria para iniciar el proceso. En este caso se denomina *fotofisión*.

El mecanismo de la fisión de un núcleo se puede explicar fácilmente a partir de un modelo denominado *modelo de la gota líquida*, en el cual el núcleo tiene forma esférica cuando está en su estado de menor energía.

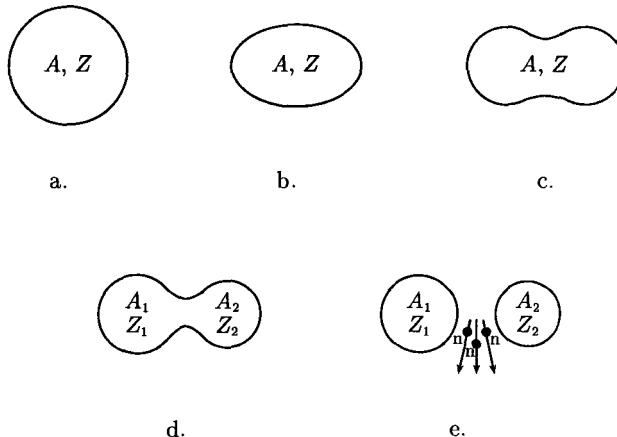


FIGURA 11.10. Esquema de las deformaciones sucesivas de un núcleo al aumentar su energía de excitación.

Se comporta como una gota de líquido en el sentido de que existe una tensión superficial que retiene los nucleones dentro del volumen esférico en forma análoga a como lo hace en la gota de agua que retiene sus moléculas.

Al efectuarse la colisión entre un núcleo y una partícula proyectil, el núcleo adquiere un exceso de energía cuyo efecto es hacer oscilar sus componentes alrededor de la forma esférica, deformándolo (figura 11.10b.). Para oscilaciones pequeñas la tensión superficial hace que el núcleo regrese a su forma esférica después de liberar el exceso de energía. Al aumentar la energía de excitación también aumenta la deformación del núcleo y la separación entre los protones. Entonces la fuerza de repulsión electrostática comienza a ser importante y el núcleo presentará una forma similar a la mostrada en la figura 11.10c. Al suministrar todavía más energía al núcleo la deformación es tal que la tensión superficial ya no puede contrarrestar el efecto de la fuerza de repulsión entre los dos núcleos en formación y el núcleo original se rompe en dos liberando el exceso de energía y alguna partículas (figura 11.10d. y 11.10e.). En el caso de la gota de agua, habrán notado que cuando se vuelve muy grande entonces se divide en dos gotas más pequeñas.

El comportamiento de la energía potencial del núcleo en función de la distancia, entre los fragmentos que se forman durante el proceso de fisión, tiene la forma mostrada en la figura 11.11.

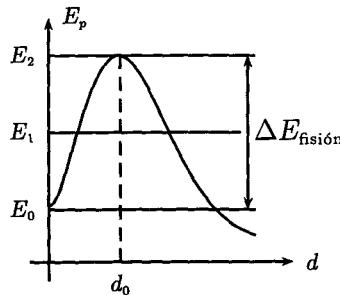


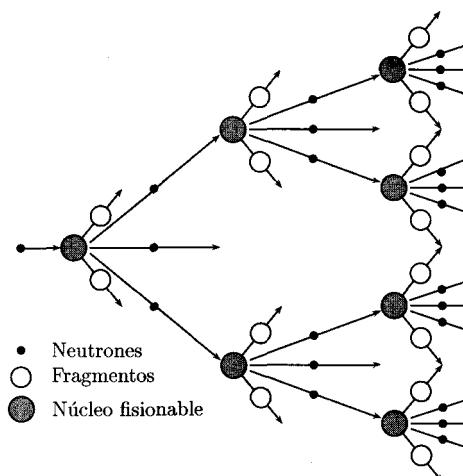
FIGURA 11.11. Energía potencial del núcleo en función de la distancia entre sus fragmentos de fisión.

Mientras la separación entre los fragmentos es menor que cierta distancia d_0 , la tensión superficial hace que no puedan separarse; pero cuando es mayor que d_0 la fuerza electrostática de repulsión es mayor que la fuerza nuclear y los fragmentos se separan. Entonces, la tensión superficial se comporta como una barrera de potencial para el núcleo. Si el núcleo se encuentra en su estado base (E_0), no puede haber fisión puesto que la energía de enlace es máxima. Si se excita el núcleo hasta una energía E_1 , la mecánica cuántica nos dice que existe la posibilidad de que el

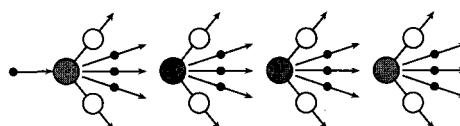
núcleo atravesie la barrera de potencial y ocurra la fisión espontánea del mismo. Para el caso nuclear la probabilidad es muy pequeña.

Finalmente, si se excita el núcleo hasta una energía E_2 , el núcleo puede pasar la barrera y se presenta el proceso de fisión. La energía necesaria para ello será $E_2 - E_0$, y en el caso del uranio 235 es del orden de 6 MeV.

En el ejemplo 11.1 vimos que la energía liberada es del orden de 207 MeV. Parte de ella corresponde a la energía cinética de los neutrones, fragmentos radiactivos primarios y sus productos de desintegración. Además durante la reacción algunos fotones y neutrinos se escapan del material. La energía restante se libera en forma de calor y es del orden de 185 MeV, que es una cantidad considerable.



a. Divergente.



b. Controlada.

FIGURA 11.12. Esquema de una reacción en cadena.

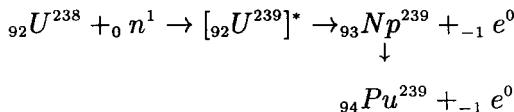
El hecho de que por un neutrón absorbido por el núcleo son emitidos dos o más de ellos, permite la existencia de un proceso denominado *reacción en cadena*. Si se arreglan las cosas de tal manera que después de la fisión dos o más neutrones emitidos produzcan nuevas fisiones, el

número de estas crece en forma exponencial resultando una reacción en cadena divergente (figura 11.12a.). Este proceso se presenta en una bomba atómica.

Pero si se permite que solamente un neutrón liberado por fisión realice cada vez una nueva fisión, el resultado es una reacción en cadena controlada (figura 11.12b.). Esto es lo que ocurre en un reactor nuclear.

La primera reacción en cadena controlada fue obtenida por E. Fermi el 2 de septiembre de 1942, con una potencia de medio watio.

Después del descubrimiento de la fisión nuclear, se encontraron dos reacciones nucleares que dan origen a los elementos transuránidos:



El plutonio 239 (Pu^{239}) también es radiactivo y su vida media es de 24.4×10^3 años. Este es un núcleo fisionable muy útil porque además de liberar energía, se desintegra emitiendo una partícula α y se transforma en uranio 235. En otras palabras, combustible (uranio 238) se utiliza para producir energía y más combustible (uranio 235).

11.4.2 Fusión nuclear

El proceso de fusión nuclear es el efecto inverso de la fisión: dos núcleos livianos realizan una colisión y se unen para formar un núcleo más pesado.

Debido a la fuerza de repulsión electrostática que existe entre los núcleos, sus energías cinéticas deben ser tales que puedan acercarse lo suficiente para que la fuerza nuclear los una. Como la fuerza de repulsión electrostática aumenta con el número atómico, la fusión nuclear sólo tiene lugar entre núcleos livianos.

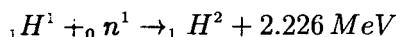
En el proceso de fusión nuclear también se libera energía ya que al unir dos núcleos livianos para formar uno más pesado la masa resultante es menor que la masa inicial del sistema.

Si las condiciones son apropiadas, la energía liberada en la fusión es suficiente para unir otros dos núcleos y liberar más energía, y así sucesivamente hasta tener una reacción en cadena que se convierte en una explosión nuclear de mayor energía que en el caso de la fisión. Este proceso se presenta en la bomba de hidrógeno, también llamada termonuclear.

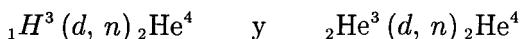
Para que tenga lugar la fusión nuclear se requiere una temperatura muy elevada, creándose el problema del recipiente para contener la reacción ya que ningún material conocido en la tierra puede soportar tales temperaturas.

Este ha sido hasta el momento, uno de los obstáculos que han impedido la construcción de reactores de fusión nuclear.

La reacción de fusión más simple es la captura de un neutrón por un protón para formar deuterio (${}_1 H^2$):

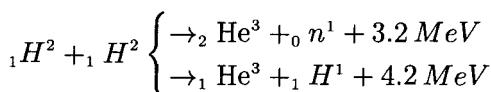


Existen dos reacciones de fusión que liberan mucha energía y son las que tienen lugar cuando el deuterio reacciona con tritio y helio 3:



pero desde el punto de vista práctico no son útiles porque ni el helio 3 ni el tritio son elementos que se obtienen fácilmente.

En cambio, la reacción entre dos núcleos de deuterio es más importante aunque no produzca tanta energía. Esta reacción ocurre de dos maneras, más o menos con la misma probabilidad:

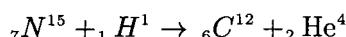
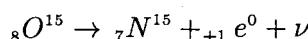
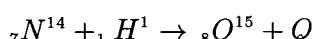
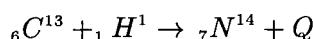
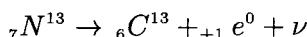
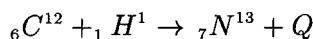


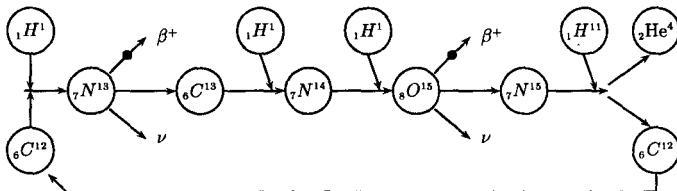
Debido a la abundancia del deuterio (se obtiene del agua) se cree que una vez superado el problema de la reacción de fusión en cadena controlada, se reemplazará la fisión por la fusión que en promedio produce más energía y a menor costo.

Aunque es difícil obtener la fusión nuclear en el laboratorio, las fuentes de energía del sol y las estrellas son precisamente reacciones de fusión.

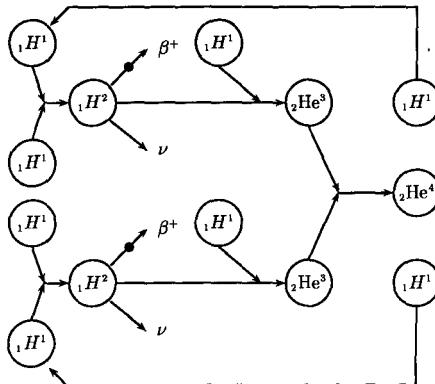
La astrofísica muestra que la partícula más abundante en el sol o las estrellas es el núcleo del átomo de hidrógeno, o sea, el protón. Con ella existen dos reacciones de fusión denominadas *ciclo de Bethe* o del *carbono* y *ciclo de Critchfield* o *protón-protón*.

Las reacciones del ciclo del carbono son las siguientes:





a. Carbono.



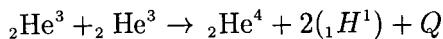
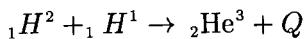
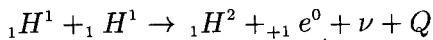
b. Protón-protón.

FIGURA 11.13. Esquemas de los ciclos.

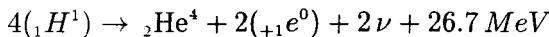
Sumando estas ecuaciones, cancelando los núcleos que aparecen a ambos lados y calculando el Q total de la reacción, el resultado final es:

$$4(^1H) \rightarrow ^4He + 2(^{+1}e^0) + 2\nu + 26.7 \text{ MeV}$$

El esquema de este ciclo se muestra en la figura 11.13a. Las reacciones del ciclo protón-protón son las siguientes:



La tercera reacción sólo tiene lugar cuando las dos anteriores se han producido dos veces. Sumando estas ecuaciones, cancelando núcleos iguales y calculando el Q total de la reacción, el resultado final es:



El esquema de este ciclo se muestra en la figura 11.13b.

En los dos ciclos se libera la misma cantidad de energía, pero el tiempo necesario para que se realice cada ciclo es diferente. Para el ciclo del carbono se necesitan 6×10^6 años y para el del protón-protón 3×10^9 años.

Reacciones de fusión auto-abastecedoras, como son las anteriores, pueden llevarse a cabo solamente en condiciones extremas de temperatura y presión, para garantizar que los núcleos participantes tengan suficiente energía para reaccionar. Estas condiciones se encuentran sólo en el centro de las estrellas. En el sol, cuya temperatura aproximada es de $2 \times 10^9\text{ K}$ el ciclo más probable es el del protón-protón. En general el ciclo del carbono es más eficiente a altas temperaturas, mientras que el del protón-protón lo es a bajas temperaturas, pero todavía muy altas respecto a nuestra escala.

Ejemplo 11.8.

En uno de los procesos nucleares de fusión que ocurren en las estrellas tres átomos de helio 4 se fusionan para dar uno de carbono 12. Si la potencia generada en esta reacción es de $3 \times 10^{23}\text{ W}$, ¿cuál fue la masa de helio que se transformó en carbono 12?

La reacción considerada es: $3({}_2He^4) \rightarrow {}_6C^{12}$ y el Q de esta reacción es de:

$$Q = 931.4(3 \times 4.0026 - 12.0000) = 7.264\text{ MeV}$$

Entonces, tres átomos de helio 4 al fusionarse en carbono 12 liberan 7.264 MeV.

La potencia generada en el proceso considerado fue $3 \times 10^{23}\text{ W}$ lo cual equivale a una energía de $1.875 \times 10^{36}\text{ MeV}$ que es también el Q de la reacción total. Entonces:

$$Q_{total} = N \times Q$$

donde N es el número total de átomos de helio y Q la energía liberada por un átomo, esto es, el valor anteriormente calculado dividido por 3. De lo expuesto tenemos:

$$N = \frac{Q_t}{Q} = \frac{3 \times 1.875 \times 10^{36}}{7.264} \simeq 8 \times 10^{35} \text{ átomos}$$

Esta cantidad de átomos corresponde a una masa:

$$W = \frac{N A}{N_a} = \frac{8 \times 10^{35} \times 4}{6.02 \times 10^{23}} = 5.3 \times 10^{12} \text{ g}$$

Nuevamente hemos hecho numéricamente igual la masa atómica al número de masa (A). \square

Preguntas

1. ¿Qué es el numero atómico y el número de masa de un núcleo?
2. Describa las diferentes radiaciones que se conocen.
3. ¿Qué clase de fuerza es la fuerza nuclear?
4. ¿Qué se entiende por radiactividad natural?
5. Diga qué es un isótopo, un isóbaro, un isótomo. Dé ejemplos.
6. ¿Qué clase de partículas emite un elemento naturalmente radiactivo?
7. ¿Qué principio relativista es fundamental en física nuclear?
8. Explique brevemente cuándo un isótopo es estable.
9. Explique qué es la vida media y la vida promedio de un elemento radiactivo.
10. ¿Qué se entiende por actividad de una substancia radiactiva?
11. ¿Qué se debe conservar en una reacción nuclear?
12. Explique qué significa un Q de reacción: a) mayor que cero y b) menor que cero.
13. Si el Q de una reacción nuclear es cero, ¿qué clase de colisión tuvo lugar entre las partículas blanco y proyectil?
14. ¿Qué se entiende por radiactividad artificial?
15. Explique brevemente el mecanismo de la fisión nuclear.
16. ¿Cuáles son las propiedades importantes de la fisión nuclear?
17. Explique qué es una reacción en cadena: a) controlada y b) divergente.

18. ¿Qué se entiende por fusión nuclear?
19. ¿Qué condiciones se deben presentar para que tenga lugar un proceso de fusión nuclear?
20. ¿En dónde se producen naturalmente los procesos de fusión nuclear?

Problemas

1. En un isótopo de radón el número de átomos disminuye en un 20% en un día. ¿Cuál es su constante de desintegración? R: $2.58 \times 10^{-6} s^{-1}$
2. Si dos miligramos de polonio 218 ($T_m = 3.05 \text{ min}$) se desintegran durante media hora, ¿qué cantidad de plomo 214, también radiactivo ($T_m = 26.8 \text{ min}$), habrá en la muestra? R: 0.509 mg .
3. El tiempo de vida media del cesio 141 es de 33 días. Cuál es:
 - (a) La actividad de 1 mg de este isótopo en desintegraciones por segundo y en Ci.
 - (b) El tiempo necesario para que 1 mg se reduzca a $0.5 \times 10^{-6} \text{ g}$.
 - (c) La actividad después de este tiempo en desintegraciones por segundo y en Ci

R: a) $1.037 \times 10^{12} \text{ d/s}$, 28 Ci ; b) 252.2 días; c) $5.19 \times 10^9 \text{ d/s}$, 14 Ci .

4. Una muestra de uranio contiene 20 g de uranio 238 después de desintegrarse durante un tiempo igual a una vida promedio.
 - (a) ¿Cuánto uranio 238 había inicialmente en la muestra?
 - (b) Si se hubiese recogido todo el helio que resulta de la desintegración de la cantidad inicial de uranio, durante el tiempo anterior, ¿cuál sería su masa y volumen a condiciones normales de temperatura y presión? (a condiciones normales, 22.4 l contienen N_A átomos).

R: a) 54.36 g; b) 3.2 l , 0.577 g .

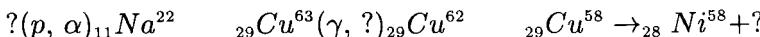
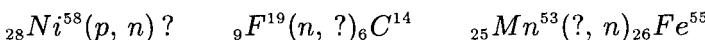
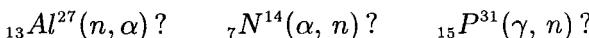
5. Efectúe las operaciones necesarias para obtener las ecuaciones (11.22b) y (11.22c) a partir de las ecuaciones (11.20) y (11.21).
Ayuda: en la ecuación (11.20) agrupe términos de igual subíndice y multiplique por $e^{\lambda_B t}$ a ambos lados de la igualdad.

6. Demuestre que el tiempo necesario para que el número de átomos de una substancia radiactiva B , creada a partir de otra substancia radiactiva A , sea máximo es:

$$t_{\max} = \left[\ln \frac{\lambda_B}{\lambda_A} \right] (\lambda_B - \lambda_A)^{-1}$$

donde λ_A y λ_B son las respectivas constantes de desintegración.

7. Comparando con las ecuaciones (11.28) encuentre las ecuaciones de las reacciones (α, n) , (p, α) y (n, p) .
8. Complete las siguientes reacciones nucleares:



Para los núcleos producto consulte la tabla de isótopos (el número atómico le indicará de qué elementos se trata).

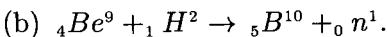
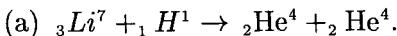
R: ${}_{11}Na^{24}$, ${}_9F^{17}$, ${}_{15}P^{30}$, ${}_{29}Cu^{58}$, α ${}_1H^3$, ${}_{12}Mg^{25}$, ${}_0n^1$, β^+ .

9. Bombardeando el isótopo sodio 23 con deuterio, se transforma en el isótopo radiactivo 24 que se desintegra en un elemento estable emitiendo una partícula β^- . Despues de un día se observa que la actividad del sodio 24 pasa de 170 d/s a 56 d/s .

- (a) Escriba las ecuaciones de las dos reacciones.
 (b) ¿Cuál es el elemento estable final?
 (c) ¿Cuál es el tiempo de semidesintegración del sodio 24?

R: b) ${}_{12}Mg^{24}$; C) 15 horas.

10. Cuál es la energía liberada en las siguientes reacciones?



R: a) 17.34 MeV ; b) 4.36 MeV .

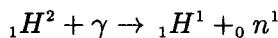
11. El isótopo helio 3 se obtiene bombardeando núcleos de titrio con protones.

- (a) Escriba la ecuación de la reacción nuclear.
 (b) Encuentre el Q de la reacción.

(c) ¿Cuál es la mínima energía que debe tener el proyectil para que se realice esta reacción?

R: b) -0.764 MeV ; c) 1.02 MeV .

12. La reacción de desintegración del deuterio con rayos γ es la siguiente:



Si la energía del rayo γ es de 2.66 MeV y la del protón emitido es de 0.22 MeV , ¿cuál es la energía cinética del neutrón?

Ayuda: comience por calcular el Q de la reacción. R: 0.22 MeV .

Capítulo 12

Elementos de la física del estado sólido

12.1 Qué es el estado sólido

Lo que actualmente conocemos como física del estado sólido es una de las varias ramas de la física moderna que más ha aportado tanto al conocimiento científico de la materia como a su aplicación tecnológica con resultados verdaderamente asombrosos. El ejemplo más sencillo pero más diciente es, sin lugar a dudas, la electrónica y sus avances espectaculares. Sin embargo esta disciplina científico-teórica, descansa fundamentalmente en la aplicación de las propiedades de dispositivos semiconductores (transistores, diodos, circuitos integrados, etc.). Es claro que la utilización inteligente y recursiva de los semiconductores no sería posible si no se entendieran los procesos físicos de conducción de corriente, por ejemplo, que ocurren en ellos. Estos procesos han sido claramente determinados por una especialización del estado sólido: la física de semiconductores.

El rango de estudio del estado sólido va mucho más allá de la parte especial de los semiconductores. En general todas aquellas substancias que posean un volumen definido y presenten características de rigidez y elasticidad deben ser definidas como sólidas y esto es precisamente lo que el estado sólido debe estudiar.

Sin embargo, una definición tan amplia no permite encarar un estudio sistemático ni apropiado del tema. Es necesario delimitar algunas características que permitan agrupar los sólidos respecto a propiedades específicas para empezar a entender y explicar su comportamiento.

12.1.1 Sólidos cristalinos

Una primera característica que debe ser aclarada es la siguiente: ¿cómo es la estructura de los sólidos? O lo que es lo mismo: ¿de qué manera están conformados los cuerpos sólidos?

Actualmente conocemos que la materia está conformada por átomos. La distribución espacial de los átomos dentro de los cuerpos sólidos conducirá a que se haga una distinción fundamental dentro del estado sólido. Existen substancias en donde los átomos que las forman ocupan sitios espaciados regularmente, de tal manera que se puede pensar que existe un volumen elemental de geometría sencilla y bien determinada, que al ser repetido dentro del material lo reproduce en su totalidad. Es como si el sólido fuese un volumen conformado de ladrillos idénticos.

Las substancias que obedecen la condición anterior se denominan *sólidos cristalinos*, y deben caracterizarse por una perfecta (o casi perfecta) periodicidad en su estructura espacial. La regularidad de la distribución de los átomos dentro del cristal proporciona una visión conceptual simple, facilitándose así el entendimiento de los procesos físicos que ocurren en ellos.

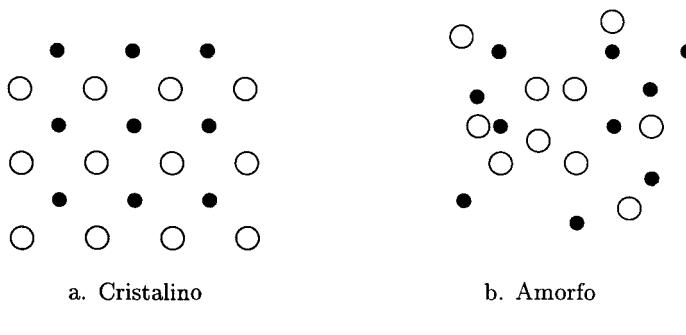


FIGURA 12.1. Sólido bidimensional.

En contraposición con los sólidos cristalinos existe otra clase de sólidos con respecto a su estructura, que se denominan “*sólidos amorfos*”. Estos últimos también poseerán volúmenes definidos y características de rigidez, pero la distribución geométrica espacial de los átomos, o sus constituyentes, *no es regular ni periódica*. En la figura 12.1 con un ejemplo bidimensional se ilustra los dos tipos de sólidos definidos según su estructura espacial.

La primera división permite realizar clasificaciones aún más profundas y precisas. De acuerdo con la capacidad de conducir o no la corriente eléctrica, los sólidos cristalinos se pueden dividir en dos grandes grupos:

los *sólidos cristalinos metálicos* y los *no metálicos*. La posibilidad de conducir adecuadamente la corriente eléctrica se debe a la presencia de electrones muy débilmente ligados a los átomos del cristal que pueden responder sin mucha resistencia a un estímulo eléctrico externo.

Esta característica de los *sólidos cristalinos metálicos* (poseer electrones débilmente ligados) es responsable también de su buena conducción térmica y propiedades ópticas especiales como su buena capacidad reflectora. Las propiedades eléctricas de los sólidos se estudiarán con mayor extensión en numerales posteriores.

Los sólidos cristalinos *no metálicos* presentan características físicas tan disímiles y amplias, que es necesario efectuar una clasificación de estos más elaborada. Una clasificación bastante espontánea, se logra al determinar el mecanismo físico que mantiene unidos los átomos al cristal. Los diversos enlaces dan lugar a los cristales *iónicos*, *covalentes* y *moleculares*. En un numeral posterior se tratarán los distintos mecanismos que logran mantener de una manera estable una estructura sólida y la clasificación general dada anteriormente quedará claramente establecida.

En lo que resta del presente capítulo, nos limitaremos al estudio de los sólidos cristalinos exclusivamente.

Algunos datos históricos interesantes en el desarrollo del estudio de los materiales sólidos son los siguientes:

Uno de los primeros dibujos de un cristal aparece en un recuento farmacéutico en la China en el siglo XI A.C.

Desde el siglo VIII se ha conservado un cristal de cuarzo en el Japón.

El famoso físico C. Huygens presenta un modelo geométrico para el cristal de carbonato de calcio en el año 1760, el cual consta de una repetición de esferas dispuestas regularmente aun cuando no tiene una noción de lo que actualmente llamamos átomos.

En el siglo XVIII gracias al esfuerzo de los mineralogistas se logran clasificar los distintos tipos de cristales, debido principalmente al trabajo de A. Bravais, clasificación que actualmente se mantiene.

Durante el siglo XIX se sistematizan los estudios sobre las constantes elásticas de los sólidos, complementando los trabajos iniciados por R. Hooke y T. Young. A principios del siglo XX, con la revolución en las concepciones teóricas sobre el comportamiento de la naturaleza se logra difractar los rayos *X* por medio de cristales en los trabajos experimentales de W. Friedrich y P. Knipping, los cuales demuestran no solamente que los átomos en un cristal se hallan regularmente espaciados teniendo una simetría muy definida, sino también el carácter ondulatorio de los rayos *X*.

A principios de 1913 gracias a los trabajos de W. L. Bragg y W. H. Bragg, se comienzan a determinar estructuras cristalinas por medio de la difracción de rayos *X*. Luego con la ayuda del formalismo de la

mecánica cuántica se logran entender fenómenos de conducción eléctrica, propiedades mecánicas, térmicas y magnéticas en los sólidos.

En 1949 se logra, con base en cristales semiconductores, fabricar el primer transistor de juntura.

En la década de los 50 se inicia la revolución tecnológica con base en el anterior dispositivo.

En la década de los 60, gracias a los circuitos integrados se producen los llamados **computadores de segunda generación**.

En las décadas de los 70 y 80, se inician extensas investigaciones sobre **materiales amorfos**, especialmente semiconductores.

También en estas décadas, las celdas solares construidas con elementos semiconductores principian a ser consideradas como fuente alterna de energía, en lugar de los combustibles fósiles.

A partir de 1986 se encuentran los primeros superconductores de alta temperatura crítica¹, lo que motiva una gran actividad de investigación básica que se mantiene hasta ahora, dadas las posibles aplicaciones tecnológicas. En el cierre del siglo XX y el inicio del siglo XXI la investigación en el estado sólido marca una preponderancia hacia las nanoestructuras, dispositivos ópticos y electrónicos con tamaño de unos pocos radios atómicos.

Los resultados de tales esfuerzos no tardarán en hacerse comunes en la vida cotidiana.

12.2 Elementos de cristalográfia

12.2.1 Caracterización cristalina

Como se acaba de afirmar en el numeral anterior, un sólido cristalino perfecto se concibe por medio de una estricta periodicidad en su estructura. Esta propiedad permitirá hacer algunas definiciones que arrojarán una caracterización adecuada de lo que es un cristal.

Así como una pared sólida se logra conformar a partir de una unidad fundamental, el ladrillo, un sólido cristalino se logra también por la repetición en todas direcciones de la unidad más pequeña posible que posea las características del cristal. Esta unidad en cristalográfia se denomina “*celda unitaria*”. En la figura 12.2 se muestra un cristal bidimensional y su celda unitaria.

¿Cómo se puede caracterizar más rigurosamente esa celda unitaria? Esta pregunta puede complementarse con la que sigue aun cuando, aparentemente, no tenga relación: si estoy en algún sitio dentro del cristal,

¹Temperatura a la cual un material pasa de ser un conductor normal a otro (el superconductor) que conduce corriente eléctrica sin resistencia. Algunos compuestos de Itrio, Bario, Oxígeno y Cobre poseen temperatura crítica $T_C \sim 90\text{ K}$.

¿cómo hago para ubicarme en otro completamente equivalente al anterior?

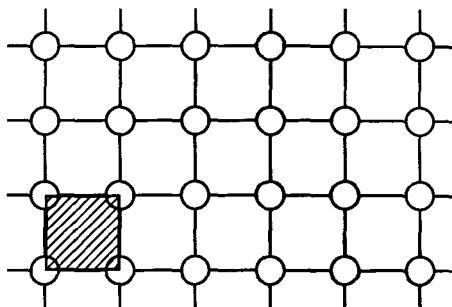


FIGURA 12.2. Cristal en dos dimensiones y su celda unitaria. El área sombreada contiene todas las características del cristal.

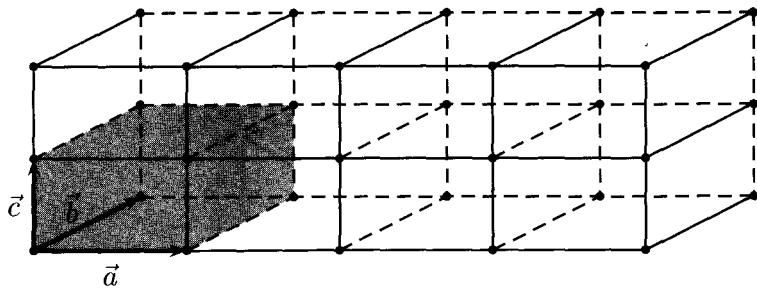


FIGURA 12.3. Definición de los vectores base.

Tomemos un caso en tres dimensiones y tal como se aprecia en la figura 12.3, definamos tres vectores a lo largo de las aristas de la celda unitaria. Estos vectores \vec{a} , \vec{b} y \vec{c} definen las características de la celda unitaria, independientemente del origen que se haya tomado dentro de la estructura cristalina. Además si n_1 , n_2 y n_3 representan números enteros, el vector:

$$\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \quad (12.1)$$

estará representando otro punto dentro de esa red cristalina con características netamente idénticas al tomado como punto de referencia u origen.

Por tanto, al tener completamente establecida la celda unitaria con sus vectores base, y al tomar todos los posibles valores enteros n_1 , n_2 , n_3 ,

se habrá generado todo el cristal. Es por esto por lo que se exige que un verdadero cristal sea **invariante** (que ninguna de las propiedades físicas del material cambie) cuando se efectúan operaciones de translación descritas por la ecuación (12.1).

Al determinar clara y **unívocamente** los vectores \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , así como los ángulos que forman entre sí los vectores, queda completamente establecida la **característica de la celda unitaria** del cristal.

12.2.2 Sistemas cristalinos

Se puede creer que, dado que sólo se exige una estructura periódica para la definición de un cristal, existen muchas clases de estructuras cristalinas. Sin embargo, en el siglo XIX el físico teórico francés Augusto Bravais demostró que solamente 14 estructuras cristalinas tridimensionales son posibles, y que estas estructuras pueden clasificarse en 7 sistemas cristalinos. La demostración efectuada por Bravais se basó en el estudio de las posibles simetrías que cumplirían las estructuras. En la actualidad la 14 estructuras cristalinas posibles se denominan “*redes de Bravais*”.

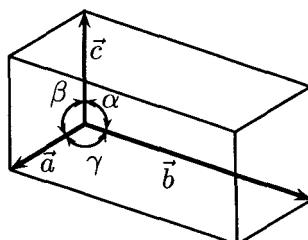


FIGURA 12.4. Vectores unitarios, magnitudes y ángulos en una celda unitaria general.

Antes de describir los 7 sistemas cristalinos que conforman las 14 redes de Bravais, analicemos la figura 12.4 donde se definen precisamente los vectores de la celda unitaria, sus magnitudes y los ángulos que forman entre sí las aristas. Según el numeral anterior esto es lo que define **únivamente** la celda unitaria de un cristal.

Si llamamos $|\vec{a}| = a$, $|\vec{b}| = b$, etc., las magnitudes de los vectores base, encontramos los siguientes sistemas cristalinos:

a) Sistema cúbico

Presenta tres estructuras llamadas simple, centrada en el cuerpo, y centrada en las caras.

$$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

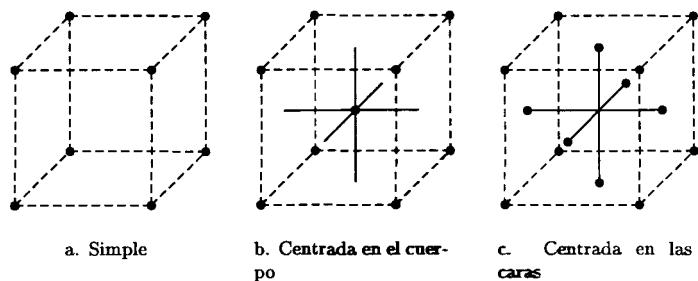


FIGURA 12.5. Sistema cúbico con sus tres estructuras.

b) Sistema tetragonal

Presenta dos estructuras llamadas tetragonal simple y tetragonal centrado en el cuerpo.

$$a = b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ.$$

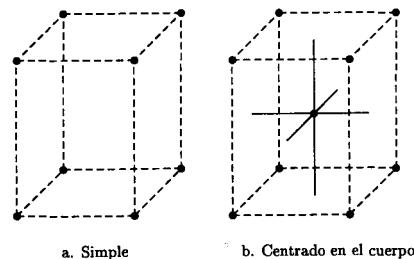


FIGURA 12.6. Sistema cristalino tetragonal.

c) Sistema ortorrómbico

Presenta un total de cuatro estructuras: simple, centrada en las bases, centrada en el cuerpo y centrada en las caras.

$$a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

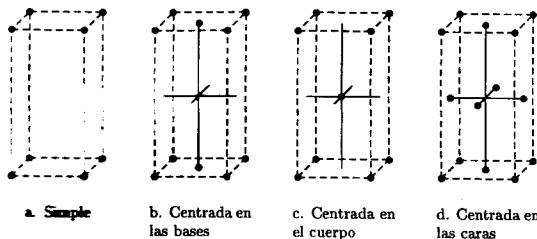


FIGURA 12.7. Sistema ortorrómbico.

d) Sistema monocliníco

Tiene dos estructuras: simple y centrada en las bases.

$$a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$$

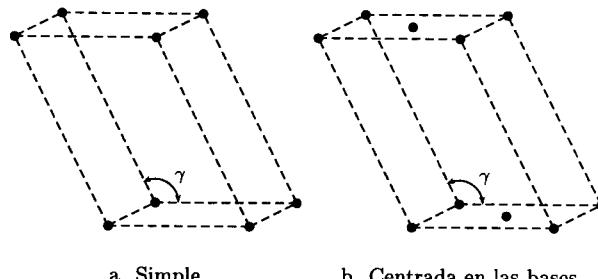


FIGURA 12.8. Sistema monoclinico.

e) Sistema triclínico

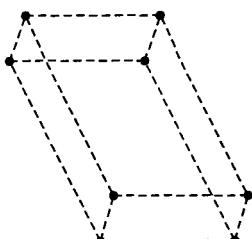
Tiene solamente una estructura simple.

$$a \neq b \neq c \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$

f) Sistema trigonal

Presenta una sola estructura.

$$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



a. Simple

FIGURA 12.9. Sistema triclinico.

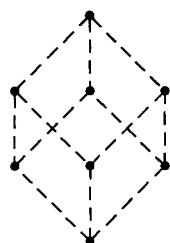


FIGURA 12.10. Sistema trigonal.

g) Sistema hexagonal

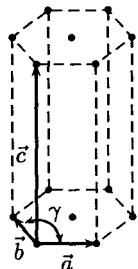


FIGURA 12.11. Sistema hexagonal.

Presenta una sola estructura.

$$a = b \neq c \quad \alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$$

En la tabla 12.1 se presenta un resumen de los sistemas cristalinos teniendo en cuenta la convención adoptada en la figura 12.4; y además en algunos casos tipo de cristales que se encuentran en la naturaleza.

TABLA 12.1. Sistemas y estructuras cristalinas.

Sistemas Cristalinos	Tipos de estructuras	Características de la celda unitaria	Ejemplos de cristales naturales
Cúbico	1. Simple 2. centrada en el cuerpo 3. centrada en las caras	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Cobre, hierro, plata, oro, cloruro de sodio.
Tetragonal	1. Simple 2. centrada en el cuerpo	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Bióxido de estaño(S_nO_2) sulfato de níquel hidratado ($NiSO_4 \cdot 6H_2O$)
Ortorrómbico	1. Simple 2. centrada en la base 3. centrada en las caras 4. centrada en el cuerpo	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Azufre, nitrato de potasio (KNO_3), galio
Monoclínico	1. Simple 2. centrada en la base	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	Sulfato de calcio hidratado ($CaSO_4 \cdot 2H_2O$), ferricianuro de potasio ($K_3Fe(CN)_6$)
Triclínico	1. Simple	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$CuSO_4 \cdot 5H_2O$, $K_2Cr_2O_7$
Trigonal	1. Simple	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Hielo, cuarzo, antimonio, arsénico
Hexagonal	1. Simple	$a = b = c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$	Cadmio, magnesio, zinc
7 sistemas	14 estructuras		

12.2.3 Direcciones y planos cristalográficos

Por simplicidad en la discusión que sigue vamos a suponer un cristal cúbico de tal manera que los vectores \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} de la celda unitaria se encuentran a lo largo de los ejes x , y , z respectivamente. Tal situación está representada en la figura 12.12.

Es bien sabido ya que el vector descrito por la ecuación (12.1) está

fijando la posición de un átomo dentro del cristal siempre y cuando los números n_1 , n_2 y n_3 sean enteros. Es decir el vector:

$$\vec{T} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

tendrá su extremo siempre en un átomo, cuando el conjunto $\{n_1, n_2, n_3\}$ sean números enteros.

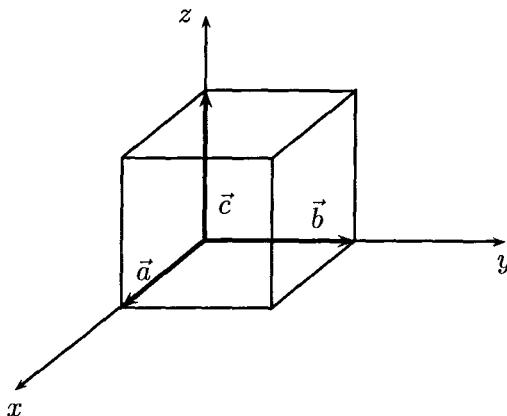


FIGURA 12.12. Sistema de referencia arbitrario en un cristal cúbico simple.

Lo fundamental en lo que se ha discutido, es que las operaciones de translación descritas por la ecuación (12.1) son independientes del origen que se tome. Por tanto, el conjunto de números enteros n_1, n_2, n_3 definen una dirección dentro del cristal.

Para aclarar mejor las afirmaciones anteriores, podemos recurrir al siguiente ejemplo: de acuerdo con la figura 12.12 y respecto al origen escogido, la posición del átomo situado sobre la diagonal principal del cubo vendría dado por:

$$\vec{T}_{1,1,1} = 1\vec{a} + 1\vec{b} + 1\vec{c} \quad (12.2)$$

Ahora bien: observemos la figura 12.13 en donde tenemos no solamente la celda unitaria, sino varias de estas. Se puede apreciar que independientemente del origen del sistema de referencia la ecuación (12.2) siempre está marcando el átomo que queda sobre la diagonal principal del cubo de la celda unitaria. En otras palabras, la tripla [1,1,1] proporciona vectores dados por la ecuación (12.2) o de igual magnitud y paralelos. Es decir, un conjunto de rectas paralelas independientemente de la celda unitaria tomada como referencia. El análisis anterior, puede ser generalizado para cualquier sistema cristalino sin ninguna dificultad. (¿Por qué?)

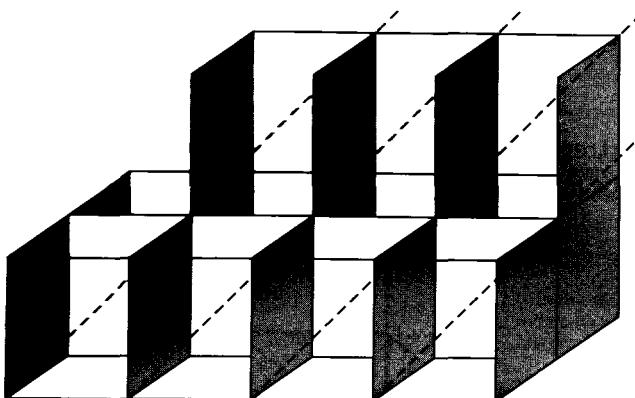


FIGURA 12.13. Las líneas punteadas son todas paralelas y unen siempre la diagonal principal de los cubos, independientemente del origen del sistema de referencia.

Para la identificación y ubicación de los planos cristalinos se emplean los llamados índices de Miller, los cuales se denotan por tres números entre paréntesis: (h, k, l) . En la figura 12.14 tenemos un plano situado en el espacio que intercepta los ejes coordenados del sistema de referencia en los puntos x_0, y_0 y z_0 . También se muestran los vectores \vec{a}, \vec{b} y \vec{c} de la celda unitaria.

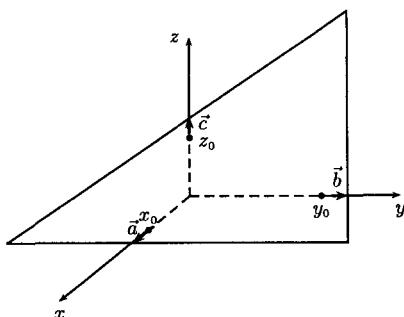


FIGURA 12.14. Un plano cristalino cualquiera, y los vectores \vec{a}, \vec{b} y \vec{c} .

Para determinar los índices de Miller que caracterizan el plano en consideración, procedemos de la siguiente manera:

- Hallamos los puntos de corte x_0, y_0, z_0 .
- Encontramos las relaciones $x_0/a, y_0/b$ y z_0/c ; en donde las letras a, b, c son las magnitudes de los respectivos vectores.

- c) Tomamos los inversos de los tres números anteriores, es decir: a/x_0 , b/y_0 y c/z_0 .
- d) Reducimos la tripla anterior e su mínimo común denominador; multiplicamos los inversos (paso c) por este número, y los números que resultan son los 3 índices de Miller (h , k , l).

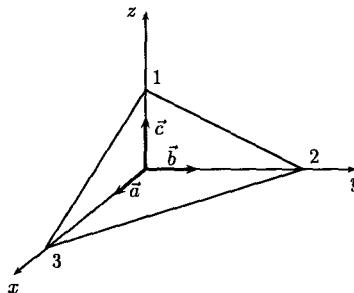


FIGURA 12.15. Plano cristalino en un cristal cúbico.

Generalmente las mediciones cristalográficas se hacen en términos de las magnitudes de a , b y c y por tanto basta tomar los inversos de las cantidades x_0 , y_0 , z_0 en el patrón.

Como ejemplo supongamos que queremos determinar los índices de Miller del plano que se muestra en la figura 12.15 dentro de una estructura cúbica ($|\vec{a}| = b = c$). Las intersecciones del plano con los ejes coordinados son:

$$x_0 = 3 \quad y_0 = 2 \quad z_0 = 2$$

Según los pasos anteriores a seguir tenemos:

- Puntos de corte: $(3, 2, 2)$.
- Inversos: $(1/3, 1/2, 1/2)$.
- Mínimo común denominador: 6.
- Índices de Miller: $(6/3, 6/2, 6/2) = (2, 3, 3)$.

En la figura 12.16 se muestran los planos cristalinos (con sus respectivos índices de Miller) más comunes en las estructuras cúbicas.

Para finalizar hay que anotar que si algún número es negativo en los índices este se reconoce por la rayita que se pone sobre él. Por ejemplo $(\bar{1}, 2, 3)$ quiere decir que el primer índice de Miller es negativo.

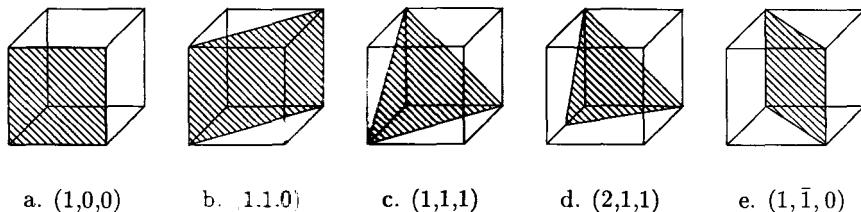


FIGURA 12.16. Algunos planos cristalinos y sus índices de Miller en estructuras cúbicas.

12.3 Difracción de rayos *X* en los cristales

Una de las herramientas más poderosas para determinar experimentalmente las estructuras cristalinas, es la difracción de los rayos *X* cuando éstos interactúan con la distribución periódica de los átomos dentro de un cristal.

Cabe anotar que históricamente, una de las pruebas irrefutables de la característica ondulatoria de los rayos *X*, fue lograr difractar esta radiación por medio de un monocrystal de cloruro de sodio, experimento realizado por el físico Von Laue en el año de 1912.

Una de las explicaciones más rigurosas y a la vez más simple de la difracción de rayos *X* por cristales, fue dada por Bragg en 1913, conocida actualmente como la “*condición de Bragg*”, que ahora entraremos a explicar.

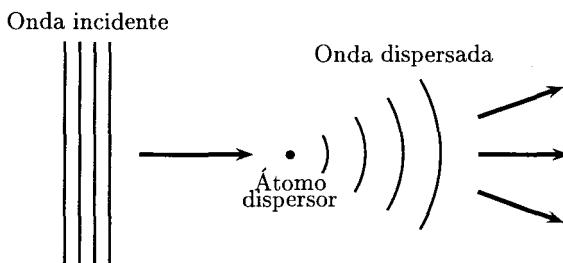


FIGURA 12.17. Dispersión de una onda electromagnética por un átomo cuya distribución electrónica se supone uniforme y constante.

Sabemos que los átomos son capaces de dispersar radiación electromagnética por medio de los electrones que los constituyen.

La figura 12.17 muestra un caso general de dispersión, en donde por simplicidad se supone que los electrones que tiene este átomo poseen una carga continua y fija, uniformemente distribuida en el volumen atómico. Según la figura 12.17, la dispersión de la radiación se da en todas dire-

cciones (forma en realidad una onda esférica), y como en un cristal real la radiación no interactúa con un sólo átomo sino con muchos, existirán algunas direcciones especiales donde la radiación dispersada interferirá constructivamente y en otras en donde la interferencia será destructiva, dando lugar en total a un *patrón de difracción* usual como si se tratase de la interacción de un movimiento ondulatorio con una rejilla difractora.

Tal como se vio en el numeral anterior, en una estructura cristalina se pueden definir unos planos cristalográficos (caracterizados por los índices de Miller) los cuales tendrán un número particular de átomos por unidad de superficie. En la figura 12.18 se representa en un cristal cúbico simple una familia de planos cristalinos equivalentes, con un espaciamiento interplanar igual a d . En el caso de la estructura cúbica simple coincide con la arista del cubo de la celda unitaria, y se le llama usualmente *constante de red*.

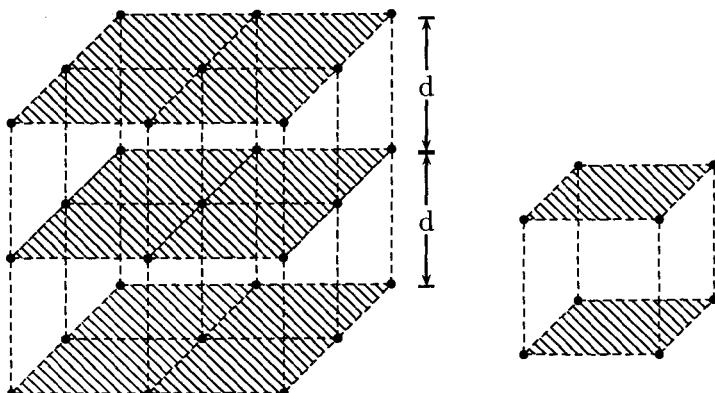


FIGURA 12.18. Familia de planos cristalinos en un cristal cúbico simple. En el detalle la celda unitaria.

Para la construcción de la *condición de Bragg* en la dispersión de los rayos X por un cristal, tomemos la dispersión por dos átomos localizados en planos sucesivos, tal como se ve en la figura 12.19.

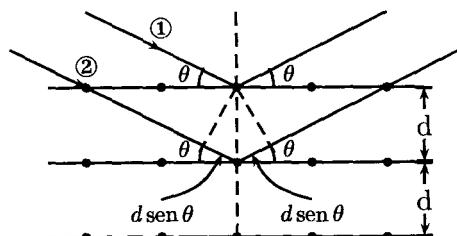


FIGURA 12.19. Dispersión de rayos X por una capa de átomos en una cierta familia de planos en un cristal.

Al fijar nuestra atención en los rayos marcados como 1 y 2 en la figura, podemos asegurar que una vez hayan sido “reflejados” por el plano cristalino interferirán uno con otro. En el patrón de difracción que se obtiene al realizar el **experimento**, los puntos que se observan experimentalmente son **únicamente aquellos** en donde se presentó interferencia constructiva. **Ahora bien, para que se dé interferencia de refuerzo (constructiva, entre los rayos 1 y 2 luego de su dispersión por el conjunto de átomos, se debe cumplir que la diferencia de caminos entre los dos movimientos ondulatorios sea un múltiplo entero de la longitud de onda de la radiación incidente.** Así, según la gráfica y la aseveración anterior, se debe cumplir que:

$$2d \operatorname{sen} \theta = n\lambda \quad (12.3)$$

donde $n = 1, 2, \dots$, recibe el nombre de *orden de difracción*.

La ecuación (12.3) es conocida como *condición de Bragg*, la cual proporciona las posibles direcciones en las cuales se puede dar interferencia constructiva en un experimento de difracción. También se puede apreciar de la ecuación (12.3) que λ es proporcional a d : *la longitud de onda de la radiación debe ser del mismo orden de magnitud que la constante de la red.*

En el capítulo 5 ya vimos cómo se producen los rayos X y cuáles son sus características físicas. En la figura 12.20 se encuentra un esquema de un espectrómetro de rayos X para el estudio de las estructuras cristalinas.

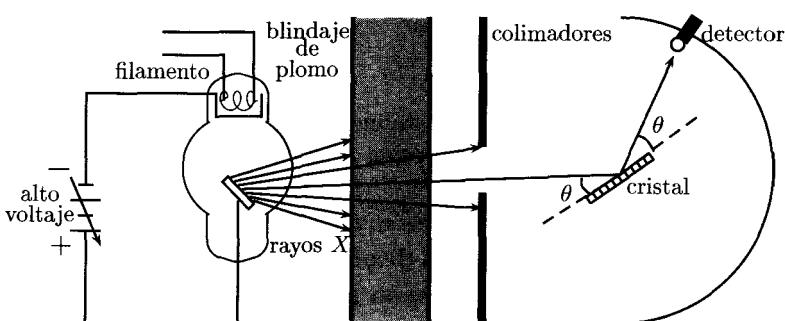


FIGURA 12.20. Esquema de un espectrómetro de rayos X .

Como la radiación de rayos X debe ser monocrómatica (de una sola frecuencia), del espectro general del ánodo deberá emplearse únicamente el espectro característico (por ejemplo líneas K_{α} mostradas en la figura 12.21) lo cual puede lograrse empleando un gran blindaje de plomo para amortiguar la totalidad del resto de espectro; o por medio de filtros (otro cristal por ejemplo) para que únicamente las componentes específicas de

la radiación lleguen al colimador, el cual no es más que una rendija para obtener un haz muy delgado de radiación. El detector de la figura 12.20 puede ser un contador, una cámara de ionización, o lo más usual, una placa fotográfica.

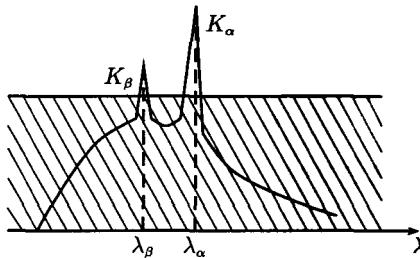


FIGURA 12.21. Espectro característico de rayos X.

Cuando la muestra que se utiliza es un cristal, el número de planos cristalinos que intervienen en la difracción es apreciable, lo cual se puede ver en la figura 12.22, al tomar dos dimensiones solamente. También se puede ver que las distancias interplanares son diferentes en los casos mostrados y por lo tanto las contribuciones de la ecuación (12.3) también serán distintas.

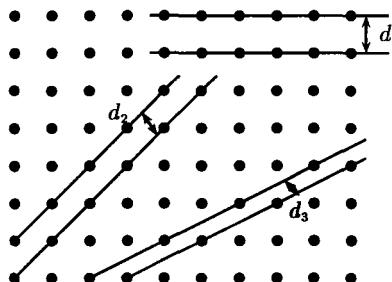


FIGURA 12.22. Conjunto de planos cristalinos diferentes que intervienen en la difracción de Bragg.

Cada uno de los conjuntos de planos cristalinos interviene en el espectro como un punto (si el detector es una placa fotográfica) o como un pico (si se utiliza como detector un contador proporcional, por ejemplo).

La intensidad de los puntos, o la altura de los picos (que en realidad son proporcionales a la intensidad de la radiación detectada), depende de la densidad superficial de átomos por plano cristalográfico. En la figura 12.23 se muestran los resultados obtenidos al difractar un monocrystal de oro, usando como detector una película, luego de una exposición de una hora. También se indican algunos de los planos cristalográficos.

En la figura 12.24 se presenta el resultado cuando se utiliza un detector proporcional. En los picos se anota los planos responsables de la difracción.

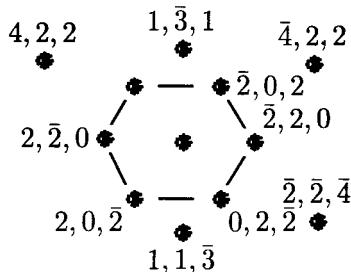


FIGURA 12.23. Patrón de difracción del oro (Departamento de Física Universidad Nacional de Colombia).

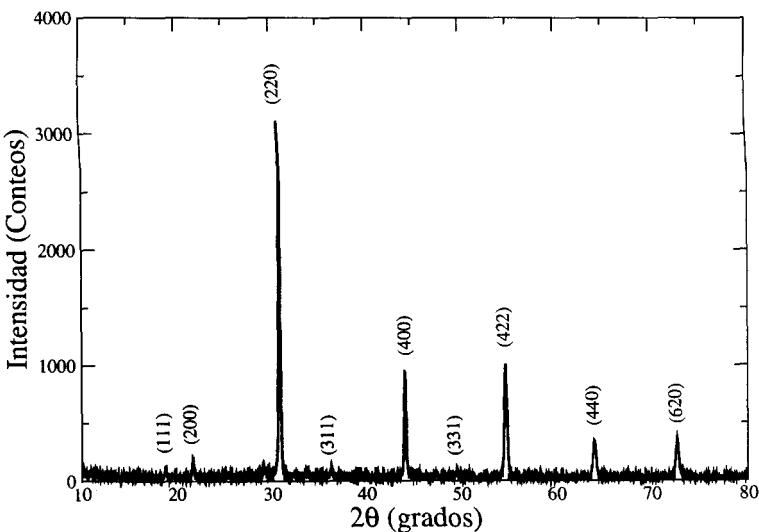
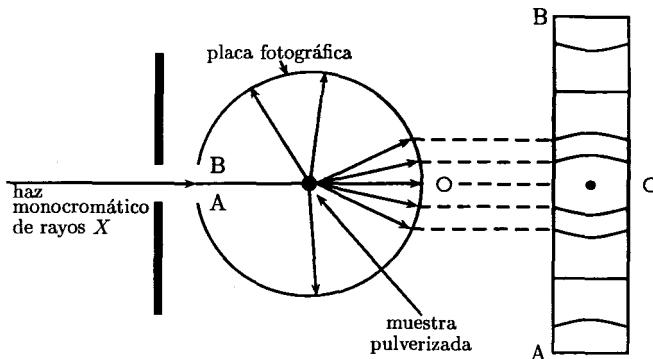


FIGURA 12.24. Patrón de difracción de rayos X de YSr_2SbO_6 , indicando algunos planos reflectores. Grupo de Física de Nuevos Materiales, Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia.

Una de las aplicaciones más útiles de los rayos X es su poder para la identificación de materiales. Cada substancia cristalina se caracteriza por su celda unitaria, la constante de red (o las magnitudes) de los

vectores a , b , c si es cualquiera de las estructuras dadas en la tabla 12.1 y los átomos que la componen, los cuales se distribuyen en los planos cristalinos según hemos visto anteriormente.



a. Esquema de una cámara de polvo para difractar rayos X .

b. Patrón de difracción de una muestra cristalina pulverizada.

FIGURA 12.25. Difracción de una muestra cristalina.

Para el proceso de identificación se utiliza el método de la cámara de polvo, el cual consiste en un capilar en donde la muestra cristalina se introduce *pulverizada*, y a una cierta distancia, se coloca una película fotográfica que rodea la muestra, figura 12.25a.

Como la muestra está pulverizada, lo cual es similar a tener una gran cantidad de cristalitos orientados perfectamente al azar, se producen todas las difracciones posibles debidas a todas las familias de planos cristalinos.

Los resultados experimentales que se obtienen se pueden apreciar en la figura 12.25b. El número de líneas, la intensidad relativa entre ellas, así como el espaciamiento entre las líneas (círculos en este caso) proporciona la suficiente información para lograr la identificación del material. De hecho, hay unas tablas internacionales que permiten hacer tal proceso. Es de notar que cada una de las líneas del patrón de difracción de la figura 12.25b. está cumpliendo completamente con la condición de Bragg, ecuación (12.3).

12.4 Imperfecciones cristalinas

En los cristales reales por lo general *no* se presentan la estricta periodicidad y perfección repetitiva de la celda unitaria. Sin embargo, desde el punto de vista práctico, si se tiene un cristal en donde el número de “problemitas” que hacen perder la perfección cristalina es menor que 10^{15} cm^{-3} , se puede considerar como una perfecta estructura cristalina.

Los motivos que causan la pérdida de la periodicidad genéricamente se han llamado “*imperfecciones cristalinas*” las cuales juegan un papel importante en las propiedades de los materiales.

Las imperfecciones cristalinas se han dividido en dos especies: *defectos puntuales* y *dislocaciones*. En la figura 12.26 se muestran gráficamente las subdivisiones de los defectos puntuales que son las *vacancias*, *impurezas substitucionales*, *impurezas intersticiales*.

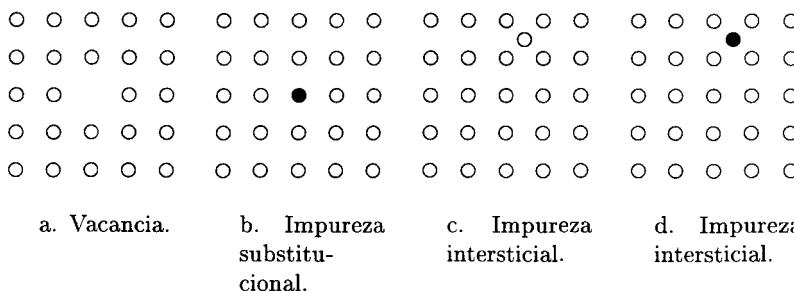


FIGURA 12.26. Diversos tipos de defectos puntuales.

Entre los defectos puntuales más comunes está la vacancia, que como su nombre lo indica, es la falta de un átomo en un sitio del cristal en donde debería encontrarse. Este tipo de defectos aumenta dramáticamente con la temperatura, pues al adquirir suficiente energía térmica, las vibraciones que pueden realizar los átomos llegan a ser tan amplias para que logren vencer la energía de enlace del cristal y abandonen el sitio cristalino.

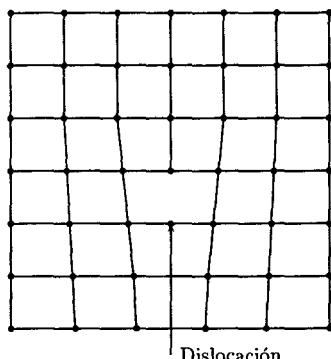
Otro tipo de defectos puntuales son las impurezas substitucionales, lo cual no es otra cosa que la substitución de un átomo diferente en un sitio cristalino lo cual influye marcadamente en las propiedades del cristal. Tal vez el mejor ejemplo sean los llamados semiconductores extrínsecos donde un cristal de silicio, por ejemplo, se dopa con aluminio, de tal manera que los átomos de aluminio se acomodan en sitios donde deberían estar los átomos de silicio, obteniéndose un semiconductor *extrínseco* tipo *P*.

En cuanto a las impurezas intersticiales (como se observa en las fi-

guras 12.26c. y 12.26d.), pueden ser de dos tipos si lo que ocupa el sitio intersticial es de la misma clase o no de los átomos que constituyen el cristal. Un ejemplo de este tipo de impurezas son los llamados “centros de color”, responsables de algunas propiedades ópticas de los materiales.

En cuanto a la dislocaciones, que tienen grandes repercusiones en las propiedades mecánicas de los materiales, tales como ductilidad, maleabilidad, plasticidad, etc., se subdividen en dos tipos: *dislocación de arista* y *dislocación helicoidal*.

En la primera de las mencionadas, (dislocación de arista), es como si un plano cristalino se perdiera (figura 12.27a.), ya que en la parte superior tenemos siete átomos mientras que en el inferior solamente seis, por ejemplo. La dislocación helicoidal (figura 12.27b.), se puede entender como si a un cristal perfecto se le hiciese un corte y por uno de los lados se intentase atornillarlo. Por lo general estos tipos de dislocaciones ocurren simultáneamente.



a. De arista

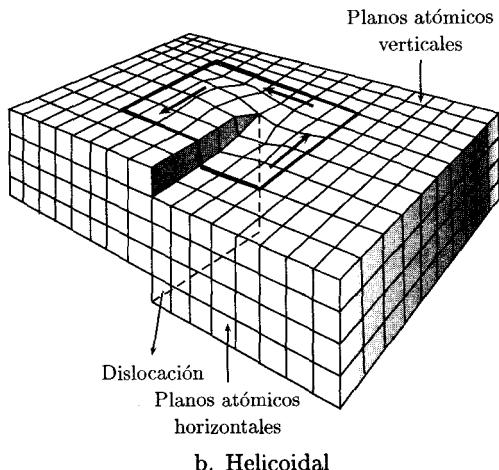


FIGURA 12.27. Dislocaciones.

12.5 Tipos de fuerzas que se presentan en los cristales

Tal como se había expresado en la introducción del presente capítulo, los sólidos cristalinos presentan una gran variedad de propiedades que se han estudiado experimentalmente, y se han encontrado razones teóricas para explicar su comportamiento.

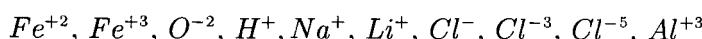
Muchas de las cualidades más protuberantes que presentan los sólidos

se deben al tipo de fuerzas internas en ellos, que logran que los materiales posean una estructura estable.

Las interacciones entre los átomos, iones, moléculas, electrones, etc., que suceden dentro de un cristal son responsables de las características cristalinas y reciben el nombre genérico de “*enlaces cristalinos*”. En este numeral estudiaremos, sin entrar en detalles teóricos complicados, los enlaces iónicos, covalentes, de Van Der Waals y metálicos, los cuales son los más comunes en la naturaleza.

12.5.1 Enlace iónico

Como es bien sabido, un ion es un átomo que ha perdido o ganado uno o varios electrones en sus capas más externas. Si el átomo gana un electrón, la carga electrónica se aumenta en una unidad, y se dice que es un ion negativo. Si el átomo admite más de un electrón, se habrá formado un ion tantas veces negativo como electrones “extraños” haya alojado en su capa externa. Por el contrario, si el átomo pierde electrones, la carga total atómica es positiva, y se forma un ion positivo, o tantas veces positivo como electrones de la capa más externa haya cedido este átomo. Algunos ejemplos de iones son:



Así entendidas las características fundamentales de un ion, es claro que un cristal iónico, o una estructura cristalina cuyo enlace es iónico, estará compuesto por iones distribuidos periódicamente en el espacio. La interacción preponderante en un cristal iónico es, entonces, la fuerza electrostática entre las cargas eléctricas de los iones a las distancias dadas por las constantes de red del cristal.

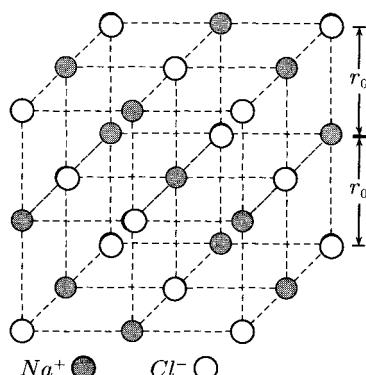


FIGURA 12.28. Estructura cúbica centrada en las caras del *NaCl*.

Uno de los casos más conocidos, y un ejemplo claro, es el cristal de cloruro de sodio ($NaCl$) en donde se repiten alternativamente un ion Na^+ con un ion Cl^- en una estructura cúbica centrada en las caras, como se puede ver en la figura 12.28.

En la configuración estable cristalina, un par de iones Cl^- y Na^+ deben interactuar de tal manera que exista un mínimo de energía potencial que al final el cristal tenga, en promedio, una situación que no cambie. La figura 12.29 muestra cómo es el potencial de un par cualquiera de iones *dentro* de la estructura cristalina.

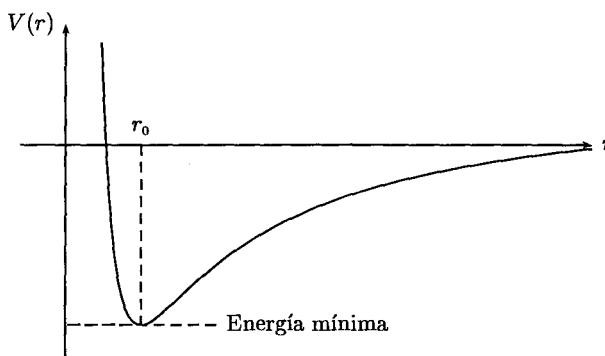


FIGURA 12.29. Curva de energía potencial para un sistema cristalino estable

De la gráfica se puede ver el sitio en donde la energía potencial es mínima, le corresponde el valor r_0 ; es decir, el de la constante de la red.

Esto significa que cuando la separación entre los componentes de un cristal es precisamente ésta, la situación cristalina es la más estable posible. Hacia la izquierda ($r < r_0$) la energía potencial aumenta llegando a un valor nulo, para luego volverse positiva a medida que r se vuelve cada vez más pequeño. Este resultado nos indica que es una zona repulsiva. Para valores de $r > r_0$ el comportamiento de la energía potencial está tomando en cuenta el hecho de que la atracción entre dos cuerpos disminuye con la distancia.

En los cristales iónicos no existen electrones libres (o tan débilmente ligados que ante un estímulo débil respondan fácilmente), y por tal motivo son pobres conductores de la electricidad, así como del calor.

Solamente cuando se someten a temperaturas muy altas se presenta la llamada “*conducción iónica*” (por medio de los iones y no de los electrones), ya que tanto los iones positivos como los negativos adquieren alguna energía cinética debido a la energía térmica suministrada. Como las fuerzas de atracción electrostática son bastante grandes, los cristales iónicos en general son duros y con un alto punto de fusión.

12.5.2 Enlace covalente

Uno de los enlaces más fuertes y que tiene su explicación en la teoría cuántica, es el enlace covalente. Este enlace resulta cuando un par de átomos por ejemplo, *comparten* dos electrones para formar un sistema de mayor estabilidad. En general, los espines de los electrones que se comparten se encuentran orientados antiparalelamente.

Este enlace también se llama “*enlace de valencia*” y en el siguiente ejemplo se verá por qué.

El cloro atómico (Cl) es poco estable y rápidamente se combina para formar la molécula de cloro (Cl_2), que es más estable que el cloro atómico. El cloro tiene siete electrones en su capa más externa, entonces, al combinarse con otro cloro atómico, lo hace compartiendo un electrón de cada átomo como se puede ver en la figura 12.30a.

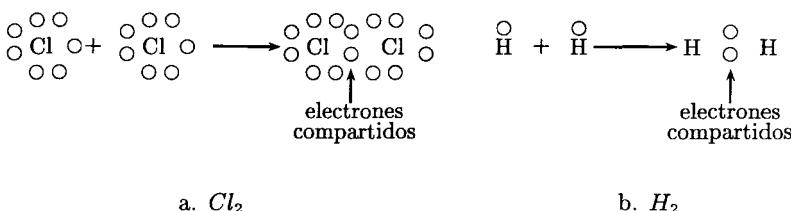
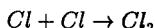


FIGURA 12.30. Enlace covalente.

Otro ejemplo, más sencillo, para entender la parte final de este numeral, es la formación de la molécula de hidrógeno. En la figura 12.30b. se ve que la estabilidad del H_2 se logra cuando los electrones (uno de cada hidrógeno) se sitúa entre los núcleos y están compartidos. La mayor probabilidad de encontrar los electrones en el H_2 siempre será en la línea que une los dos núcleos. Así que el hecho de estar los electrones entre los núcleos no solamente repercute en que la repulsión entre los protones disminuya, sino que, además, las direcciones en donde van a permanecer esos electrones son fijas y siempre a lo largo de la línea que une los núcleos.

Debido al rigor de la distribución electrónica en los sólidos covalentes, sus cualidades son de extrema rigidez, dureza y pobre conducción eléctrica. Además, casi todos los cristales covalentes son transparentes.

En el estado sólido el cristal covalente típico es el diamante, el cual cristaliza en una estructura cúbica centrada en las caras pero desplazada de tal manera que se forman tetraedros con átomos de carbono en

sus esquinas, las cuales comparten electrones con un átomo situado en el centro. En la figura 12.31 se puede ver la estructura cristalina del diamante como también el tetraedro elemental donde se da el enlace covalente.

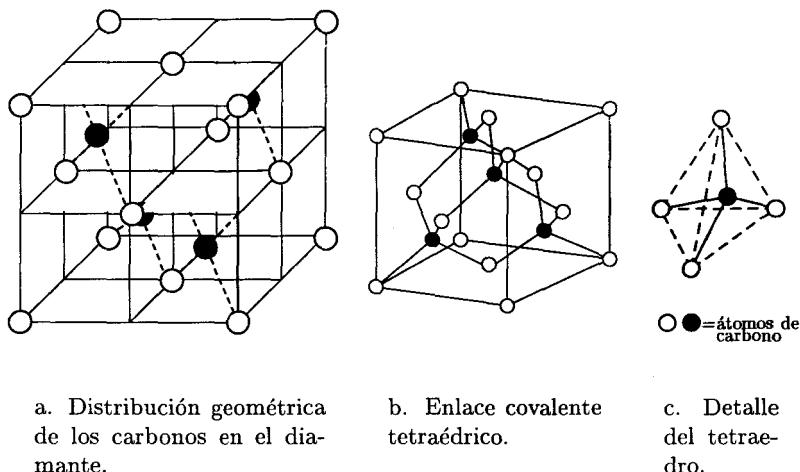


FIGURA 12.31. Estructura cristalina del diamante.

Otros ejemplos, abundantes, por demás, en el estado sólido son los materiales semiconductores, entre los cuales el silicio ha sido uno de los más estudiados y, por consiguiente, empleado en aplicaciones tecnológicas verdaderamente sorprendentes.

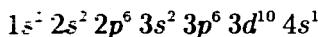
12.5.3 Enlace de Van der Waals

Cuando en los sitios cristalinos se ubican moléculas en vez de átomos o iones, se dice que se tiene un *cristal molecular*. Estos son posibles gracias a que existen fuerzas de atracción de muy corto alcance, que varían como $1/r^7$. Estas fuerzas son llamadas de “Van der Waals”.

Todos los gases nobles al solidificar cristalizan como sólidos moleculares, también lo hacen el CH_4 y el CO_2 (metano y dióxido de carbono respectivamente), así como otros compuestos orgánicos. Su principal característica es un bajo punto de fusión, lo cual se entiende con facilidad ya que al absorber calor, los constituyentes del cristal principian a oscilar, y con poca energía térmica se puede hacer que la amplitud de oscilación sea lo suficientemente grande como para no quedar ligados por las fuerzas de corto alcance de Van der Walls.

12.5.4 Enlace metálico

Existen ciertos átomos que en su estructura atómica, en las últimas capas, poseen electrones débilmente ligados. El cobre, por ejemplo, tiene la siguiente estructura electrónica²:



El electrón solitario de la subcapa 4s puede con bastante facilidad liberarse del átomo de cobre. En el sodio también hay un electrón en una subcapa *s*, esta vez la 3s. Lo mismo ocurre con la plata, el hierro, el aluminio, el oro, etc.

Se puede generalizar, entonces, afirmando que los átomos de los materiales que llamamos “metales” se caracterizan por tener electrones pobemente atados al conjunto atómico.

Cuando muchos de esos átomos se acercan para formar una estructura cristalina, todos esos electrones que pueden escapar con facilidad de sus respectivos átomos son responsables de que el cristal adquiera una configuración estable. En efecto, estos electrones se distribuyen por todo el espacio cristalino formando una especie de gas de electrones que se pueden mover con mucha facilidad (como las partículas en un gas). En otras palabras, esos electrones actúan como un “pegante” ya que su carga negativa distribuida a lo largo del volumen del cristal disminuye la fuerza de repulsión de los iones que se ubican en los sitios cristalinos. Pero atención: en los cristales iónicos se presentan iones positivos y negativos alternadamente en el cristal.

En los metales, lo que tenemos es la distribución de un solo tipo de ión en donde las repulsiones electrostáticas son completamente superadas por todos los electrones que forman el “gas”. Esta diferencia es importante: precisamente la casi ausencia de ligazón de los electrones que conforman el “gas”, es la razón de que los metales respondan tan bien a campos eléctricos (muy buenos conductores eléctricos) y a gradientes de temperaturas (excelentes conductores de calor). De manera análoga, también puede ser explicada la no transparencia de los metales a la luz visible.

12.6 Propiedades eléctricas de los sólidos

Ya es un hecho de la vida cotidiana el saber qué materiales son utilizables para la conducción eléctrica y cuáles son más apropiados en la construcción de dispositivos aislantes, etc. Por ejemplo, el alambre de cobre

²En el capítulo 10, sección 10.1.3, se explicó qué significan las letras *s*, *p* y *d*. El supraíndice en cada una de estas letras indica el número de electrones en cada uno de los correspondientes estados de momento angular.

se emplea fundamentalmente para la conducción de corriente eléctrica mientras que la porcelana, o mica, o algunos plásticos, son puestos para evitar que se presenten accidentes en la manipulación de la electricidad. Estos últimos son aislantes.

En el presente numeral trataremos de manera general cómo los sólidos pueden clasificarse en relación con una respuesta cuando han sido estimulados eléctricamente de alguna manera, y cómo pueden explicarse esas mismas propiedades.

12.6.1 Conductividad eléctrica en los metales

Según lo visto en un numeral anterior el enlace metálico está conformado por electrones esencialmente libres que deambulan por la estructura cristalina y que en promedio establecen un equilibrio electrostático con los iones positivos que se fijan en los puntos reticulares del cristal. Se afirma también que estos electrones conforman una especie de "gas de electrones" que responden con bastante facilidad cuando se aplica un campo eléctrico en el metal al cual se encuentran ligados. Estudiaremos los mecanismos de conducción según una descripción clásica que para el caso metálico y, desde el punto de vista macroscópico, funciona bastante bien.

De los cursos de física general se conoce que una corriente eléctrica queda establecida cuando partículas eléctricamente cargadas se ponen en movimiento. La dirección de la corriente, según las convenciones adoptadas, será paralela o antiparalela a la dirección del movimiento de las cargas. En el gas de electrones en el metal, fijemos la atención en un electrón particular, suponiendo que no haya un campo eléctrico externo aplicado al material.

Cualquier partícula que constituya un gas se mueve perfectamente al azar, haciendo que su *desplazamiento neto* o *desplazamiento efectivo* sea nulo. Lo anterior puede verse en la figura 12.32 en donde el electrón particular es el sombreado. Los otros electrones estarán realizando movimientos similares.

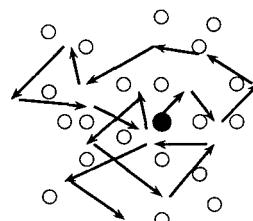


FIGURA 12.32. Movimiento de una partícula en un gas sin excitación externa.

Estas trayectorias “azarosas” se deben a las múltiples y continuas dispersiones que sufre el electrón, ya sea con los otros electrones del gas o bien con la red cristalina. El hecho de que el desplazamiento neto sea nulo hace entonces que obviamente *no haya una corriente eléctrica* que pueda ser medida macroscópicamente. Al aplicar una diferencia de potencial en el metal **aparecerá una corriente** que se puede explicar de la siguiente manera y con ayuda de la figura 12.33. Una vez se haya aplicado el campo eléctrico, cada electrón estará sujeto a una fuerza cuya magnitud y dirección están bien establecidas. El electrón podrá ahora sufrir las dispersiones explicadas anteriormente, pero cada vez que salga de un proceso de dispersión particular su trayectoria estará subordinada a la fuerza sentida por la partícula debido al campo externo. En últimas, esto ocasionará que el electrón logre tener un desplazamiento neto en la unidad de tiempo, es decir, se ha establecido una corriente eléctrica.

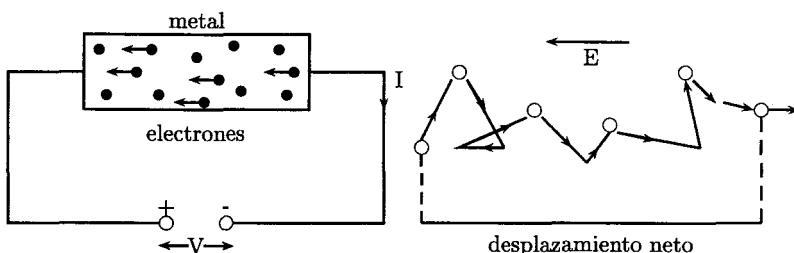


FIGURA 12.33. Al aplicar un campo eléctrico, los electrones aunque se dispercen logran un desplazamiento neto.

Una manera precisa de medir los efectos de la aplicación de una diferencia de potencial en un metal es a través de la ley de Ohm:

$$I = \frac{V}{R} \quad (12.4)$$

en donde I es la corriente que circula cuando la diferencia de potencial eléctrico V se aplica. R es una medida macroscópica de la facilidad con que fluye la corriente I , y se llama resistencia eléctrica.

Si el material que estamos analizando posee las siguientes dimensiones: A sección transversal y L longitud, podemos escribir las siguientes relaciones:

$$J = \frac{I}{A} \quad E = \frac{V}{L} \quad R = \frac{L\varrho}{A} \quad (12.5)$$

donde J es la densidad promedio de corriente (corriente por unidad de área); E es el campo eléctrico dentro del material, el cual hemos supuesto constante y homogéneo (¿por qué?); y ϱ es la resistividad del material.

Si definimos la *conductividad eléctrica* σ como el inverso de la resistividad ρ , la ley de Ohm (ecuación (12.4)) se convierte en:

$$J = \sigma E \quad (12.6)$$

la cual es perfectamente independiente de las dimensiones (tamaño) del material bajo estudio. La conductividad eléctrica σ tiene unidades de $ohm^{-1} m^{-1}$ en el sistema internacional de unidades.

Hasta el momento lo que hemos hecho ha sido tomar la ley de Ohm y reescribirla adecuadamente, pero siempre recurriendo a parámetros macroscópicos, sin entrar a analizar los mecanismos microscópicos que caracterizan la conducción eléctrica.

Analicemos la situación de un electrón particular:

$$\vec{F}_{electrón} = \vec{F}_{eléctrica} + \vec{F}_{colisiones} \quad (12.7)$$

La anterior ecuación nos dice que la fuerza total que actúa sobre el electrón debe ser la que suministra el campo eléctrico, más una fuerza debida a las múltiples dispersiones que sufre el electrón, tal como se ilustró en la figura 12.33. El término de colisiones impide que la partícula acelere como lo haría en el caso de que estuviese sometida únicamente a la fuerza eléctrica, y es ocasionada por el medio que tiene que atravesar el electrón en su camino. En este sentido el término de colisiones proporciona una situación muy parecida a una fricción, y por tal razón se denomina a veces "fuerza de fricción". Sin embargo, debe entenderse el significado de tal término de acuerdo con las explicaciones anteriores.

Veamos qué factores pueden intervenir en el término de colisiones. Mientras mayor sea la velocidad que el electrón alcance, tanto más probable será que sufra una dispersión bien sea por otro electrón o por algún elemento de la red cristalina. Por tanto $F_{colisión}$ es proporcional a la velocidad del electrón, que llamaremos v .

Podemos ahora tomar un promedio estadístico del tiempo que pasa entre colisión y colisión del electrón al cual le estamos siguiendo la pista. Llamemos τ ese *tiempo de colisión* y analicemos lo siguiente: si el electrón sufre muchas dispersiones por unidad de tiempo (τ pequeño) se presentará mayor *resistencia* al movimiento de la partícula. Si por el contrario muy de vez en cuando el electrón se dispersa (τ grande) habrá menor oposición para el movimiento del electrón. Por lo tanto, $F_{colisión}$ es proporcional a $1/\tau$. Entonces, de acuerdo con lo expuesto en el párrafo anterior:

$$F_{colisión} \propto \frac{v}{\tau} \quad (12.8)$$

para que las unidades sean correctas, la constante de proporcionalidad debe ser igual a $-m$, donde el signo está dando el criterio físico de una oposición al movimiento de la partícula.

La ecuación (12.7) adquiere entonces la siguiente forma:

$$m \frac{dv}{dt} = -eE - \frac{mv}{\tau} \quad (12.9)$$

donde m es la masa del electrón. (En realidad la masa de la ecuación anterior no es la masa del electrón común, sino una “*masa efectiva*” m^* que se caracteriza como la inercia que presenta el electrón en el tránsito por la red cristalina. Sin embargo en este momento no es muy importante tal distinción y en muchos casos m y m^* no varían drásticamente).

Como es bien sabido, en un medio en donde se presenta fricción, una partícula sujeta a una fuerza no incrementa indefinidamente su velocidad, sino que a partir de una cierta velocidad terminal v_a , se mueve con velocidad constante. En este caso tal velocidad se llama “*velocidad de arrastre*” (velocidad con la cual el campo eléctrico logra arrastrar a los electrones por entre la red cristalina) y se cumple, en ese caso, que $dv_a/dt = 0$; y por lo tanto la ecuación (12.9) se convierte en $mv_a/\tau = -eE$ de donde:

$$v_a = \frac{-eE\tau}{m} \quad (12.10)$$

Una vez obtenida la velocidad de arrastre, podemos calcular la densidad de corriente en el metal:

$$J = -eNv_a \quad (12.11)$$

donde N es el número de electrones por unidad de volumen, es decir, $-eN$ es la carga eléctrica por unidad de volumen que se transporta con una velocidad v_a . Por tanto se puede escribir:

$$J = -eNv_a = -eN \frac{-eE\tau}{m} = \frac{e^2 N \tau E}{m} \quad (12.12)$$

y debido a la ley de Ohm podemos concluir que:

$$\sigma = \frac{e^2 N \tau}{m} \quad (12.13)$$

es decir, se ha encontrado una expresión para la conductividad en términos de la densidad de electrones y el tiempo de colisión τ , a partir de consideraciones microscópicas, ya que se le siguió la pista a un electrón particular.

La ecuación (12.13) nos dice que σ es proporcional a N lo cual es consistente, ya que si hay un mayor número de portadores de carga, habrá mayor corriente, y que σ es proporcional a τ , lo cual también es correcto ya que si τ tiende a cero quiere decir que el número de

dispersiones por unidad de tiempo tiende a infinito y el electrón no tiene desplazamiento neto; y si τ tiende a infinito el número de dispersiones por unidad de tiempo tiende a cero.

Se puede pensar que los electrones se mueven con una velocidad promedio (v) entre los choques que se suceden con un tiempo de colisión τ . Lo anterior nos permite definir un “*camino libre medio*”, el cual se puede entender como el espacio que puede recorrer un electrón sin que sufra alguna dispersión. Así podemos escribir:

$$l = \langle v \rangle \tau \quad (12.14)$$

donde l es el camino libre medio el cual representa un parámetro importante para cada material.

La conductividad en términos de la anterior variable se escribe como:

$$\sigma = \frac{e^2 N l}{m \langle v \rangle} \quad (12.15)$$

En la tabla³ 12.2 aparecen σ , τ , l , N para algunos metales.

TABLA 12.2. Algunas propiedades de los metales.

Metal	$\sigma((\Omega m)^{-1})$	$N(m^{-3})$	$\tau(s)$	$l(\text{\AA})$
Litio	1.07×10^7	4.6×10^{28}	0.9×10^{-14}	110
Sodio	2.11×10^7	2.5×10^{28}	3.1×10^{-14}	350
Potasio	1.30×10^7	1.3×10^{28}	4.3×10^{-14}	370
Cobre	5.88×10^7	8.45×10^{28}	2.7×10^{-14}	420
Plata	6.21×10^7	5.85×10^{28}	4.1×10^{-14}	570
Oro	4.55×10^7	5.90×10^{28}	2.9×10^{-14}	410

La resistividad ϱ del material en particular será dada por:

$$\varrho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m \langle v \rangle}{e^2 N l} = \frac{m}{e^2 N \tau} \quad (12.16)$$

Para finalizar el presente numeral pondremos de presente que σ (ó ϱ) depende de la temperatura, y que la dependencia de σ con T para semiconductores y metales, por ejemplo, son drásticamente distintas, cosa importante que permite diagnosticar y caracterizar experimentalmente las propiedades eléctricas de este par de materiales.

³Tomado de A. Omar- Elementary Solid State Physics- Adisson Wesley, 1975.

12.7 Comportamiento de los electrones en los cristales

Como se dijo al principio del presente capítulo, una estructura cristalina está caracterizada por una celda unitaria en donde se encuentra el motivo del cristal, y una red cristalina en la cual, las operaciones de translación dados por la ecuación (12.1), dejan cualquier situación física netamente indistinguible de la original. Tales operaciones de traslación se representan por medio de $\vec{T}_n = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$, donde $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ son los vectores base de la celda unitaria y n_1, n_2, n_3 números enteros.

De una manera completamente general podemos afirmar que todas las interacciones posibles en un cristal pueden ser representadas por una energía potencial $V(\vec{r})$ (la forma explícita de $V(\vec{r})$, por el momento, no nos importa).

Teniendo en cuenta lo dicho anteriormente, la calidad de sólido cristalino debe ser representada por medio de la siguiente relación:

$$V(\vec{r} + \vec{T}_n) = V(\vec{r}) \quad (12.17)$$

es decir, la energía potencial de un electrón en una estructura cristalina *posee la misma periodicidad del cristal*, lo que hace posible que un electrón situado en \vec{r} o en $\vec{r} + \vec{T}_n$ experimente exactamente las mismas interacciones. Es decir, los puntos del espacio marcados con \vec{r} o $\vec{r} + \vec{T}_n$ son *físicamente indistinguibles* para un corpúsculo físico (electrón, etc.) dentro de una estructura cristalina.

¿Qué incidencias tiene esta periodicidad sobre las características físicas?

Si la situación, luego de una operación de translación, es indistinguible de la original, la probabilidad de encontrar la partícula debe ser *idéntica* en ambos puntos del espacio. Esto es, la función de onda que describe el movimiento de campo material que acompaña al movimiento del electrón debe satisfacer:

$$|\varphi(\vec{r} + \vec{T}_n)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2 \quad (12.18)$$

Por lo tanto $\varphi(\vec{r} + \vec{T}_n)$ y $\varphi(\vec{r})$ deben diferir solo en un factor de fase. Formalmente puede ser demostrado que el factor es $e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}_n}$, quedando establecido, de esta manera, el *teorema de Bloch*:

$$\varphi(\vec{r} + \vec{T}_n) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}_n} \varphi(\vec{r}) \quad (12.19)$$

donde \vec{k} es el vector de onda asociado a la partícula mediante la relación de De Broglie $\vec{p} = \hbar\vec{k}$.

Otra manera de establecer el teorema Bloch (fundamental en el estudio teórico de los sólidos cristalinos) es la siguiente. Sea:

$$\varphi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}U(\vec{r}) \quad (12.20)$$

la función de onda que contiene toda la información de un electrón en un cristal. Se supone que la función de onda para el electrón en un sólido es una onda plana ($e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$) modulada por una función $U(\vec{r})$ tal que:

$$U(\vec{r} + \vec{T}_n) = U(\vec{r}) \quad (12.21)$$

es decir, U debe tener la misma periodicidad del cristal.

Para ver la incidencia tanto del teorema de Bloch como de la relación (12.17) sobre alguna variable física importante (la energía por ejemplo), veamos el siguiente modelo unidimensional de un cristal, ideado por R. de L. Kronig y W. G. Penney el cual nos lleva al concepto de bandas de energía electrónicas.

El modelo propuesto, que recibe el nombre de “*modelo de Kronig-Penney*”, está esquematizado en la figura 12.34, donde V_0 representa el poder del potencial generado por un átomo dentro del cristal unidimensional, b es el alcance y $b + c$ es la constante de red de la estructura cristalina.

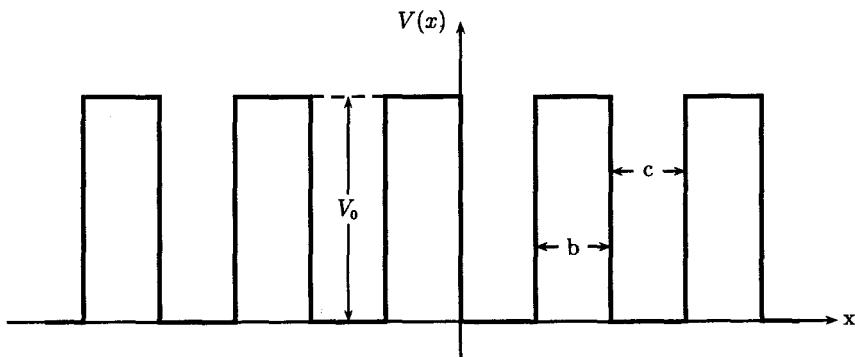


FIGURA 12.34. Potencial cristalino periódico unidimensional en el modelo de Kronig-Penney.

Se trata ahora de resolver la ecuación de Schrödinger con este potencial. Afortunadamente se puede hallar una solución analítica con base en los ejemplos desarrollados en el capítulo 7 y el teorema de Bloch que proporcionará los valores propios de la energía del problema.

Definiendo las siguientes cantidades:

$$\alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad \beta = \left(\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (12.22)$$

las funciones de onda en la región libre de potencial y dentro de las barreras vendrán dadas por:

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{ix} - Be^{-ix} & \text{si } b < x < 0 \\ Ce^{ixa} + De^{-ixa} & \text{si } 0 < x < c \end{cases} \quad (12.23)$$

lo cual nos lleva a la siguiente condición (para su derivación, consulte el apéndice E):

$$\cos(k a) = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \operatorname{senh}(\beta b) \operatorname{sen}(\alpha c) + \cosh(\beta b) \cos(\alpha c) \quad (12.24)$$

donde $a = b + c$. La parte de la derecha viene a ser una función explícita de la energía a través de α y β , involucradas en las funciones hiperbólicas y sinusoidales indicadas, como también lo es el factor del lado izquierdo de la ecuación (12.24). Lo anterior nos permite escribir formalmente:

$$F(E) = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \operatorname{senh}(\beta b) \operatorname{sen}(\alpha c) + \cosh(\beta b) \cos(\alpha c) \quad (12.25)$$

Lo importante de la ecuación anterior es que a pesar de que E puede tomar cualquier valor, solamente aquellos que cumplan la condición $-1 \leq F(E) \leq 1$ tendrán sentido físico, ya que la solución del problema está condicionada por la relación:

$$F(E) = \cos k a \quad (12.26)$$

Aquellos valores de la energía que caen dentro de las condiciones exigidas por las ecuaciones (12.24) y (12.26) son los que formarán las denominadas *bandas de energía electrónicas*.

En la figura 12.35 se bosqueja la forma general de la relación $F(E)$. Es importante notar que aparecen alternadamente regiones de energía tanto *permitidas* (con sentido físico) como *prohibidas* (aquellos valores de E que no cumplen la condición (12.26)).

En la figura 12.36 se muestra el resultado de calcular $F(E)$ con los siguientes valores: $V_0 = 8 \text{ eV}$, $b = 0.05 a_0$ y $c = a_0$ (a_0 es el radio de Bohr).

Se puede apreciar la existencia de cinco bandas permitidas de energía, la primera de las cuales es bastante estrecha, ya que solo tiene más o menos 0.05 eV , mientras que la última banda es la más ancha, con una extensión de 4.25 eV . La parte final de la gráfica $F(E)$ aumenta en valor absoluto. Desde el punto de vista físico este comportamiento no es importante ya que solo nos interesa el estudio de estados energéticos ligados ($E < V_0$) puesto que si $E \geq V_0$ los posibles valores energéticos

varían de manera continua ya que el movimiento de la partícula no está restringido a una región finita del espacio.

Una anotación muy importante es que ya no se puede hablar estrictamente de unos niveles discretos y muy bien definidos como en el caso atómico. Las bandas de energía permitidas tienen un ancho dado, y en ese rango determinado se puede afirmar que la energía varía continuamente, ya que la cantidad de valores posibles de energía por intervalo de energía es un número enorme (del orden del número de Avogadro). Esta última explicación es la que permite afirmar que en los sólidos cristalinos los niveles energéticos están distribuidos en bandas casi continuas.

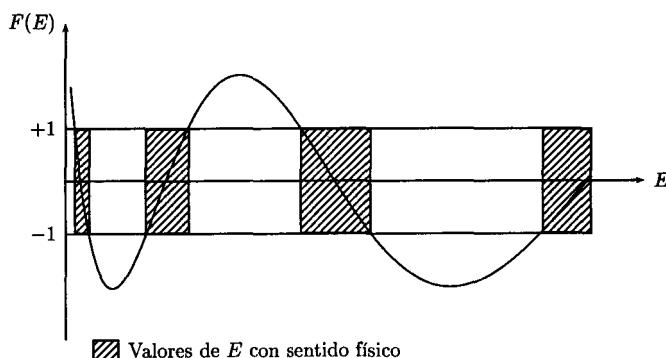


FIGURA 12.35. Aspecto general de la función $F(E)$. Se muestran los límites $+1$ y -1 impuestos por la ecuación (12.26) y los valores de E con sentido físico.

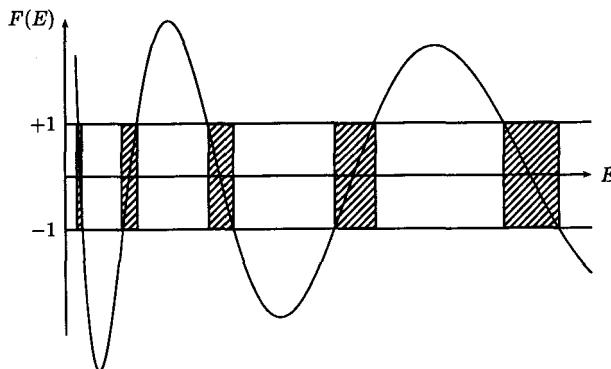


FIGURA 12.36. Bandas de energía en el modelo de Kronig-Penney cuando $V_0 = 8 \text{ eV}$, $b = 0.05 a_0$ y $c = a_0$ (a_0 es el radio de Bohr).

En la figura 12.37 se aclara un poco la formación de estas bandas de energía electrónicas. Sabemos que en un átomo aislado la energía po-

tencial tiene la forma mostrada en la figura 12.37a., y en la misma escala podemos pintar los niveles $1s$, $2s$, $2p$, $3s$, ... etc. Ahora bien: supongamos que se unen dos átomos de los anteriores para formar una molécula. El potencial se modificará según lo mostrado en la figura 12.37b. y los niveles de energía de los átomos aislados se situarán uno muy cerca del otro para formar los niveles moleculares $1s$, $2s$, $2p$, ... etc., pero existirá un pequeño ancho en esos niveles.

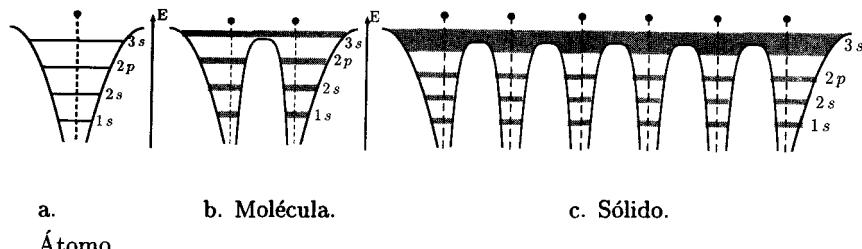


FIGURA 12.37. Bandas de energía electrónicas.

Ya cuando se han unido muchos átomos para formar un sólido, como se ve en la figura 12.37c., se habrá establecido una estructura casi continua de niveles energéticos. Tales estructuras son *las bandas de energía*.

Cada sólido cristalino posee una distribución energética particular en bandas de energía, así como cada átomo posee niveles energéticos particulares.

En los materiales sólidos la estructura de bandas caracteriza las propiedades eléctricas y ópticas más importantes como son la conducción eléctrica y las absorciones de radiación electromagnética.

Para entender mejor lo anterior veamos el siguiente ejemplo: una partícula libre posee una energía total igual a la energía cinética, cuyo valor está dado por:

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (12.27)$$

y que de acuerdo con la relación de De Broglie $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, siendo \vec{k} el vector de onda, se convierte en:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (12.28)$$

Por consiguiente E es proporcional a k^2 , lo cual muestra la dependencia cuadrática de la energía con respecto a k . Es decir, con la cantidad de movimiento de la partícula.

Se puede ver claramente que no existiendo ninguna restricción sobre el valor que puede tomar k , tampoco existirá restricción sobre el valor de la energía de la partícula. Por consiguiente, *para una partícula libre existe una sola banda de energía que varía continuamente como k^2* . En la figura 12.38(a) se observa la dependencia de la energía con respecto a k para la partícula libre.

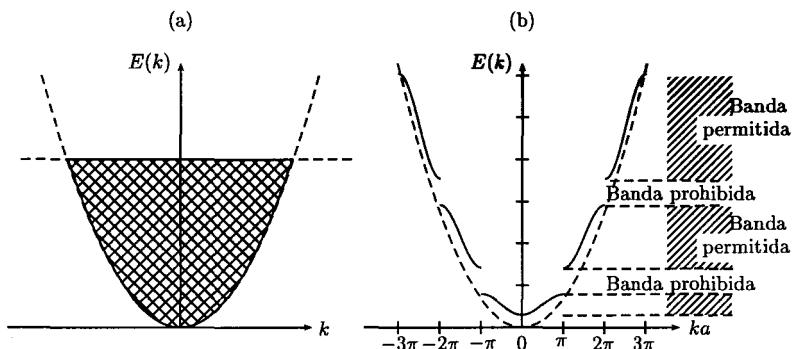


FIGURA 12.38. (a) Banda de energía continua para una partícula libre; (b) dependencia de la energía con la cantidad de movimiento en el modelo de Kronig-Penney y las bandas permitidas y prohibidas así como su ancho energético.

Si volvemos al modelo de Kronig-Penney, recordando que:

$$\cos(ka) = F(E) \quad -1 \leq F(E) \leq 1 \quad (12.29)$$

y si tabulamos los posibles valores de la energía satisfechos por tal relación en términos del vector de onda k , los resultados que se obtienen se encuentran resumidos en la figura 12.38(b).

En un sólido real las interacciones electrostáticas que se dan entre los electrones con el núcleo y entre ellos mismos hacen que los niveles de energía que puedan ocupar sean en general del aspecto de la figura 12.38(b). Los posibles niveles energéticos van siendo ocupados por los electrones de tal manera que se cumpla el principio de *exclusión de Pauli* y, en general, se pueden presentar cuatro configuraciones que se pueden ver en la figura 12.39.

De acuerdo con la figura 12.39, tenemos siempre tres bandas de energía, (el número depende del cristal en particular), y faremos algunas definiciones para continuidad de la discusión.

La última banda (de nivel energético más alto) se llama “*banda de conducción*”, mientras que la banda de energía inmediatamente inferior se llama “*banda de valencia*”. El intervalo energético entre el tope de la banda de valencia y el fondo de la banda de conducción recibe el

nombre de “*brecha de energía prohibida*” ΔE (figura 12.40). Con estas definiciones veremos cómo las gráficas de la figura 12.39 caracterizan de una manera adecuada las propiedades eléctricas de los sólidos.

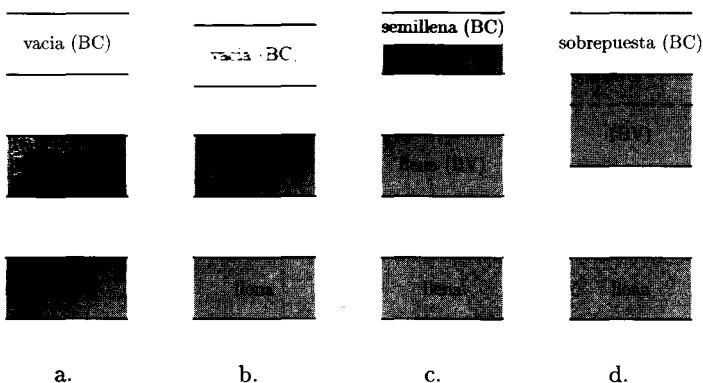


FIGURA 12.39. Posibles configuraciones en las bandas de energía electrónicas.
BC= banda de conducción; BV= banda de valencia.

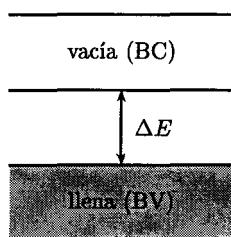


FIGURA 12.40. Brecha de energía prohibida.

Así, los materiales *aislantes* tienen una banda de valencia *completamente llena* (no pueden ubicar más electrones en ella), mientras que la banda de conducción se encuentra *completamente desocupada* (no hay electrones situados en los niveles energéticos permitidos de la banda de conducción). Además, la *brecha de energías prohibidas* ΔE es bastante grande.

Por consiguiente no hay electrones disponibles en la banda de conducción y así se aplique un campo eléctrico muy grande, no se logra la circulación de corriente eléctrica.

En los buenos aislantes el valor de ΔE es del orden de 3 a 6 eV. Por ejemplo el diamante posee una brecha de energía de 5.3 eV.

Podría pensarse que si se suministra bastante energía térmica sería posible que un electrón pudiese pasar de la *BV* (banda de valencia) a

la BC (banda de conducción). Sin embargo la brecha es tan grande que antes de lograrse tal efecto el material ¡estaría fundido! ya que:

$$E \approx k_B T \quad E = 6 \text{ eV} \quad T \approx \times 10^4 \text{ K}$$

donde k_B es la constante de Boltzmann y T la temperatura absoluta.

Además, la resistencia aumenta con la temperatura, ya que si T crece las oscilaciones de los átomos alrededor del punto de equilibrio aumentan, y si existiesen electrones en la BC , éstos serían dispersados por el efecto anterior, y la corriente fluiría con mayor dificultad. Por lo tanto, las excitaciones térmicas no contribuyen a un aumento de los electrones en la BC .

En los materiales semiconductores las bandas de energía electrónicas están compuestas por una banda de valencia *completamente llena* y una banda de conducción *totalmente desocupada*; pero *la brecha de energía prohibida es bastante pequeña* (figura 12.41). En efecto, ΔE posee valores típicos entre 0.1 y 2.5 eV para un amplio número de materiales semiconductores.

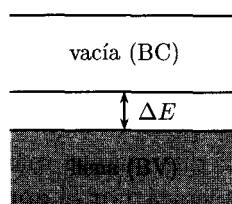


FIGURA 12.41. Brecha de energía para materiales semiconductores.

Uno de los mecanismos de conducción típicos en los semiconductores es la excitación térmica. Realmente, la mejor manera de caracterizar a un semiconductor es por su aumento en la conductividad con la temperatura, hecho que solo se presenta en ellos.

La explicación es relativamente sencilla, ya que si la energía que adquiere un electrón por efecto del aumento de la temperatura es mayor o igual a ΔE entonces tal electrón puede pasar de la BV a la BC y por tal motivo contribuir a la corriente eléctrica que puede estar circulando en el material.

Cuando se aplica un campo eléctrico a un semiconductor, los electrones pueden también adquirir suficiente energía del campo como para poder pasar a la BC , pero por lo general los valores de estos campos deben ser bastante altos, y los fenómenos físicos son más complicados aún⁴.

⁴Se puede presentar, por ejemplo, el efecto Zenner.

Existen algunos materiales semiconductores bastante importantes llamados materiales “fotoconductores” y de acuerdo con su nombre, se puede intuir que cuando interactúan fotones de alguna frecuencia especial, pueden incrementar la conducción siempre y cuando la energía del fotón incidente (el cual será absorbido por el material) logre comunicarle al electrón en la banda de valencia suficiente energía como para poder llegar a la banda de conducción. En la figura 12.42 se aprecia este efecto de fotoconducción.

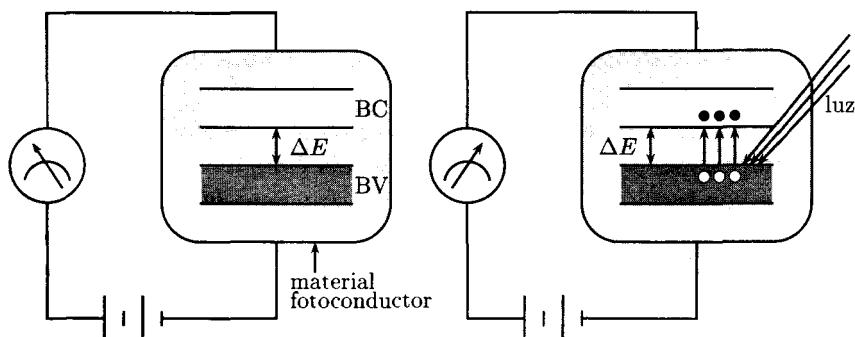


FIGURA 12.42. Mecanismo para la fotoconducción en materiales semiconductores.

Es claro de la figura 12.42 que cuanto más intensa sea la luz, mayor corriente circulará y se detectará por el amperímetro del circuito. Debe darse cuenta de que tales materiales son ampliamente empleados como *fotómetros*.

Obviamente la aplicación de los semiconductores cubre una gama muy amplia, y en las referencias bibliográficas encontrará textos y artículos dedicados exclusivamente a los temas de la aplicabilidad tecnológica de estos materiales.

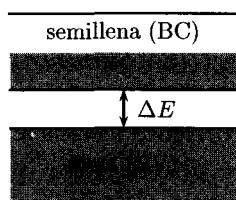


FIGURA 12.43. Banda de conducción semillena para materiales conductores.

En los materiales *conductores* se pueden presentar dos tipos de situaciones: en la primera de ellas la banda de valencia está *completamente*

llena mientras que la de conducción posee niveles energéticos ocupados por electrones, pero *no la llenan en su totalidad* (figura 12.43). Estos últimos electrones se encuentran débilmente ligados y si se le aplica un campo eléctrico, estos portadores de carga responden sin casi ninguna resistencia eléctrica.

Otra situación que se puede presentar es aquella que se muestra en la figura 12.44a... La banda de valencia está *completamente llena*, la banda de conducción está *completamente vacía*, pero ambas bandas se recubren (figura 12.44b.).

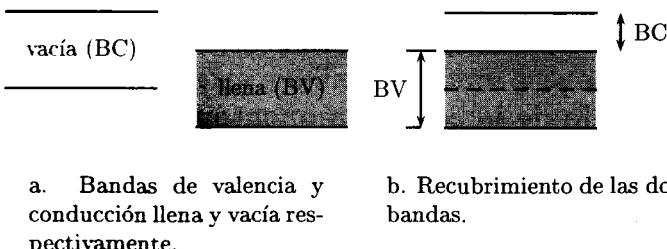


FIGURA 12.44. Recubrimiento de las bandas de valencia y de conducción.

Al recubrirse las bandas de energía, lo que equivale a que no se presente un intervalo de energía prohibida ΔE , los electrones que llenan completamente la banda de valencia van a encontrarse con la posibilidad de ocupar niveles energéticos permitidos y desocupados en la banda de conducción. Por consiguiente, al final, se encontrará un mayor número de niveles de energía que de electrones, lo cual hará que en presencia de un campo eléctrico externo presente, sin mucha resistencia, conducción de electrones. Se acostumbra a llamar a los materiales conductores por recubrimiento de bandas “semimetales”.

12.8 Vibraciones de la red cristalina

Uno de los movimientos más espontáneos dentro de un cuerpo sólido cristalino son las vibraciones que los átomos que forman el cristal pueden efectuar alrededor de los puntos de equilibrio. Como ya vimos anteriormente, esos puntos de equilibrio son precisamente los puntos reticulares de la red en donde se sitúan los motivos para formar un cristal.

Las oscilaciones que realiza cada elemento dentro del sólido pueden

ser efectuadas en las tres dimensiones y, en general, se clasifican como ondas *longitudinales* y *transversales*, según la dirección de propagación del movimiento ondulatorio colectivo.

En la mayoría de los casos, las oscilaciones de la red logran explicar las propiedades térmicas de los sólidos, ya que al aproximar las oscilaciones (o vibraciones) generales a oscilaciones armónicas fue posible explicar el comportamiento del calor específico de los sólidos a bajas temperaturas. El transporte de calor por los materiales también se explica gracias a las vibraciones cristalinas, así como las propiedades acústicas, ya que las frecuencias de oscilación dentro de los materiales corresponden al rango de frecuencias del sonido y del ultrasonido.

El estudio teórico de todos estos problemas enunciados puede llegar a ser muy complejo; en lo que sigue, examinaremos casos conceptual y matemáticamente solubles utilizando aproximaciones muy plausibles desde el punto de vista físico.

12.8.1 Modelo de la cadena monoatómica

Supongamos un cristal cúbico simple en donde los átomos que forman un plano cristalino perpendicular al eje y , por ejemplo, oscilan todos con alguna amplitud U_n ; y los planos siguientes, tanto a la derecha como a la izquierda, oscilan con amplitud U_{n+1} y U_{n-1} . Claro está que planos más lejanos de aquel que hemos tomado como n -ésimo poseerán sus propias elongaciones. La figura 12.45 muestra la situación descrita anteriormente.

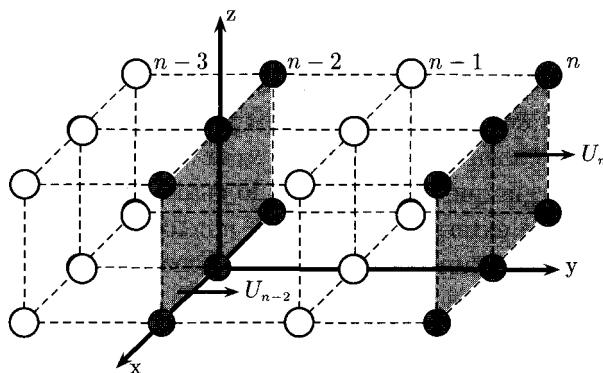


FIGURA 12.45. Todos los átomos del plano sombreado de la derecha tienen la misma coordenada y , y su desplazamiento respecto al punto de equilibrio está dado por U_n . Todo el plano sombreado de la izquierda tiene una elongación U_{n-2} .

Según la construcción que se ha dado al problema, no existen desplaza-

mientos relativos transversales a la dirección y , es decir, no hay fuerzas en las direcciones x ó z que hagan que un átomo cualquiera, dentro del plano cristalino sombreado, puedan oscilar en las direcciones x ó z . Lo anterior hace entonces obvio que el movimiento oscilatorio de un átomo dentro de un plano cualquiera sea exactamente semejante al del plano como un todo, y por lo tanto el análisis del movimiento de un átomo por cada plano será suficiente para la descripción de las oscilaciones de la red cristalina.

De esta manera se puede justificar el modelo mecánico en el cual todo el cristal se reemplaza por una *cadena lineal monoatómica*, en donde cada átomo se puede representar por una partícula de masa m y un acople de constante β , responsable de las oscilaciones armónicas a que estarán sujetos los átomos.

En la figura 12.46 se encuentra la simplificación del problema (compara con la figura anterior) donde se ha reducido a un problema unidimensional y relativamente sencillo de resolver si se adopta que solo el movimiento de los *vecinos próximos* afecta el movimiento de una determinada masa. Es decir, que el movimiento de la masa arbitrariamente marcada con la letra n es afectada solamente por el de las masas marcadas con $n - 1$ y $n + 1$.

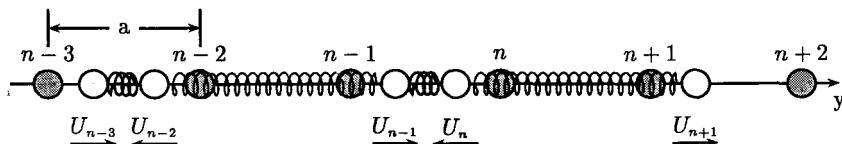


FIGURA 12.46. Cadena monoatómica lineal. Las masas sombreadas representan las posiciones de equilibrio. La constante de red es a , y la constante de acoplamiento es β .

De acuerdo con la aproximación de vecinos próximos, tendremos que la fuerza a la cual está sometida la partícula n será:

$$F_n = \beta(U_{n+1} - U_n) + \beta(U_{n-1} - U_n) \quad (12.30)$$

de acuerdo con la segunda ley de Newton podemos escribir:

$$m \frac{d^2 U_n}{dt^2} = \beta(U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \quad (12.31)$$

Ya que estamos moviéndonos dentro de aproximaciones armónicas, la solución de la ecuación (12.31) será una expresión de la forma:

$$U_n(t) = U_0 e^{i(\omega t + kna)} \quad (12.32)$$

donde ω es la frecuencia angular del movimiento armónico de la partícula, k el número de onda; y, por lo tanto, nka está midiendo las diferencias de fase entre dos partículas consecutivas. Al reemplazar la ecuación (12.32) en la ecuación (12.31) encontramos una condición que debe cumplirse al relacionar ω con k . En efecto, tal condición se llama “relación de dispersión” y es:

$$-m\omega^2 = \beta(e^{ik_a} + e^{-ik_a} - 2) = -4\beta \operatorname{sen}^2\left(\frac{1}{2}ka\right) \quad (12.33)$$

Es decir:

$$\omega = 2\left(\frac{\beta}{m}\right)^{1/2} \operatorname{sen}\left(\frac{1}{2}ka\right) \quad (12.34)$$

La ecuación (12.34) nos está indicando una relación muy precisa entre la frecuencia de oscilación ω de la partícula, y el vector de onda k . En efecto, cuando k y ω no poseen una relación lineal significa que las propagaciones de los movimientos oscilatorios tienen lugar en un medio dispersivo. La figura 12.47 muestra las frecuencias de oscilación permitidas en la red cristalina.

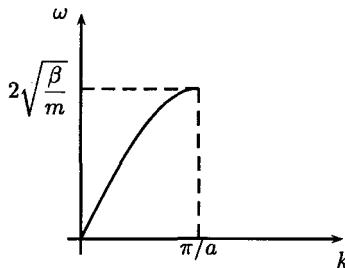


FIGURA 12.47. Frecuencias permitidas en la red cristalina en función de k .

Como se puede apreciar, existe un máximo de frecuencias para una estructura cristalina como la de la figura 12.47, la cual indica que para oscilaciones mecánicas (es decir sonoras) pequeñas comparadas con $2(\beta/m)^{1/2}$ el sólido responderá muy fácilmente, mientras que si $\omega > 2(\beta/m)^{1/2}$ los átomos del sólido no podrán seguir las oscilaciones y el cristal será “opaco” a frecuencias iguales o mayores que ese límite. Valores típicos de éste tamaño para ω son del orden de 10^{15} s^{-1} , lo cual representa frecuencias que corresponden a los denominados “ultrasonidos”.

12.8.2 Modelo de la cadena biatómica

Ahora podemos emprender un análisis un tanto más complicado. En vez de tener un cristal cúbico simple, pasemos a estudiar un cristal cúbico

centrado en el cuerpo. La suposición fundamental del numeral anterior la mantenemos, es decir, que algún plano cristalino perpendicular al eje y posee átomos que se desplazan, al mismo tiempo, la misma distancia.

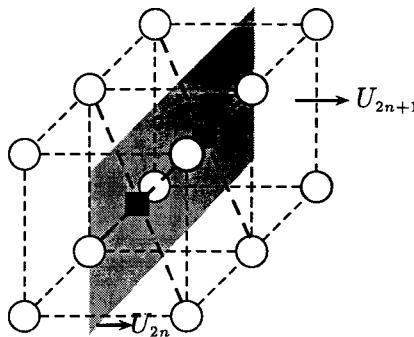


FIGURA 12.48. Vibraciones en un cristal cúbico centrado en el cuerpo. Los planos con átomos ■ tienen menor densidad que los planos con átomos O.

Ahora bien, como en el caso anterior cada uno de los planos cristalinos estarán oscilando con alguna elongación respecto a su punto de equilibrio, *pero ahora dos planos consecutivos no poseerán igual masa*. La figura 12.48 ilustra el hecho mencionado.

De acuerdo con la figura, un plano que pase por los átomos ■ tendrá un menor número de átomos por unidad de área (densidad) que un plano que pase por los átomos O. Esto hace que aun cuando el cristal sea monoatómico, se presenten *inercias distintas de plano a plano*.

Al tener en cuenta que a excepción de lo acabado de explicar, las condiciones físicas son idénticas a la de la cadena monoatómica, podemos utilizar el siguiente modelo llamado “*cadena biatómica*”, ya que dos partículas consecutivas poseen diferente masa. El esquema correspondiente se encuentra en la figura 12.49.

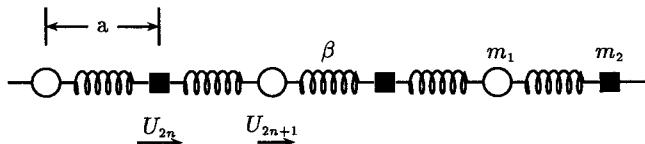


FIGURA 12.49. Modelo mecánico para una cadena biatómica con constante de red a y constante de acoplamiento β .

Al suponer que los átomos secuencialmente espaciados están acoplados por una sola constante β , se obtienen las siguientes relaciones, al seguir

considerando solo interacción entre vecinos próximos:

$$\begin{aligned} m_2 \frac{d^2 U_{2n}}{dt^2} &= \beta(U_{2n-1} + U_{2n-1} - 2U_{2n}) \\ m_1 \frac{d^2 U_{2n+1}}{dt^2} &= \beta(U_{2n+2} + U_{2n} - 2U_{2n+1}) \end{aligned} \quad (12.35)$$

Al tomar las siguientes expresiones como soluciones⁵:

$$U_{2n} = U_0 e^{i(\omega t + 2nka)}$$

$$U_{2n+1} = U_0 e^{i[\omega t + (2n+1)ka]} \quad (12.36)$$

la relación de dispersión es:

$$\omega_{\pm}^2 = \beta \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \pm \beta \left[\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^2 - \frac{4 \operatorname{sen}^2 ka}{m_1 m_2} \right] \quad (12.37)$$

El subíndice \pm indica qué signo debe tomarse para ω^2 en la parte derecha de la ecuación (12.37). La figura 12.50 muestra el comportamiento de ω en función de k .

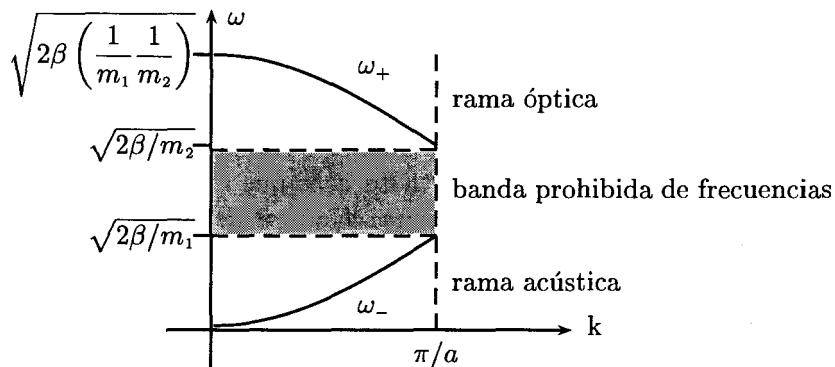


FIGURA 12.50. Oscilaciones acústicas y ópticas en un sólido cúbico centrado en el cuerpo.

La relación $\omega_+(k)$ se llama “rama óptica”, ya que las frecuencias de ese rango corresponden a frecuencias de la parte visible dentro del espectro electromagnético, y por esta razón algunos sólidos cristalinos absorben muy bien radiación electromagnética. La parte correspondiente a $\omega_-(k)$ es llamada “rama acústica” por las razones dadas en el numeral anterior. Es de notar que gracias a la diferencia entre las masas oscilantes se presenta una *banda prohibida* de frecuencias.

⁵Es decir, dentro de la aproximación armónica.

12.8.3 Fonones

Cuando se estudió el oscilador armónico desde el punto de vista de la mecánica cuántica, se concluyó que las energías que podía tomar una partícula moviéndose dentro de un potencial de oscilador armónico eran cuantizadas. Ahora bien, cada manera como oscila (modo de oscilación) una estructura cristalina está caracterizada por una frecuencia $\omega(k)$ según acabamos de ver. Estas oscilaciones están cuantizadas de manera análoga a lo estudiado en el oscilador armónico. El cuanto de energía $\hbar\omega(k)$ de estas oscilaciones se llama “*fonón*”.

Los fonones que se excitan en un sólido poseen frecuencias dentro del rango de las frecuencias sonoras; y por eso es común el término de “*fonones acústicos*”, a pesar de que en algunos cristales se pueden excitar “*fonones ópticos*”.

Para finalizar, se puede hacer un paralelo entre los fonones y los fotones. Los cuantos de energía de la radiación electromagnética son los fotones, mientras que las vibraciones de las redes cristalinas poseen cuantos energéticos con la misma expresión ($\hbar\omega(k)$), pero con frecuencias encontradas en este numeral. Estos cuantos de energía son los fonones.

Preguntas

1. ¿Qué son sólidos amorfos y cristalinos?
2. ¿Qué tipo de sólidos son la madera, el vidrio, el hierro?
3. ¿Qué es una operación de translación y qué representa?
4. Haga una descripción de una celda unitaria.
5. En un cuadro sencillo escriba los sistemas cristalinos que recuerde.
6. ¿Qué es un plano cristalino?
7. Con un ejemplo sencillo ilustre el significado de los índices de Miller.
8. ¿Cuáles son las variables involucradas en la ley de Bragg?
9. ¿Qué relación sencilla deben poseer λ y d en la ley de Bragg?
10. Nombre algunos detectores empleados en los equipos de rayos X.
11. ¿Qué son las imperfecciones puntuales en un cristal?
12. Enumere y dé las características de las principales fuerzas en los cristales.

13. ¿Cuál es la principal característica del enlace covalente?
14. ¿Qué se quiere decir con un "gas de electrones" en un metal?
15. ¿Cómo se puede escribir la ley de Ohm en términos del campo eléctrico y la densidad de corriente?
16. ¿Qué sentido físico tiene la velocidad de arrastre?
17. Explique el significado del camino libre medio de un electrón en un metal.
18. Escriba y explique el teorema de Bloch.
19. Explique brevemente el modelo de Kronig-Penney y sus resultados.
20. ¿Qué es una banda prohibida de energía en un sólido?
21. Dibuje un esquema que caracterice a un conductor, un semiconductor y un aislante, según el modelo de bandas de energía electrónicas.
22. ¿Entre qué valores, más o menos, puede encontrarse una brecha de energía prohibida en un semiconductor?
23. ¿El estudio teórico de las vibraciones cristalinas qué fenómeno logró explicar?
24. Explique muy brevemente cómo se puede adoptar el modelo de cadena monoatómica.
25. Aclare los términos dados como ramas acústica y óptica de los modos de vibración de una cadena biatómica.

Apéndice A

Transformaciones de Lorentz

Para la derivación de las transformaciones de Lorentz se emplearán los dos postulados de la teoría especial de la relatividad.

Consideremos dos observadores colocados en los orígenes de dos marcos de referencia iniciales S y S' , S' moviéndose hacia la derecha con respecto a S en dirección $+x$.

En el instante $t = t' = 0$ en que los orígenes 0 y $0'$ coinciden, se emite un pulso luminoso y cada observador se encuentra en el foco de una onda esférica de luz que se expande en el espacio (figura A.1).

A medida que el frente de onda se va expandiendo cada observador verá que se encuentra en el centro de la esfera de luz, ya que de acuerdo con el segundo postulado de la relatividad la velocidad de la luz es c en ambos sistemas.

Para el observador 0 la ecuación de la esfera es:

$$x^2 + y^2 + z^2 = c^2 t^2 \quad (\text{A.1})$$

y para el observador $0'$:

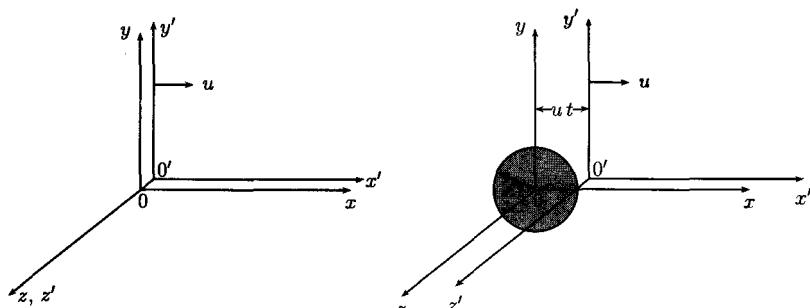
$$x'^2 + y'^2 + z'^2 = c^2 t'^2 \quad (\text{A.2})$$

Como no hay movimiento relativo con respecto a los ejes y , z : $y' = y$; $z' = z$.

Como $x' = x - ut$ de acuerdo con las transformaciones de Galileo, al reemplazar x' en función de x no se obtiene la ecuación (A.1) a partir de la ecuación (A.2). Se concluye, de esta manera, que las transformaciones de Galileo no reproducen la invariancia de la velocidad de la luz.

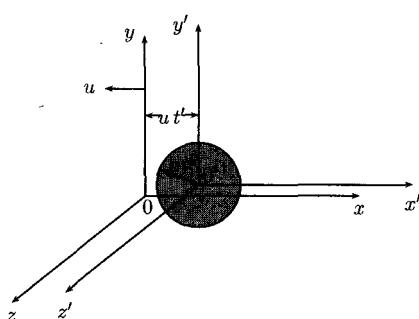
Entonces se necesitarán unas nuevas ecuaciones de transformación que sean válidas en casos relativistas tales que, para velocidades pequeñas

comparadas con la de la luz, reproduczamos el caso clásico. Para ello partiremos de las transformaciones de Galileo las cuales son válidas en la mecánica newtoniana.



a. En $t = t' = 0$ se emite un pulso luminoso.

b. t segundos después medido por 0



c. t' segundos después medido por $0'$

FIGURA A.1. Expansión de una esfera de luz vista por dos observadores inertiales 0 y $0'$.

Multiplicando las ecuaciones de transformación para x y x' por un factor tal que:

$$x' = K(x - ut) \quad x = K'(x' + ut') \quad (\text{A.3})$$

siendo K y K' independientes de x y de t . En general debemos suponer que t y t' no serán iguales.

De acuerdo con el primer postulado de la relatividad, K y K' deben ser iguales. Además, K debe ser tal que para velocidades pequeñas comparadas con la de la luz, su valor debe ser igual a la unidad (caso clásico). Como no hay movimiento relativo respecto a los ejes y , z , las coordenadas correspondientes serán iguales.

La ecuación para transformar el tiempo la obtenemos combinando las ecuaciones (A.3). Reemplazando x' en la ecuación para x y despejando t' :

$$t' = K \left[\frac{x}{u} \left(\frac{1}{K^2} - 1 \right) + t \right] \quad (\text{A.4})$$

Ahora que tenemos las ecuaciones de transformación que nos permiten expresar las observaciones de $0'$ en las de 0 , basta reemplazar las coordenadas primadas en función de las no primadas en la ecuación (A.2), e igualarla con la ecuación (A.1).

El resultado será la expresión del factor K que hace que la igualdad se cumpla. En efecto:

$$Ax^2 + Bxt + y^2 + z^2 - Dt^2 = x^2 + y^2 + z^2 - c^2t^2 \quad (\text{A.5})$$

donde:

$$\begin{aligned} A &= K^2 - \frac{c^2 K^2}{u^2} \left(\frac{1}{K^2} - 1 \right)^2 \\ B &= 2uK + \frac{2c^2 K^2}{u^2} \left(\frac{1}{K^2} - 1 \right)^2 \\ D &= K^2(c^2 - u^2) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

La igualdad (A.5) se satisface si:

$$A = 1 \quad B = 0 \quad D = c^2 \quad (\text{A.7})$$

El coeficiente D es el más fácil de trabajar. Así,

$$K^2(c^2 - u^2) = c^2$$

de donde:

$$K = \frac{1}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (\text{A.8})$$

Con los otros coeficientes se obtiene el mismo resultado. Así hemos hallado el factor que modifica las *transformaciones de Lorentz, apropiadas para casos relativistas*.

Para velocidades pequeñas, las transformaciones de Lorentz (o relativistas) coinciden con las transformaciones de Galileo, como debe ser:

$$\frac{u^2}{c^2} \ll 1 \quad \text{entonces} \quad \sqrt{1 - u^2/c^2} \approx 1 \quad \text{y} \quad K = 1$$

Reemplazando K en las ecuaciones (A.3) y (A.4), las transformaciones de Lorentz toman la forma:

$$x' = \frac{x - ut}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad y' = y \quad z' = z \quad t' = \frac{t - xu/c^2}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (\text{A.9})$$

Apéndice B

Una nota sobre ecuaciones diferenciales

La ecuación de Schrödinger, en una dimensión, en los casos estudiados en donde aparecen “escalones” de potencial, es una ecuación diferencial parcial de segundo orden, cuya forma general es:

$$F'' + aF' + bF = 0 \quad (\text{B.1})$$

Esta ecuación tiene una solución general de la forma $F(x) = e^{\lambda x}$ donde λ es un parámetro que depende de las constantes a y b de la ecuación, y determina la forma de cada una de las tres posibles soluciones que tiene. Se entiende que las derivadas de la función F son con respecto a x .

Derivando $F(x)$ y reemplazando el resultado en la ecuación (B.1), se obtiene:

$$e^{\lambda x}(\lambda^2 + a\lambda + b) = 0$$

Como $e^{\lambda x}$ no puede ser cero, se debe cumplir que:

$$\lambda^2 + a\lambda + b = 0 \quad (\text{B.2})$$

La ecuación (B.2) se conoce con el nombre de *ecuación auxiliar* y proporciona los posibles valores de la constante λ :

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}(-a \pm \sqrt{a^2 - 4b}) \quad (\text{B.3})$$

Llamando: $p = -a/2$ y $q^2 = (a^2 - 4b)/2 = (a^2/4) - b$, la ecuación anterior toma la forma:

$$\lambda = p \pm q \quad (\text{B.4})$$

De acuerdo con el signo de q^2 las posibles soluciones son:

- a) Dos raíces reales diferentes: $q_2 > 0$.
- b) Dos raíces reales iguales: $q_2 = 0$.
- c) Dos raíces complejas: $q_2 < 0$.

a) Dos raíces reales diferentes: $q_2 > 0$

Si q_2 es mayor que cero, entonces se cumple que: $\lambda_1 = p + q$ y $\lambda_2 = p - q$ las soluciones particulares de la ecuación son de la forma:

$$F_1 = e^{(p+q)x} \quad F_2 = e^{(p-q)x}$$

La solución general es una combinación lineal de las anteriores, tal que:

$$F(x) = Ae^{(p+q)x} + Be^{(p-q)x} = e^{px}(Ae^{qx} + Be^{-qx}) \quad (\text{B.5})$$

b) Dos raíces reales iguales: $q_2 = 0$

Si q_2 es igual a cero, entonces $\lambda_1 = \lambda_2 = p$, y las soluciones particulares son de la forma:

$$F_1 = e^{px} \quad F_2 = xe^{px}$$

La solución general es de la forma:

$$F(x) = (A + Bx)e^{px} \quad (\text{B.6})$$

donde A y B son constantes.

c) Dos raíces complejas: $q_2 < 0$

Si q_2 es menor que cero, entonces $\lambda_1 = p + iq$, $\lambda_2 = p - iq$. La solución general es:

$$F(x) = Ae^{(p+iq)x} + Be^{(p-iq)x} = e^{px}(Ae^{iqx} + Be^{-iqx}) \quad (\text{B.7})$$

Como $e^{\pm iq\theta} = \cos \theta \pm i \operatorname{sen} \theta$, la ecuación anterior también se escribe de la forma:

$$F(x) = e^{px}(C \cos qx + D \operatorname{sen} qx) \quad (\text{B.8})$$

En estas ecuaciones las constantes A y B pueden no ser reales puros y las constantes C y D no necesariamente contienen cantidades imaginarias.

En mecánica cuántica la ecuación de Schrödinger para los casos particulares mencionados al inicio del apéndice, tiene la forma:

$$F'' + by = 0 \quad (\text{B.9})$$

Como no hay primera derivada de la función $a = 0$ y por lo tanto:

$$p = 0 \quad q = \sqrt{-b} = i\sqrt{b} \quad (\text{B.10})$$

donde b puede ser positivo o negativo.

De acuerdo con el signo de la constante b los valores de la constante de la ecuación auxiliar son:

$$\lambda_{1,2} = \pm i\sqrt{b} \quad \text{si} \quad b > 0 \quad (\text{B.11})$$

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{b} \quad \text{si} \quad b < 0 \quad (\text{B.12})$$

Las soluciones generales de la ecuación (B.9) son:

$$F(x) = \begin{cases} Ae^{i\sqrt{b}x} + Be^{-i\sqrt{b}x} & b > 0 \\ Ae^{\sqrt{b}x} + Be^{-\sqrt{b}x} & b < 0 \end{cases} \quad (\text{B.13})$$

Cuando $b > 0$ la solución también se puede escribir en la forma:

$$F(x) = A \cos \sqrt{b}x + \operatorname{sen} \sqrt{b}x \quad (\text{B.14})$$

Noten que la solución para $b < 0$ corresponde al caso $a)$ y la solución para $b > 0$ al caso $c)$

Apéndice C

Solución de la ecuación diferencial de Hermite para el caso del oscilador armónico cuántico

La solución asintótica de la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico (ecuación 8.12) es:

$$\varphi(\xi) = e^{-\xi^2/2} H(\xi) \quad (\text{C.1})$$

donde $H(\xi)$ es una función que debemos determinar a partir de su ecuación diferencial (ecuación 8.13):

$$\frac{d^2 H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH(\xi)}{d\xi} + (\lambda - 1)H(\xi) = 0 \quad (\text{C.2})$$

donde $\lambda = 2mE/(\hbar^2\alpha^2) = 2E/(\hbar\omega)$ y $\alpha^4 = km/\hbar^2$.

Esta ecuación se resuelve utilizando el método de series de potencias, como veremos a continuación.

Sea $H(\xi)$ una serie de la forma:

$$H(\xi) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \xi^s \quad (\text{C.3})$$

Las derivadas correspondientes son:

$$H'(\xi) = \sum_{s=1}^{\infty} a_s s \xi^{s-1} \quad H''(\xi) = \sum_{s=2}^{\infty} a_s (s-1)s \xi^{s-2}$$

Reemplazando este resultado en la ecuación (C.2) y factorizando potencias de ξ se obtiene:

$$\sum_{s=0}^{\infty} [s - 2(s-1)a_{s-2} - (2s - (\lambda - 1))a_s] \xi^s = 0$$

Cada uno de los coeficientes de cada potencia de ξ en esta serie deben ser cero para satisfacer la igualdad.

De la ecuación anterior se obtiene una fórmula de recurrencia que permitirá calcular los coeficientes de la serie:

$$a_{s+2} = \frac{2s + 1 - \lambda}{(s+2)(s+1)} a_s \quad s = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{C.4})$$

Nótese que la fórmula de recurrencia genera dos series: una a partir de a_0 y otra apartir de a_1 . En la primera los exponentes de ξ son pares y en la segunda son impares.

Ahora debemos determinar el comportamiento de la serie (ecuación C.3) para $\xi \rightarrow \infty$. Para ello basta considerar el límite de la razón de dos términos consecutivos de la serie (ya sean de la serie par o de la impar):

$$\begin{aligned} \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{a_{s+2}\xi^{s+2}}{a_s\xi^s} &= \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{2s + 1 - \lambda}{(s+2)(s+1)} \xi^2 \\ &= \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{s(2 + 1/s - \lambda/s)}{s^2(1 + 2/s)(1 + 1/s)} \xi^2 = \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{2\xi^2}{s} \end{aligned}$$

Pero si expandimos en serie $e^{2\xi^2}$:

$$e^{2\xi^2} = 1 + 2\xi^2 + \frac{4\xi^4}{2!} + \frac{8\xi^6}{3!} + \dots = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{2^s \xi^{2s}}{s!}$$

el límite de la razón de dos términos consecutivos de esta serie es:

$$\begin{aligned} \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{2^{s+1} \xi^{2(s+1)} / (s+1)!}{2^s \xi^{2s} / s!} &= \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{2\xi^2 s!}{(s+1)s!} = \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{2\xi^2}{s+1} \\ &= \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{2\xi^2}{s} \quad s \gg 1 \end{aligned}$$

Por consiguiente, $H(\xi)$ se comporta como $e^{2\xi^2}$ cuando ξ es muy grande. Si reemplazamos este resultado para $H(\xi)$ en la ecuación (C.1), que es la función de onda del oscilador armónico, vemos inmediatamente que no es la solución adecuada puesto que:

$$\varphi = e^{-\xi^2/2} e^{2\xi^2} = e^{3\xi^2/2}$$

y esta función no es finita para $\xi = \infty$. Sin embargo si $H(\xi)$ es una serie finita, *es decir un polinomio de grado n*, entonces la función de onda tenderá a cero para $\xi \rightarrow \infty$, debido a la exponencial negativa que tiene. Al ser $H(\xi)$ un polinomio de grado $s = n$, el coeficiente a_{n+2} es cero lo cual se cumple cuando en la ecuación (C.4)¹:

$$\lambda = 2n + 1 \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{C.5})$$

Este resultado conduce a los posibles valores de la energía para el oscilador armónico.

Reemplazando la expresión obtenida para λ en la ecuación (C.2):

$$\frac{d^2 H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH(\xi)}{d\xi} + 2n H(\xi) = 0 \quad (\text{C.6})$$

Esta ecuación se conoce con el nombre de *ecuación diferencial de Hermite* y su solución son los llamados polinomios de Hermite dados por la relación²:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (\text{C.7})$$

y cuya fórmula de recurrencia es precisamente la ecuación (C.4).

Utilizando este resultado matemático conocido, la forma final de la función de onda para el oscilador armónico cuántico es:

$$\varphi_n(\xi) = N_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{C.8})$$

donde N_n es la constante de normalización.

Esta constante se obtiene a partir de la siguiente relación matemática que cumplen los polinomios de Hermite:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} |H_n(\xi)|^2 d\xi = 2^n n! \pi^{1/2} \quad (\text{C.9})$$

Entonces:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_n(\xi)|^2 d\xi = N_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} |H_n(\xi)|^2 d\xi = N_n^2 (2^n n! \pi^{1/2})$$

¹Debe notarse que en la expresión para λ aparece la energía y, por lo tanto, la condición descrita conlleva a la *cuantización de la energía*.

²Mathematical Handbook, M. R. Spiegel, McGraw-Hill, 1968.

de donde:

$$N_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \pi^{1/2}}} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{C.10})$$

Otras relaciones útiles para los polinomios de Hermite son las siguientes:

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi)$$

$$\frac{d}{d\xi} H_n(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi).$$

Apéndice D

Solución de las partes angular y radial de la ecuación de Scrödinger para átomos hidrogenoides

Como se vió en el capítulo 9, la ecuación de Schrödinger para átomos hidrogenoides (en coordenadas esféricas r, θ, ϕ) se separa en tres ecuaciones diferenciales ordinarias (ecuación 9.11, 9.12 y 9.13), de las cuales la que depende del ángulo ϕ (ecuación 9.11) es fácil de resolver. Ahora veremos cómo se encuentra la solución de las otras dos ecuaciones.

a) Ecuación en θ

$$\frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\operatorname{sen} \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m_\ell^2}{\operatorname{sen}^2 \theta} \right] \Theta = 0 \quad (\text{D.1})$$

En primer lugar es necesario hacer un cambio de variable para expresarla en una forma más adecuada.

Efectuando las operaciones indicadas en la ecuación (D.1):

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \frac{\cos \theta}{\operatorname{sen} \theta} \frac{d\Theta}{d\theta} + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m_\ell^2}{\operatorname{sen}^2 \theta} \right] \Theta = 0$$

Haciendo el cambio de variable $x = \cos \theta$:

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta} \frac{d}{dx} = -\operatorname{sen} \theta \frac{d}{dx}$$

$$\frac{d^2}{d\theta^2} = \frac{d}{d\theta} \left(-\operatorname{sen} \theta \frac{d}{dx} \right) = -\cos \theta \frac{d}{dx} + \operatorname{sen}^2 \theta \frac{d^2}{dx^2}$$

la ecuación (D.1) se transforma en:

$$(1 - x^2) \frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x \frac{d\Theta}{dx} - \left[i(i-1) - \frac{m_i^2}{1-x^2} \right] \Theta = 0 \quad (\text{D.2})$$

Esta ecuación tiene la forma de la ecuación diferencial cuya solución son los denominados *polinomios asociados de Legendre*.

Para hallar su solución partimos de la ecuación diferencial:

$$(1 - x^2) \frac{d^2f}{dx^2} - 2x \frac{df}{dx} + k(k+1)f = 0 \quad (\text{D.3})$$

conocida con el nombre de ecuación diferencial de Legendre de grado k . Esta ecuación se resuelve por el método de serie de potencias¹.

El polinomio de grado k , solución de esta ecuación diferencial, se obtiene a partir de la siguiente fórmula generatriz:

$$f(x) = P_k(x) = \frac{1}{2^k k!} \frac{d^k}{dx^k} (x^2 - 1)^k \quad (\text{D.4})$$

y se conoce con el nombre de *polinomios de Legendre*.

Derivando j veces cada término de la ecuación (D.3) usando la regla de Leibnitz² para la j -ésima derivada y llamando $d^j f / dx^j = g$, se obtiene:

$$(1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} g - 2x(j+1) \frac{d}{dx} g + (k-j)(k+j-1)g = 0 \quad (\text{D.5})$$

Puesto que f es solución de esta ecuación entonces $d^j f / dx^j = g$ también lo es.

Haciendo $F = (1 - x)^{j/2} g$, reemplazando en la ecuación (D.5) las expresiones correspondientes a las derivadas de g , agrupando términos y efectuando las factorizaciones necesarias se llega al siguiente resultado:

$$(1 - x^2)^{j/2} \frac{d^2}{dx^2} F - 2x \frac{d}{dx} F + \left[k(k+1) - \frac{j^2}{1-x^2} \right] F = 0 \quad (\text{D.6})$$

¹ Su derivación se encuentra en Advanced Engineering Mathematics, E. Kreyszig, John Wiley and Sons, Inc. 1964.

² La regla de Leibnitz para hallar la enésima derivada de un producto de funciones es:

$$\begin{aligned} \frac{d^n}{dx^n} pq &= q \frac{d^n}{dx^n} p + \binom{n}{1} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} p \left(\frac{dq}{dx} \right) + \binom{n}{2} \frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}} p \left(\frac{d^2q}{dx^2} \right) \\ &\quad + \cdots + \binom{n}{m} \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} p \left(\frac{d^m q}{dx^m} \right) + \cdots + \end{aligned}$$

donde:

$$\binom{n}{m} = \frac{n!}{m!(n-m)!} \quad m \leq n$$

Esta es la llamada ecuación asociada de Legendre. Su solución es:

$$F(x) = (1 - x^2)^{j/2} \frac{d^j}{dx^j} f(x) = (1 - x^2)^{j/2} \frac{d^j}{dx^j} P_k(x) = P_k^j(x) \quad (\text{D.7})$$

que se conoce con el nombre de *polinomios asociados de Legendre*.

Es importante notar que $j \leq k$ porque $P_k(x)$ es un polinomio de grado k y si j es mayor que k su j -ésima derivada será nula.

Comparando las ecuaciones (D.2) y (D.6) observamos que tienen la misma forma si: $k = \ell$ y $j = |m_\ell|$. Por tanto, la condición $j \leq k$ hace que $|m_\ell| \leq \ell$ lo cual limita los posibles valores de m_ℓ a:

$$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell \quad (\text{D.8})$$

Como resultado de este desarrollo vemos que la solución de la ecuación (D.2) son los polinomios asociados de Legendre, esto es (con $x = \cos \theta$):

$$\Theta_{\ell, m_\ell}(\theta) = N_{\ell, m_\ell} P_\ell^{|m_\ell|}(\cos \theta) \quad (\text{D.9})$$

donde N_{ℓ, m_ℓ} es la constante de normalización.

Los polinomios de Legendre así como los polinomios asociados cumplen ciertas relaciones matemáticas, dos de las cuales son las siguientes:

$$\int_{-1}^{+1} P_n(x) P_m(x) dx = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ \frac{2}{2n+1} & n = m \end{cases}$$

$$\int_{-1}^{+1} |P_n^m(x)|^2 dx = \frac{2(n+m)!}{(2n+1)(n-m)!}$$

La primera relación nos dice que los polinomios de Legendre son ortogonales entre sí; la segunda nos permite encontrar la expresión de la constante de normalización en la ecuación (D.9).

La condición de normalización es:

$$1 = \int_0^\pi |\Theta_{\ell, m_\ell}|^2 \sin \theta d\theta = N_{\ell, m_\ell}^2 \int_0^\pi [P_\ell^{|m_\ell|}(\cos \theta)]^2 \sin \theta d\theta$$

Haciendo el siguiente cambio de variable:

$$\begin{aligned} x &= \cos \theta & \theta = 0 \rightarrow x = 1 \\ dx &= -\sin \theta d\theta & \theta = \pi \rightarrow x = -1 \end{aligned}$$

se obtiene:

$$N_{\ell, m_\ell} = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m_\ell|)!}{2(\ell+|m_\ell|)!}} \quad (\text{D.10})$$

b) Ecuación radial

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R = 0 \quad (\text{D.11})$$

Efectuando las operaciones indicadas en la ecuación (D.11):

$$\frac{dR}{dr} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2mZe^2}{4\pi\epsilon_0 r \hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R = 0$$

Para expresarla en una forma más adecuada³, hacemos el siguiente cambio de variable: $\varrho = \beta r$ donde β es una constante que será definida más adelante. Entonces:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} &= \frac{d\varrho}{dr} \frac{d}{d\varrho} = \beta \frac{d}{d\varrho} \\ \frac{d^2}{dr^2} &= \beta^2 \frac{d}{d\varrho} \left(\frac{d}{d\varrho} \right) = \beta^2 \frac{d^2}{d\varrho^2} \end{aligned}$$

y la ecuación (D.11) se convierte en la siguiente expresión:

$$\frac{d^2}{d\varrho^2} R + \frac{2}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} R + \left[\frac{2mE}{\beta^2 \hbar^2} + \frac{2mZe^2}{4\pi\epsilon_0 \beta \varrho \hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} \right] R = 0$$

Llamando:

$$\lambda = \frac{2mZe^2}{4\pi\epsilon_0 \beta \hbar^2} \quad \beta^2 = -\frac{8mE}{\hbar^2}$$

la ecuación diferencial original toma la forma:

$$\frac{d^2}{d\varrho^2} R + \frac{2}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} R + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\varrho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} \right] R = 0 \quad (\text{D.12})$$

Esta ecuación tiene la forma de la ecuación diferencial cuya solución son las llamadas *funciones asociadas de Laguerre*.

Debido a que de esta ecuación se obtiene un resultado importante vamos a discutirla en forma más extensa que en el caso anterior.

Para hallar su solución primero observamos su comportamiento asintótico para ϱ muy grande ($\varrho \rightarrow \infty$). En esa región la ecuación (D.12) toma la forma:

$$\frac{d^2 R}{d\varrho^2} - \frac{1}{2} R = 0$$

³Es decir, obtener una ecuación adimensional.

cuya solución es:

$$Ae^{\varrho/2} + Be^{-\varrho/2}$$

Pero el término que contiene la exponencial positiva no es solución físicamente aceptable del problema. Por tanto, podemos suponer que la solución general será de la forma:

$$R(\varrho) = Be^{-\varrho/2}F(\varrho) \quad (\text{D.13})$$

que al ser reemplazada en la ecuación (D.12) conduce al siguiente resultado:

$$\frac{d^2}{d\varrho^2} F + \left(\frac{2}{\varrho} - 1 \right) \frac{d}{d\varrho} F + \left[\frac{\lambda - 1}{\varrho} - \frac{\ell(\ell + 1)}{\varrho^2} \right] F = 0 \quad (\text{D.14})$$

Esta ecuación se resuelve por el método de serie de potencias. Como se presenta una singularidad en $\varrho = 0$, la serie de potencias debe ser de la forma:

$$F(\varrho) = \varrho^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k \varrho^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \varrho^{k+s} \quad (\text{D.15})$$

donde el exponente s puede ser cualquier número real (o complejo) que se escoge de tal manera que el primer coeficiente de la serie (a_0) sea diferente de cero.

Las derivadas de $F(\varrho)$ son:

$$F'(\varrho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k (s+k) \varrho^{s+k-1}$$

$$F''(\varrho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k (s+k)(s+k-1) \varrho^{s+k-2}$$

Reemplazando este resultado en la ecuación (D.14) y factorizando potencias de ϱ se obtiene:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{a_k [(s+k)(s+k-1) + 2(s+k) - \ell(\ell+1)] \varrho^{s+k} + a_k [\lambda - 1 - (s+k)] \varrho^{s+k+1}\} = 0$$

que también podemos escribir:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{a_{k+1} [(s+k+1)(s+k) + 2(s+k+1) - \ell(\ell+1)] + a_k [\lambda - 1 - (s+k)]\} \varrho^{s+k+1} = 0$$

Los coeficientes de cada potencia de ϱ deben ser nulos individualmente. De la ecuación anterior se obtiene una fórmula de recurrencia que permitirá calcular los coeficientes de la serie:

$$a_{k+1} = \frac{s+k+1-\lambda}{(s+k+2)(s+k+1)-\ell(\ell+1)} a_k \quad (\text{D.16})$$

Reemplazando k por $k-1$ en la ecuación anterior, podemos encontrar el valor del exponente s :

$$a_k = \frac{s+k-\lambda}{(s+k)(s+k+1)-\ell(\ell+1)} a_{k-1} \quad (\text{D.17})$$

y para $k=0$ se tiene:

$$a_0[s(s+1)-\ell(\ell+1)] = (s-\lambda)a_{-1}$$

Pero el primer coeficiente de la serie es a_0 que debe ser diferente de cero; por tanto a_{-1} es cero y se encuentra para s que es igual a ℓ . Con este resultado la fórmula de recurrencia (ecuación D.16) se escribe:

$$a_{k+1} = \frac{k+\ell+1-\lambda}{(k+\ell+2)(k+\ell+1)-\ell(\ell+1)} a_k \quad (\text{D.18})$$

El paso siguiente es averiguar el comportamiento de la serie para $\varrho \rightarrow \infty$. Para ello basta evaluar la razón de dos términos consecutivos de ella:

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_{k+1}\varrho^{k+1}}{a_k\varrho^k} &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{k(1+\ell/k-\lambda/k)\varrho}{k^2[(1+\ell/k+2/k)(1+\ell/k+1/k)-\ell(\ell+1)/k]} \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\varrho}{k} \end{aligned}$$

Este mismo resultado se obtiene cuando se expande en serie e^ϱ y se toma el límite de la razón de dos de sus términos consecutivos:

$$\begin{aligned} e^\varrho &= 1 + \varrho + \frac{\varrho^2}{2!} + \frac{\varrho^3}{3!} + \cdots + \frac{\varrho^k}{k!} + \frac{\varrho^{k+1}}{(k+1)!} + \cdots + \\ \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\varrho^{k+1}/(k+1)!}{\varrho^k/k!} &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{k!}{(k+1)!} \varrho = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{k!}{(k+1)k!} \varrho = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\varrho}{k} \end{aligned}$$

Al reemplazar $F(\varrho)$ por e^ϱ en la ecuación (D.13) vemos que no es una solución físicamente aceptable del problema porque $R(\varrho)$ no tiende a cero cuando $\varrho \rightarrow \infty$. Por consiguiente $F(\varrho)$ debe ser un polinomio finito.

Sea $k=j$ el grado de este polinomio y entonces a_{j+1} será nulo cuando en la ecuación (D.18) se cumple que:

$$\lambda = \ell + j + 1 = n \quad (\text{D.19})$$

donde j y ℓ son enteros. Por consiguiente λ es un número entero que llamaremos n y deberá ser mayor o igual a $\ell + 1$ y nunca cero. Este resultado limita los posibles valores de ℓ ya que $\ell \leq n - 1$, esto es:

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

$$n = 1, 2, \dots \quad (\text{D.20})$$

Este resultado, importante, hizo necesario todo el desarrollo matemático anterior ya que a partir de $\lambda (= n)$ obtenemos la expresión para la energía de átomos hidrogenoides. Igualmente queda determinada la constante β :

$$\beta = \frac{2mZe^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2n} = \frac{2Z}{na_0} \quad (\text{D.21})$$

Para encontrar la solución de la ecuación (D.12) partimos de la ecuación diferencial:

$$x \frac{d^2}{dx^2} f + (1 - x) \frac{d}{dx} f + kx = 0 \quad (\text{D.22})$$

conocida como ecuación diferencial de Laguerre, cuya solución se obtiene por el método de serie de potencias y tiene la siguiente fórmula generatriz⁴:

$$f(x) = L_k(x) = e^x \frac{d^k}{dx^k} x^k e^{-x} \quad (\text{D.23})$$

y se conoce con el nombre de *polinomios de Laguerre*.

Derivando j veces la ecuación (D.22) (tal como se hizo para los polinomios de Legendre) y llamando $d^j f / dx^j = g$, después de efectuar las operaciones necesarias se obtiene el siguiente resultado:

$$x \frac{d^2g}{dx^2} + (1 - x + j) \frac{dg}{dx} + (k - j)g = 0 \quad (\text{D.24})$$

Puesto que f es solución de esta ecuación g también lo es.

Haciendo $G(x) = e^{-x/2} x^{(j-1)/2} g$ y reemplazando g y sus derivadas en la ecuación (D.24) se obtiene finalmente:

$$\frac{d^2}{dx^2} G(x) + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} G(x) + \left[-\frac{1}{4} - \frac{j^2 - 1}{4x^2} + \frac{k - (j - 1)/2}{x} \right] G = 0 \quad (\text{D.25})$$

⁴Mathematical Handbook, M. R. Spiegel, McGraw-Hill, 1968.

Esta es la llamada ecuación asociada de Laguerre. Su solución es:

$$G(x) = e^{-x/2} x^{(j-1)/2} \frac{d^j}{dx_j} L_k(x) = e^{-x/2} x^{(j-1)/2} L_k^j(x) \quad (\text{D.26})$$

siendo G y $L_k^j(x)$ las *funciones y polinomios asociados de Laguerre*.

Es importante ver que $j \leq k$ proporciona las únicas soluciones posibles.

Comparando las ecuaciones (D.12) y (D.25) vemos que tienen la misma forma si:

$$\frac{1}{4}(j^2 - 1) = \ell(\ell + 1) \quad k - \frac{1}{2}(j - 1) = \lambda = n$$

lo cual proporciona los valores para j y k :

$$j = 2\ell + 1 \quad k = n + \ell \quad (\text{D.27})$$

Así, la solución de la ecuación (D.12) son las funciones asociadas de Laguerre con $x = \varrho$. Esto es⁵:

$$R_{n,\ell}(\varrho) = N_{n,\ell} e^{-\varrho/2} \varrho^\ell L_{n+1}^{2\ell+1}(\varrho) \quad (\text{D.28})$$

donde $N_{n,\ell}$ es la constante de normalización. Nótese que parte de la solución ya se había obtenido al considerar el comportamiento de $R(\varrho)$ para $\varrho \rightarrow \infty$.

La condición de normalización es:

$$\int_0^\infty [R_{n,\ell}(r)]^2 r^2 dr = 1 \quad (\text{D.29})$$

Teniendo en cuenta que $\varrho = \beta r$ y $\beta = 2z/(na_0)$ entonces:

$$r^2 = \left(\frac{na_0}{2Z}\right)^2 \varrho^2 \quad dr = \frac{na_0}{2Z} d\varrho$$

Al reemplazar lo anterior en la ecuación de normalización:

$$1 = \left(\frac{na_0}{2Z}\right)^3 \int_0^\infty |R_{n,\ell}(\varrho)|^2 \varrho^2 d\varrho = \left(\frac{na_0}{2Z}\right)^3 N_{n,\ell}^2 \int_0^\infty e^{-\varrho} \varrho^{2\ell+2} [L_{n+1}^{2\ell+1}(\varrho)]^2 d\varrho$$

⁵ Al utilizar los polinomios asociados de Laguerre $L_k^j(x)$ en la sección 9.1.1, por conveniencia se agrega un factor $(-1)^j$ que multiplica a la j -ésima derivada del polinomio ordinario $L_k(x)$.

La integral no es fácil de resolver por lo cual sólo damos el resultado final:

$$1 = \left(\frac{na_0}{2Z} \right)^3 N_{n,\ell}^2 \frac{2n[(n+\ell)!]^3}{(n-\ell-1)!}$$

de donde:

$$N_{n,\ell} = \sqrt{\left(\frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}} \quad (\text{D.30})$$

Apéndice E

Demostración de la expresión $F(E)$ para el modelo de Kronig-Penney

Las funciones de onda para el modelo unidimensional del potencial de Kronig-Penney (ecuación 12.23) vienen dadas por:

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x} \quad -b < x < 0 \\ \varphi_2(x) &= Ce^{i\alpha x} + De^{-i\alpha x} \quad 0 < x < c\end{aligned}$$

donde $\varphi_1(x)$ representa la función de onda dentro de la barrera de potencial de altura V_0 , $\varphi_2(x)$ las ondas planas en la región libre de potencial (vea de nuevo la figura 12.34). Además:

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \beta^2 = \frac{e m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Las condiciones de continuidad exigidas a la función de onda en $x = 0$ nos permite escribir (vea el capítulo 7):

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad \text{y} \quad \varphi'_1(0) = \varphi'_2(0)$$

Lo cual conduce a los siguientes resultados para las constantes:

$$A + B = C + D \tag{E.1}$$

$$\beta A - \beta B = i\alpha C - i\alpha D \tag{E.2}$$

Hasta el momento tenemos dos ecuaciones para determinar cuatro coeficientes, y al tener en cuenta el teorema de Bloch (ecuaciones 12.19 y

12.20), podemos obtener un par de ecuaciones más. Entonces:

$$\varphi_{\pm}(x) = e^{\pm ikx} U(x) \quad (E.3)$$

en donde las funciones φ son las dadas por las expresiones (E.1) y (E.2), y $U(x)$ deberá ser invariante bajo operaciones de translación:

$$U[x + n(\text{constante de red})] = U(x) \quad (E.4)$$

donde n es un número entero.

Por tanto la expresión (E.3) se convierte en:

$$U(x) = e^{-ikx} \varphi(x) \quad (E.5)$$

y la condición (E.4) junto con la continuidad en la derivada nos permite escribir:

$$U(c) = U(-b) \quad U'(c) = U'(-b) \quad (E.6)$$

En forma explícita las ecuaciones anteriores son:

$$\begin{aligned} e^{-ikc}[Ce^{i\alpha c} + De^{-i\alpha c}] &= e^{ikb}[Ae^{-\beta b} + Be^{\beta b}]ie^{-ikc}[C(\alpha - k)e^{i\alpha c} \\ &\quad - D(\alpha + k)e^{-i\alpha c}] = e^{ikb}[A(\beta - ik)e^{-\beta b} - B(\beta + ik)e^{\beta b}] \end{aligned} \quad (E.7)$$

El conjunto de las cuatro ecuaciones (E.1), (E.2) y (E.7) permiten en primera instancia encontrar los valores de las constantes A , B , C y D .

Para tener una solución no trivial ($A = B = C = D = 0$) es necesario que el determinante característico sea nulo, es decir (habiendo factorizado -1 en la tercera y cuarta columna):

$$\left| \begin{array}{cccc} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \beta & -\beta & i\alpha & -i\alpha \\ e^{ikb}e^{-\beta b} & e^{ikb}e^{\beta b} & e^{-ikc}e^{i\alpha c} & e^{-ikc}e^{-i\alpha c} \\ (\beta - ik)e^{ikb}e^{-\beta b} & -(\beta + ik)e^{ikb}e^{\beta b} & i(\alpha - k)e^{-ikc}e^{i\alpha c} & -i(\alpha + k)e^{-ikc}e^{-i\alpha c} \end{array} \right| = 0$$

Sumándole a la cuarta fila el resultado de multiplicar la tercera fila por ik se obtiene:

$$\left| \begin{array}{cccc} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \beta & -\beta & i\alpha & -i\alpha \\ e^{ikb}e^{-\beta b} & e^{ikb}e^{\beta b} & e^{-ikc}e^{i\alpha c} & e^{-ikc}e^{-i\alpha c} \\ \beta e^{ikb}e^{-\beta b} & -\beta e^{ikb}e^{\beta b} & i\alpha e^{-ikc}e^{i\alpha c} & -i\alpha e^{-ikc}e^{-i\alpha c} \end{array} \right| = 0$$

Teniendo en cuenta que $a = b + c$, al multiplicar las filas 3 y 4 por e^{-ika} se llega a:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \beta & -\beta & i\alpha & -i\alpha \\ e^{-\beta b} & e^{\beta b} & e^{-ika} e^{iac} & e^{-ika} e^{-iac} \\ \beta e^{-\beta b} & -\beta e^{\beta b} & i\alpha e^{-ika} e^{iac} & -i\alpha e^{-ika} e^{-iac} \end{vmatrix} = 0$$

Al sumar las columnas 1 y 2 y las columnas 3 y 4, el resultado es:

$$\begin{vmatrix} 1 & 2 & 1 & 2 \\ \beta & 0 & i\alpha & 0 \\ e^{-\beta b} & e^{-\beta b} e^{\beta b} & e^{-ika} e^{iac} & e^{-ika} (e^{iac} + e^{-iac}) \\ \beta e^{-\beta b} & \beta(e^{-\beta b} e^{\beta b}) & i\alpha e^{-ika} e^{iac} & i\alpha e^{-ika} (e^{iac} - e^{-iac}) \end{vmatrix} = 0$$

Restando ahora la columna 2 dividida por 2 de la columna 1, y la columna 4 dividida por 2 de la columna 3; y recordando las definiciones de las funciones hiperbólicas y trigonométricas se obtiene finalmente.

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ \beta & 0 & i\alpha & 0 \\ -\operatorname{senh} \beta b & \cosh \beta b & i e^{-ika} \operatorname{sen} \alpha c & e^{-ika} \cos \alpha c \\ \beta \cosh \beta b & \operatorname{senh} \beta b & i\alpha e^{-ika} \cos \alpha c & -\alpha e^{-ika} \operatorname{sen} \alpha c \end{vmatrix} = 0$$

Al resolver el determinante por la cuarta fila por el método de menores dividiendo por i , se obtiene el siguiente resultado:

$$\begin{aligned} &+ \beta \cosh \beta b [\alpha \cos \alpha c e^{-ika} - \alpha \cosh \beta b] \\ &+ \beta \operatorname{senh} \beta b [\beta \operatorname{sen} \alpha c e^{-ika} + \alpha \operatorname{senh} \beta b] \\ &+ \alpha \cos \alpha c e^{-ika} [\beta \cosh \beta b - \beta \cos \alpha c e^{-ika}] \\ &+ \alpha \operatorname{sen} \alpha c e^{-ika} [\beta \operatorname{senh} \beta b - \beta \operatorname{sen} \alpha c e^{-ika}] = 0 \end{aligned}$$

Luego de un poco de aritmética empleando identidades trigonométricas y de funciones hiperbólicas, se llega a:

$$\cos(ka) = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \operatorname{senh} \beta b \operatorname{sen} \alpha c + \cosh \beta b \cos \alpha c$$

que es la expresión buscada.

Apéndice F

Tabla periódica de los elementos

En la página siguiente se encuentra una tabla periódica elemental, adaptada de *Phys. Rev. D: Particles and Fields* **66** 81 (2002). En ella aparece la siguiente información:

Número atómico en la parte superior izquierda de cada casilla. Éste es igual al número de protones del núcleo.

Símbolo del elemento en la parte superior derecha.

Nombre del elemento en la parte central.

Masa atómica en la parte inferior. Un número entre paréntesis significa que se trata de la masa del isótopo más estable o mejor conocido.

La tabla F.2 muestra la configuración electrónica de los elementos.

TABLA F.1. Tabla periódica de los elementos.

IA													
1 H	Hidrógeno 1.00794	IIA							VIIIB			VIIIB	
3 Li	4 Be												
Litio 6.941	Berilio 9.012182												
11 Na	12 Mg	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB			VIIIB	VIIIB	VIIIB		
Sodio 22.989770	Magnesio 24.3050												
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni				
Potasio 39.0983	Calcio 40.078	Escandio 44.955910	Titanio 47.867	Vanadio 50.9415	Cromo 51.9961	Manganoso 54.938049	Hierro 55.845	Cobalto 58.933200	Níquel 58.69340				
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd				
Rubidio 85.4678	Estroncio 87.62	Itrio 88.90585	Circonio 91.224	Niobio 92.90638	Molibdeno 95.94	Tecnecio (97.907215)	Rutenio 101.07	Rodio 102.90550	Paladio 106.42				
55 Cs	56 Ba	57-71 Lantanidos	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt				
Cesio 132.90545	Bario 137.327		Hafnio 178.49	Tantalo 180.9479	Tungsteno 183.84	Renio 186.207	Osmio 190.23	Iridio 192.217	Platino 195.078				
87 Fr	88 Ra	89-103 Actínidos	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110				
Francio (223.019731)	Radio (226.025402)		Rutherford (261.1089)	Dubnium (262.1144)	Seaborg. (263.1186)	Bohrium (262.1231)	Hassium (265.1306)	Meitner. (266.1378)	(269.273)				
Lantanidos		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd				
		Lantano 138.9055	Cerio 140.116	Praseodimio 140.90765	Neodimio 144.24	Prometio (144.912745)	Samario 150.36	Europio 151.964	Gadolinio 157.25				
Actínidos		89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm				
		Actinio (227.027747)	Torio 232.0381	Protactinio 231.03588	Uranio 238.0289	Neptunio (237.048166)	Plutonio (244.064197)	Americio (243.061372)	Curio (247.0703469)				

TABLA F.1. Tabla periódica de los elementos (continuación).

							VIIIA
		IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	2 He Helio 4.002602
IB	IIB	5 B Boro 10.811	6 C Carbono 12.0107	7 N Nitrógeno 14.00674	8 O Oxígeno 15.9994	9 F Flúor 18.9984032	10 Ne Neón 20.1797
		13 Al Aluminio 26.981538	14 Si Silicio 28.0855	15 P Fósforo 30.973761	16 S Azufre 32.066	17 Cl Cloro 35.4527	18 Ar Argón 39.948
29 Cu Cobre 63.546	30 Zn Zinc 65.39	31 Ga Galio 69.723	32 Ge Germanio 72.61	33 As Arsénico 74.92160	34 Se Selenio 78.96	35 Br Bromo 79.904	36 Kr Kriptón 83.80
47 Ag Plata 107.8682	48 Cd Cadmio 112.411	49 In Indio 114.818	50 Sn Estafño 118.710	51 Sb Antimonio 121.760	52 Te Teluro 127.60	53 I Yodo 126.90447	54 Xe Xenón 131.29
79 Au Oro 196.96655	80 Hg Mercurio 200.59	81 Tl Talio 204.3833	82 Pb Plomo 207.2	83 Bi Bismuto (208.982415)	84 Po Polonio (208.982415)	85 At Ástato (209.987131)	86 Rn Radón (222.017570)
111 (272)	112 (277)						
65 Tb Terbio 158.92534	66 Dy Disprosio 162.50	67 Ho Holmio 164.93032	68 Er Erbio 167.26	69 Tm Tulio 168.93421	70 Yb Iterbio 173.04	71 Lu Lutecio 174.967	
97 Bk Berkelio (247.070298)	98 Cf Californio (251.079579)	99 Es Einstenio (252.08297)	100 Fm Fermio (257.095096)	101 Md Mendelevio (258.098427)	102 No Nobelio (259.1011)	103 Lr Lawrencio (262.1098)	

TABLA F.2. Estructura electrónica de los elementos.

N. A.	Símbolo	Configuración	N. A.	Símbolo	Configuración
1	H	1s	53	I	(Kr)4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵
2	He	1s ²	54	Xe	(Kr)4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶
3	Li	(He)2s	55	Cs	(Xe)6s
4	Be	(He)2s ²	56	Ba	(Xe)6s ²
5	B	(He)2s ² 2p	57	La	(Xe)5d 6s ²
6	C	(He)2s ² 2p ²	58	Ce	(Xe)4f 5d 6s ²
7	N	(He)2s ² 2p ³	59	Pr	(Xe)4f ³ 6s ²
8	O	(He)2s ² 2p ⁴	60	Nd	(Xe)4f ⁴ 6s ²
9	F	(He)2s ² 2p ⁵	61	Pm	(Xe)4f ⁵ 6s ²
10	Ne	(He)2s ² 2p ⁶	62	Sm	(Xe)4f ⁶ 6s ²
11	Na	(Ne)3s	63	Eu	(Xe)4f ⁷ 6s ²
12	Mg	(Ne)3s ²	64	Gd	(Xe)4f ⁷ 5d 6s ²
13	Al	(Ne)3s ² 3p	65	Tb	(Xe)4f ⁹ 6s ²
14	Si	(Ne)3s ² 3p ²	66	Dy	(Xe)4f ¹⁰ 6s ²
15	P	(Ne)3s ² 3p ³	67	Ho	(Xe)4f ¹¹ 6s ²
16	S	(Ne)3s ² 3p ⁴	68	Er	(Xe)4f ¹² 6s ²
17	Cl	(Ne)3s ² 3p ⁵	69	Tm	(Xe)4f ¹³ 6s ²
18	Ar	(Ne)3s ² 3p ⁶	70	Yb	(Xe)4f ¹⁴ 6s ²
19	K	(Ar)4s	71	Lu	(Xe)4f ¹⁴ 5d 6s ²
20	Ca	(Ar)4s ²	72	Hf	(Xe)4f ¹⁴ 5d ² 6s ²
21	Sc	(Ar)3d 4s ²	73	Ta	(Xe)4f ¹⁴ 5d ³ 6s ²
22	Ti	(Ar)3d ² 4s ²	74	W	(Xe)4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ²
23	V	(Ar)3d ³ 4s ²	75	Re	(Xe)4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ²
24	Cr	(Ar)3d ⁵ 4s	76	Os	(Xe)4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ²
25	Mn	(Ar)3d ⁵ 4s ²	77	Ir	(Xe)4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ²
26	Fe	(Ar)3d ⁶ 4s ²	78	Pt	(Xe)4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s
27	Co	(Ar)3d ⁷ 4s ²	79	Au	(Xe)4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s
28	Ni	(Ar)3d ⁸ 4s ²	80	Hg	(Xe)4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ²
29	Cu	(Ar)3d ¹⁰ 4s	81	Tl	(Xe)4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p
30	Zn	(Ar)3d ¹⁰ 4s ²	82	Pb	(Xe)4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ²
31	Ga	(Ar)3d ¹⁰ 4s ² 4p	83	Bi	(Xe)4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³
32	Ge	(Ar)3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	84	Po	(Xe)4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁴
33	As	(Ar)3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	85	At	(Xe)4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵
34	Se	(Ar)3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	86	Rn	(Xe)4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶
35	Br	(Ar)3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	87	Fr	(Rn)7s
36	Kr	(Ar)3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	88	Ra	(Rn)7s ²
37	Rb	(Kr)5s	89	Ac	(Rn)6d 7s ²
38	Sr	(Kr)5s ²	90	Th	(Rn)6d ² 7s ²
39	Y	(Kr)4d 5s ²	91	Pa	(Rn)5f ² 6d 7s ²
40	Zr	(Kr)4d ² 5s ²	92	U	(Rn)5f ³ 6d 7s ²
41	Nb	(Kr)4d ⁴ 5s	93	Np	(Rn)5f ⁴ 6d 7s ²
42	Mo	(Kr)4d ⁵ 5s	94	Pu	(Rn)5f ⁶ 7s ²
43	Tc	(Kr)4d ⁵ 5s ²	95	Am	(Rn)5f ⁷ 7s ²
44	Ru	(Kr)4d ⁷ 5s	96	Cm	(Rn)5f ⁷ 6d 7s ²
45	Rh	(Kr)4d ⁸ 5s	97	Bk	(Rn)5f ⁹ 7s ²
46	Pd	(Kr)4d ¹⁰	98	Cf	(Rn)5f ¹⁰ 7s ²
47	Ag	(Kr)4d ¹⁰ 5s	99	Es	(Rn)5f ¹¹ 7s ²
48	Cd	(Kr)4d ¹⁰ 5s ²	100	Fm	(Rn)5f ¹² 7s ²
49	In	(Kr)4d ¹⁰ 5s ² 5p	101	Md	(Rn)5f ¹³ 7s ²
50	Sn	(Kr)4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	102	No	(Rn)5f ¹⁴ 7s ²
51	Sb	(Kr)4d ¹⁰ 5s ² 5p ³	103	Lr	(Rn)5f ¹⁴ 7s ² 7p?
52	Te	(Kr)4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴	104	Rf	(Rn)5f ¹⁴ 6d ² 7s ² ?

Apéndice G

Constantes físicas

TABLA G.1. Tomado de :*Physical Review D*, **66**, The American Physical Society, Julio 2002. Conjunto completo de constantes recomendadas por CODATA para uso internacional, en <http://physics.nist.gov/constants>.

Constante	Símbolo	Valor
Número de Avogadro	N_A	$6.02214199 \times 10^{23} \text{ 1/mol}$
Velocidad de la luz	c	$2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s}$
Constante de Boltzmann	k_B	$1.3806503 \times 10^{-23} \text{ J/K}$
Constante de Stefan Boltzmann	σ	$5.670400 \times 10^{-8} \text{ W/(m}^2\text{ K}^4\text{)}$
Constante de desplazamiento de Wien		$2.8977686 \times 10^{-3} \text{ m K}$
Permitividad del vacío	ϵ_0	$8.854187817 \dots \times 10^{-12} \text{ C}^2/(\text{N m}^2)$
Permeabilidad del vacío	μ_0	$4\pi \times 10^{-7} \text{ N/A}^2$
Constante gravitacional	G	$6.672 \times 10^{-11} \text{ m}^3/(\text{kg s}^2)$
Constante de Planck	\hbar	$6.62606876 \times 10^{-34} \text{ J s}$
	\hbar	$1.054571596 \times 10^{-34} \text{ J s}$
Constante de Rydberg	R_H	$1.09737 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$
Radio de Bohr	a_0	$0.5291772083 \times 10^{-10} \text{ m}$
Magnetón de Bohr	μ_B	$9.27401 \times 10^{-24} \text{ J/T}$
Carga del electrón	e	$1.602176462 \times 10^{-19} \text{ C}$
Masa del electrón (en reposo)	m_e	$9.10938188 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Masa del protón (en reposo)	m_p	$1.67262158 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Masa del neutrón (en reposo)	m_n	$1.6748 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Razón de la carga a la masa del electrón	e/m_e	$1.75882 \times 10^{11} \text{ C/kg}$
Razón de la masa del protón a la masa del electrón	m_p/m_e	1836.15
Energía del electrón en reposo		0.510998992 MeV
Volumen de un gas ideal a condiciones normales		$22.414 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{mol}$
	π	3.142592653589793238

Bibliografía

- [1] Acosta V., Cowan C. L., Graham B. J., *Curso de Física Moderna* de C. V., 1975.
- [2] Alonso M., Finn J. E. *Física* Vol. I, II y III , Fondo Educativo Interamericano S. A., 1970.
- [3] Ayra T., *Elementary Modern Physics*, Addison-Wesley Inc., 1975.
- [4] Azaroff L., Brophy J., *Electronic Processes in Materials*, McGraw-Hill Inc., International Student Edition, 1963.
- [5] Beiser A., *Conceptos de Física Moderna*, McGraw Hill Inc., 1965.
- [6] *Berkeley Physics Course* Vol I y IV, Editorial Reverté S. A., 1972.
- [7] Constant F. W., *Fundamental Laws of Physics*, Addison-Wesley Inc., 1972.
- [8] Cooper N. L., *An introduction to the Meaning and Structure of Physics*, Harper and Row, 1969.
- [9] Chpolski E., *Physique Atomique* Vol. I, Editions Mir, 1974.
- [10] Eisberg R. M., *Fundamentals of Modern Physics*, John Wiley and Sons, 1963.
- [11] Eisberg R. M., Resnick R., *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles* John Wiley and Sons Inc., 1974.
- [12] Falicov L., *La estructura Electrónica de los Sólidos*, Monografía No. 3 O.E.A.
- [13] Feynman R. P., Leighton R. B., Sands M., *The Feynman Lectures on Physics*, Vol. I y III, Addison-Wesley Inc., 1963.
- [14] Fong P., *Elementary Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Inc., 1962.

- [15] French A. P., *Principles of Modern Physics*. John Wiley and Sons Inc., 1958.
- [16] Glassner A.. *Fundamentos de la Ciencia Nuclear*, Editorial Victor Lerú S. R. L.. 1961.
- [17] Halliday D.. *Introducción a la Física Nuclear* , Editorial Reverté S. A.. 1961.
- [18] Helliwell T. M., *Introduction to Special Relativity*, Allyn and Lacon Inc., 1966.
- [19] Hutchison T. S., Baird D. C., *The Physics of Engineering Solids*, Willey International Edition, 1963.
- [20] Kaplan I., *Nuclear Physics* 2d. ed., Addison-Wesley Inc. , 1963.
- [21] Kittel C., *Introducción a la Física del Estado Sólido*, Editorial Reverté S. A., 1970.
- [22] Kreyszig E., *Advanced Engineering Mathematics*, John Wiley and Sons Inc., 1962.
- [23] Leighton R. B., *Principles of Modern Physics.*, McGraw-Hill Inc., 1959.
- [24] Mandl F., *Quantum Mechanics*, Butterworths, 1957 .
- [25] Mc Kelvey J. P., *Solid State and Semiconductor Physics*, Harper and Row, 1966.
- [26] Mermin N. D., *Space and Time in Special Relativity.*, McGraw-Hill Inc., 1968.
- [27] Morcillo R. J., Orza J. M., *Espectroscopia: Estructura y Espectros Atómicos*, Editorial Alhambra S. A., 1972.
- [28] Oldenberg O., *Introduction to Atomic and Nuclear Physics* 3d. ed., McGraw-Hill Inc., 1961.
- [29] Omar A., *Elementary Solid State Physics*, Addison-Wesley Inc., 1975.
- [30] Pauling L., Wilson E. B., *Introduction to Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Inc., 1935.
- [31] Pipes L. A., *Applied Mathematics for Engineers and Physicists* 2d. ed., McGraw-Hill Inc., International Student Edition 1958.

- [32] Resnick R., *Conceptos de Relatividad y teoría Cuántica* Editorial Limusa, 1976.
- [33] Richtmyer F. K., Kennard E. H., Lauritsen T., *Introduction to Modern Physics* 5th. ed., McGraw-Hill Inc., 1955.
- [34] Rodríguez L. J., *Notas de estado Sólido*, Universidad Nacional de Colombia, 1975.
- [35] Russell H. J., Grunwald E., *Atoms, Molecules and Chemical Change* 3d. ed., Prentice-Hall Inc., 1960.
- [36] Sachs M., *Solid State Theory*, McGraw-Hill Inc., 1963.
- [37] Semat H., *Introducción a la Física Atómica y Molecular*, Ediciones Aguilar S. A., 1957.
- [38] Slater C. J., *Modern Physics*, McGraw-Hill Inc., International Student Edition, 1955.
- [39] Sproull R. L., *Modern Physics: The Quantum Physics of Atoms, Solids and Nuclei*, 2d. ed., John Wiley and Sons Inc., 1964.
- [40] Wehr M. R., Richard J. A., *Physics of the Atom*, Addison-Wesley Inc., 1963.

LECTURAS ADICIONALES

- [41] Bennett L., *El universo y el Dr. Einstein*, Breviarios del Fondo de Cultura Económica No. **132**, 1957.
- [42] Bohr N., *Física atómica y conocimiento humano*, Ediciones Aguilar S. A., 1964.
- [43] De Broglie L., *La física nueva y los cuántos*, Editorial Losada, 1968.
- [44] Einstein A., *La física aventura del pensamiento*, Editorial Losada, 1986.
- [45] Einstein A., Grünbaum A. y otros, *La teoría de la relatividad*, Alianza Editorial, 1985.
- [46] Frisch O. R., *La física atómica contemporánea*, Fondo de Cultura Económica colección popular No. **69**, 1975.
- [47] Frisch O. R., Hoyaux M. F. y otros, *Panorama de la física contemporánea*, Alianza Editorial, 1982.
- [48] Gaines M. J., *La energía atómica*, Editorial Bruguera S. A.

- [49] Gamow G., *Biografía de la física*. Biblioteca General Salvat No. 11, 1983.
- [50] Gamow G.. *En el país de las maravillas*. Brevarios del Fondo de Cultura Económica No. 134, 1995.
- [51] Gamow G., *La investigación del átomo*, Brevarios del Fondo de Cultura Económicas No. 116, 1956.
- [52] Gamow G., *Treinta años que conmovieron la física*, Editorial Universitaria de Buenos Aires S. E. M, 1974.
- [53] Jeans J., *Historia de la física*, Brevarios del Fondo de Cultura Económica No. 84, 1953.
- [54] Jordan P., *La física del siglo 20*, Brevarios del Fondo de Cultura Económica No. 22, 1963.
- [55] Landau L., Rumer Y., *Qué es la teoría de la relatividad*, Editorial Mir, 1975.
- [56] Ponomarev L., *Au pays des quanta*, Editorial Mir.
- [57] Rydnick V., *Qu'est-ce que la mecanique quantique?*, Editorial Mir.
- [58] Selvaggi F., *La estructura de la materia*, Editorial Herder, 1970.
- [59] Taylor J. G., *La nueva física*, Alianza Editorial.

Índice de Materias

- actividad, 244
adición de velocidades
 regla clásica, 4
amplitud de oscilación del electrón, 66
ángulo de dispersión, 97
átomos hidrogenoides, 103

banda de conducción, 305
banda de valencia, 305
bandas de energía, 304
brecha de energía prohibida, 306

cadena biatómica, 313
cadena lineal monoatómica, 311
camino libre medio, 299
capa hemirreductora, 122
captura electrónica, 255
catástrofe ultravioleta, 52
ciclo de Bethe, 262
ciclo de Critchfield, 262
coeficiente de absorción, 122
coeficiente de absorción másico, 122
condición de Bragg, 282
conducción iónica, 291
conductividad eléctrica, 297, **298**
configuración electrónica, 346
constante de apantallamiento, 121
constante de desintegración, 244
constante de estructura fina, 222
constante de Planck, 53
constante de red, 283
constante de Rydberg, 89
corriente de saturación, 64

corrimiento de Compton, 72
cristal molecular, 293
cuantización de la energía, 55
cuantización del espacio, 209
cuerpo negro, 47

densidad de probabilidad, 147
densidad de probabilidad radial, 199
diagrama de Moseley, 121
dislocación de arista, 289
dislocación helicoidal, 289
dispersión Thomson, 77
doblete, 218

ecuación de Schrödinger
 independiente del tiempo, **150**
ecuación de onda
 electromagnética en el vacío, **6**
ecuación diferencial de Hermite, 327
ecuaciones de Maxwell
 en el vacío, **6**
efecto compton, 72
efecto túnel, 173
efecto Zeeman anómalo, 221
electrón, 92
energía de Fermi, 71
energía de ionización, 71
energía de enlace, 102, 231
energía de excitación, 102
energía de ionización, 102
energía de punto cero, 184
energía umbral, 252

- enlaces covalentes, 271
enlaces cristalinos, 290
enlaces iónicos, 271
enlaces moleculares, 271
equilibrio radiactivo, 246
espectrógrafo de masa, 238
espectrómetro de masa, 238
espectro característico, 116
espectro de bandas, 86
espectro de radiación electromagnética, 44
espectros de absorción, 86
espectros de emisión, 86
espectros discretos, 85
espectroscopía, 85
estado base, 101
estados estacionarios, 99
estados excitados, 101
estructura fina, 90, 218
éter, 5
evento físico, 3

fonones ópticos, 315
fonones acústicos, 315
fotocorriente, 62
fotoelectrones, 62
fotofisión, 258
frecuencia umbral, 63
función de onda, 146
función de trabajo, 67
función propia, 152
función trabajo, 71
funciones asociadas de Laguerre, 332

hamiltoniano, 151

imperfecciones cristalinas, 288
índices de Miller, 280
interacción spin-órbita, 222
isótopos, 92

líneas de Fraunhofer, 84
ley de Ohm, 296, 297

longitud de onda Compton, 76
longitud de onda de De Broglie, 131

magnetón de Bohr, 214
marco de referencia, 2
marco inercial de referencia, 2
masa efectiva, 298
materiales fotoconductores, 308
modelo de la gota líquida, 258
momento angular orbital, 208
movimiento, 2

núcleo radiactivo, 234
núcleos isóbaros, 235
núcleos isótonos, 236
número atómico, 96, 227
número cuántico, 166
número de masa, 229
nucleones, 229

onda de materia, 131
orden de difracción, 284

paquete de ondas, 138
parámetro de impacto, 97
polinomios asociados de Legendre, 330
Polinomios de Hermite, 182
polinomios de Laguerre, 335
polinomios de Legendre, 330
potencial de contacto, 71
primer postulado, 152
primera ley de Newton, 2
principio clásico de relatividad, 5
principio de exclusión de Pauli, 220
principios de incertidumbre, 137
protones, 96
punto clásico de retorno, 172
punto de equilibrio, 172

quantum de energía, 55

- radiación de frenado, 116
- radiación térmica, 47
- radiactividad, 92, 234
- radiancia, 50
- radio de Bohr, 100
- rama óptica, 314
- rama acústica, 314
- rayos catódicos, 91
- rayos X, 114
- reacción en cadena, 260
- reacción endotérmica, 252
- reacción exotérmica, 252
- redes de Bravais, 274
- relación de dispersión, 312
- resistencia eléctrica, 296
- resistividad, 296

- sólidos amorfos, 270
- sólidos cristalinos, 270
- sólidos cristalinos metálicos, 271
- sólidos cristalinos no metálicos,
271
- segunda ley de Newton, 2
- segundo postulado, 154
- semimetales, 309
- serie *K*, 118
- serie espectral, 89

- tabla periódica, 344
- teorema de Bloch, 300
- transformaciones de Galileo, 4
- transuránidos, 256
- triplete de Lorentz, 212

- unidad de masa atómica, 230

- valor propio, 152
- velocidad de arrastre, 298
- velocidad de fase, 130
- velocidad de grupo, 130
- velocidad de la luz, 6
- vida media, 244
- vida promedio, 244
- voltaje de frenado, 63

Este libro se termino de imprimir en
marzo de 2003 en la Universidad
Nacional de Colombia, UNIBIBLOS
Correo electrónico:
unibiblio@dnic.unal.edu.co