

FISICA CUANTICA

Secretaría General de la
Organización de los Estados Americanos
Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico



FISICA CUANTICA

por

Onofre Rojo Asenjo
UPIICSA, Instituto Politécnico Nacional
México 14, D.F., MÉXICO

y

Harold V. McIntosh
Universidad Autónoma de Puebla
Puebla, MÉXICO

Secretaría General de la
Organización de los Estados Americanos
Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico
Washington, D.C.

© Copyright 1971 by
The General Secretariat of the
Organization of American States
Washington, D.C.

Derechos Reservados, 1971
Secretaría General de la
Organización de los Estados Americanos
Washington, D.C.

Primera edición, 1971
Segunda edición,
corregida y actualizada 1980

Esta monografía ha sido preparada para su publicación en el
Departamento de Asuntos Científicos y Tecnológicos de la
Secretaría General de la Organización de los Estados
Americanos

Editora: Eva V. Chesneau

Asesor Técnico de la
Primera edición:

Dr. Carlos Alberto Heras
Comisión de Desarrollo y Coordinación
Científica
Universidad de Oriente
Cumaná, Venezuela

A los lectores

El programa de monografías científicas es una faceta de la vasta labor de la Organización de los Estados Americanos, a cargo del Departamento de Asuntos Científicos de la Secretaría General de dicha Organización, a cuyo financiamiento contribuye en forma importante el Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico.

Concebido por los Jefes de Estado Americanos en su Reunión celebrada en Punta del Este, Uruguay, en 1967, y cristalizado en las deliberaciones y mandatos de la Quinta Reunión del Consejo Interamericano Cultural, llevada a cabo en Maracay, Venezuela, en 1968, el Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico es la expresión de las aspiraciones preconizadas por los Jefes de Estado Americanos en el sentido de poner la ciencia y la tecnología al servicio de los pueblos latinoamericanos.

Demostando gran visión, dichos dignatarios reconocieron que la ciencia y la tecnología están transformando la estructura económica y social de muchas naciones y que, en esta hora, por ser instrumento indispensable de progreso en América Latina, necesitan un impulso sin precedentes.

El Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico es un complemento de los esfuerzos nacionales de los países latinoamericanos y se orienta hacia la adopción de medidas que permitan el fomento de la investigación, la enseñanza y la difusión de la ciencia y la tecnología; la formación y perfeccionamiento de personal científico; el intercambio de informaciones, y la transferencia y adaptación a los países latinoamericanos del conocimiento y las tecnologías generadas en otras regiones.

En el cumplimiento de estas premisas fundamentales, el programa de monografías representa una contribución directa a la enseñanza de las ciencias en niveles educativos que abarcan importantísimos sectores de la población y, al mismo tiempo, propugna la difusión del saber científico.

La colección de monografías científicas consta de cuatro series, en español y portugués, sobre temas de física, química, biología y matemática. Desde sus comienzos, estas obras se destinaron a profesores y alumnos de ciencias de enseñanza secundaria y de los primeros años de la universitaria; de éstos se tiene ya testimonio de su buena acogida.

Este prefacio brinda al Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico de la Secretaría General de la Organización de los Estados Americanos la ocasión de agradecer a los doctores Onofre Rojo Asenjo y Harold V. McIntosh, autores de esta monografía, y a quienes tengan el interés y buena voluntad de contribuir a su divulgación.

ÍNDICE

	Página
A los Lectores.....	iii
 PRIMERA PARTE. DESARROLLO HISTÓRICO DE LAS IDEAS CUÁNTICAS	
Introducción.....	1
Fórmula Empírica de la Radiación y su Deducción	
Termodinámica.....	3
Ley Clásica de Radiación Electromagnética.....	5
Ley de Radiación de Planck.....	6
Ley de Radiación de Einstein; Fotones y Emisión	
Estimulada: Láseres y Máseres.....	8
Aplicaciones de la Teoría Cuántica: Calor	
Específico de los Sólidos.....	10
Efecto Fotoeléctrico.....	11
Efecto Compton.....	13
Átomos: Modelos y Espectros.....	13
Teoría Cuántica del Átomo. Modelo de Bohr.....	14
Confirmación Experimental de los Estados	
Estacionarios.....	16
Principio de Correspondencia.....	17
Números Cuánticos y Estructura Fina.....	17
Ondas de de Broglie.....	18
Principios de Complementaridad.....	20
 SEGUNDA PARTE. LA MECÁNICA CUÁNTICA	
Postulados Fundamentales.....	23
Principio de Indeterminación.....	26
El Principio de Indeterminación y los Átomos.....	28
Penetración de Barreras y Pozos de Potencial.....	28
Cuantificación de la Energía en Pozos	
Infinitos y Finitos.....	30
Oscilador Armónico.....	31
Ecuación de Schrödinger.....	32
El Átomo de Hidrógeno.....	36
Momentum Angular.....	38
Experimento de Stern y Gerlach.....	40
Spin.....	41
Principio de Pauli. Números Cuánticos	
y Estructura Atómica.....	43
Sistemas de Partículas Idénticas: Principio de	
Simetrización.....	45
Teoría Cuántica de las Moléculas.....	48

Teoría Cuántica de Campos	51
Conclusión	55
Bibliografía	57

1

DESARROLLO HISTÓRICO DE LAS IDEAS CUÁNTICAS

INTRODUCCIÓN

El desarrollo de la física cuántica comenzó a partir de la termodinámica y ésta se desarrolló durante el siglo XIX al mismo tiempo que la revolución industrial. A partir de hechos empíricos, tales como la eficiencia de las máquinas térmicas, se pasó de teorías matemáticas del calor elaboradas por Fourier, Nernst, Ostwald, Planck, etc., a un esfuerzo por explicar las propiedades del calor desde un punto de vista mecánico basado en un tratamiento estadístico del movimiento de partículas individuales como los átomos de un gas. Fue imposible desarrollar una teoría puramente mecánica del calor porque era necesario tomar en cuenta la transferencia del calor por varios procesos, uno de los cuales era la radiación, y la radiación es un fenómeno estrictamente electromagnético, no mecánico. Cualquier teoría del calor tenía que considerar todas las posibles formas de energía, y aunque alguna de éstas podía ser pasada por alto, con dificultad podía evitarse en la mayoría de los estudios la inclusión de la energía cinética del movimiento de las partículas, la energía potencial de la interacción entre las partículas, y la energía transmitida al campo electromagnético. Utilizando solamente la termodinámica, el electromagnetismo y la mecánica clásica fue imposible explicar fenómenos tales como la incandescencia. De todos era sabido que el color de un cuerpo incandescente depende de la temperatura. Una herradura calentada por el herrero comenzaba con un rojo oscuro, que se hacía más claro a medida que se calentaba más y el color pasaba de anaranjado a amarillo. Si la herradura se calentaba a temperaturas extremadamente altas, la luz emitida era cada vez más blanca. En este hecho se basa la manufactura de pirómetros, con los cuales se mide la temperatura de sustancias, tales como el hierro fundido en un cubilote.

Desde remota antigüedad se había observado que algunas estrellas eran más rojizas que otras; Aldebarán es una estrella muy roja, en tanto que Sirio es bastante azulada. Se supuso que estas variaciones de color se debían a la distinta temperatura de la superficie de estas estrellas.

No siempre se puede asociar el color de un cuerpo con su temperatura; por ejemplo, la vaporización del sodio, o más simple aún, la de la sal de cocina por medio de la llama, produce en ésta un intenso color amarillo, y otros metales producen otras coloraciones. Por éstas y otras razones, las sales de estroncio y de bario se utilizan para producir el rojo y el verde, respectivamente, de los fuegos artificiales.

Se constató que algunos materiales emitían luz de una longitud de onda bien definida, cuya intensidad podía depender de la temperatura de

aquéllos y cuya frecuencia no cambiaba. Sin embargo, la mayoría de los materiales sí mostraban una variación del color al variar la temperatura. Consecuentemente, se introdujo una idealización --el cuerpo negro--, que no es selectivo en cuanto a la radiación que puede emitir o absorber, y al que pueden aproximarse más o menos los cuerpos materiales reales. Una imagen del cuerpo negro nos la ofrece una cavidad calentada y provista de un pequeño agujero. La radiación que entra en ella por el agujero será reflejada o absorbida; pero, una vez dentro de la cavidad, es muy pequeña la probabilidad de que vuelva a salir por el agujero. De esta manera, tal estructura es perfectamente absorbente para todas las frecuencias.

Se puede pensar también que esta cavidad es igualmente no selectiva respecto a la radiación que emite, y que por lo tanto sirve como modelo teórico cuyas propiedades se pueden analizar.

2

Sólo se puede entender el comienzo y el desarrollo de la mecánica cuántica siguiendo los esfuerzos hechos para obtener modelos matemáticos que explicasen los diferentes resultados, tanto empíricos como experimentales, conocidos hacia finales del siglo pasado. Cuanto más cuidadosamente se analizaban estos modelos y por tanto se tornaban más complejos, más y más obvia era su ineptitud para explicar los fenómenos observados. La única manera de reconciliar modelos y hechos fue una hipótesis bastante arbitraria formulada por Planck y que se hubiera rechazado como absurda, si no fuera porque no sólo explicaba la distribución de la intensidad de la radiación de un cuerpo negro, sino que además abría la posibilidad de explicar otras viejas anomalías, como la desviación, a bajas temperaturas, de los calores específicos respecto de la regla de Dulong y Petit, o el calor específico anómalo de gases diatómicos. Poco a poco se fueron acumulando otros testimonios comprobatorios de esta hipótesis, como la explicación, por Einstein, del efecto fotoeléctrico a partir de la cuantificación de la energía de las ondas luminosas prevista por la fórmula de Planck.

Es conveniente distinguir tres grandes períodos en el desarrollo de la física. En el primero, llamado clásico, se produjo el desarrollo de la mecánica, del electromagnetismo y de la termodinámica, de manera que parecía posible alcanzar mediante estas disciplinas una visión unificada de la naturaleza. Y aunque una amplia variedad de fenómenos físicos podían ser así explicados quedaban todavía muchos otros que tenían que ser postulados "ad hoc". Por ejemplo, que un elemento fuese aislador o conductor, que tuviese un cierto punto de fusión, o un dado calor específico, o cierto grado de magnetización, eran hechos que no se podían deducir de otros conocidos. Por tanto, los intentos de explicar las propiedades microscópicas de la materia a partir de primeros principios, suponiéndola compuesta de átomos, o los intentos, ya mencionados, de deducir las propiedades termodinámicas a partir de estas mismas propiedades microscópicas, conducían a contradicciones y anomalías.

El segundo período comenzó con la hipótesis cuántica de Planck (1900) y durante él se hizo un gran esfuerzo por descubrir qué era lo que estaba tan fundamentalmente equivocado en los principios de la mecánica

clásica o en la formulación hecha por Maxwell del campo electromagnético, que impedía predecir la casi evidente necesidad de la cuantificación, la cual parecía resolver la mayor parte de las contradicciones y que, de manera creciente, era confirmada por datos experimentales. Este período comenzó con el uso de la hipótesis cuántica para imponer sistema y orden en áreas previamente oscuras y mal conocidas; se progresó gracias a las reglas de cuantificación de Bohr y a las modificaciones, en su mayoría empíricas, de la mecánica y de la electrodinámica, y así se logró alcanzar el desarrollo conducente a la mecánica ondulatoria.

El tercer período comenzó en 1926 con la adopción definitiva de una ecuación diferencial y de un cálculo de operadores que, desde entonces, han formado la base teórica de toda la física. Al mismo tiempo, un gran número de principios físicos, cuya validez se había hecho cada vez más evidente, como el de indeterminación y el de complementariedad, quedaron implícitos en las propiedades matemáticas de las ecuaciones de onda y de las cantidades que pretenden representar. Por otra parte, el esfuerzo por comprender esas leyes nuevas y extrañas del mundo microscópico, tan alejadas de las que rigen el mundo de la experiencia diaria, condujo a una formulación más realista de la teoría de la medición, al reconocer la importancia de la interacción entre el aparato de medida y el sistema observado durante el proceso de medición. Clásicamente se pensaba que esta interacción se podía hacer tan pequeña como se quisiera.

Aunque es aventurado decir que la mecánica cuántica es ya una teoría axiomática, matemática y lógicamente compatible, el tercer período ha conseguido el tratamiento sistemático de una enorme variedad de fenómenos físicos y químicos, y en tanto no se excedan ciertos límites de energía, dimensiones o tiempos, parecen haber fenómenos físicos que no puedan, por lo menos en principio, ser explicados mediante las ecuaciones básicas de la mecánica cuántica y el análisis matemático de sus soluciones.

FÓRMULA EMPÍRICA DE LA RADIACIÓN Y SU DEDUCCIÓN TERMODINÁMICA

Consideremos radiación encerrada en un recipiente de paredes perfectamente reflectoras, y por algún procedimiento introduzcamos en tal recipiente un pedazo de material capaz de absorber radiación y emitirla después. Al cabo de cierto tiempo, se habrá establecido un equilibrio dinámico, esto es, la cantidad de radiación absorbida será exactamente igual a la de radiación emitida. Si ya en este estado, se abre un agujero en el recipiente y se analiza la radiación que sale por el mismo, lo que se puede hacer experimentalmente con un prisma, se observa que la intensidad de la radiación que emerge por el agujero sólo depende de la frecuencia de la radiación observada y de la temperatura absoluta del recipiente, pero no de la forma del recipiente, ni del material de que está hecho. Esto puede expresarse matemáticamente por

$$I(\nu) = F(\nu, T) \quad [1]$$

donde ν es la frecuencia y T la temperatura absoluta. Aunque la forma

explícita de esta función $F(\nu, T)$ no fue determinada teóricamente en sus comienzos, los resultados experimentales para la variación de $I(\nu)$ con ν a diferentes temperaturas absolutas, daban curvas como las representadas en la figura 1. Se observa en ella que para cada temperatura absoluta existe un máximo de $I(\nu)$, y que a medida que la temperatura aumenta, el valor de la frecuencia correspondiente a un máximo de la curva se desplaza. Si ahora tomamos las frecuencias de los máximos de varias curvas y las representamos en función de la temperatura absoluta, resulta que los puntos se encuentran sobre una recta (Fig. 2).

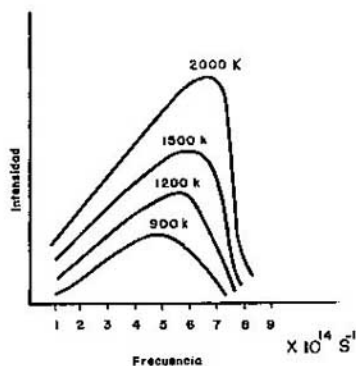


Fig. 1. Distribución de la intensidad de la radiación en función de la frecuencia.

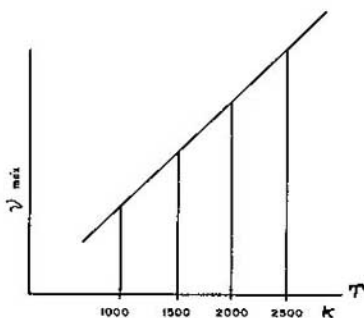


Fig. 2. Relación lineal entre frecuencia del máximo de la Fig. 1 y temperatura absoluta.

Conforme a la figura 2, podemos escribir la relación matemática:

$$\nu_{\text{máx}} = bT \quad [2]$$

donde b es una constante. Esta ley se comprueba experimentalmente cada vez que se calienta un alambre, ya que la coloración del mismo, indicadora de la frecuencia de la luz emitida, varía desde el rojo al violeta, pasando sucesivamente por el anaranjado, amarillo, verde, etc., y se llama *Ley de desplazamiento de Wien*. Con esta ley se puede calcular la temperatura de una estrella o la temperatura interior de un horno por el análisis espectral de la respectiva radiación. En el caso de la estrella, se supone, lo cual es aproximadamente cierto, que ésta absorbe y emite radiación como lo haría un cuerpo negro. Wien, utilizando consideraciones termodinámicas, avanzó un poco en la determinación teórica explícita de $F(\nu, T)$ y encontró que

$$I(\nu) = \frac{\nu^3}{c^2} f\left(\frac{\nu}{T}\right) \quad [3]$$

la cual, utilizando la condición de máximo $dI(\nu)/d\nu = 0$, equivale a la ley desplazamiento [3]. De esta manera se precisa un poco más la forma de $I(\nu)$, --ya que se le exige que sea igual al producto de $\frac{\nu^3}{c^2}$ por una fun-

ción de ν/T , donde c es la velocidad de la luz en el vacío. Esta función, que no es posible determinar por métodos termodinámicos, puede ser simplemente ν/T ó $\sqrt{\nu/T}$ ó $e^{-\nu/T}$, etc. Estamos en el camino de encontrar una ley de radiación, a la cual se pide que cumpla las condiciones [2] y [3], esto es, que tenga una frecuencia máxima para cada temperatura, que esta frecuencia satisfaga la ley de desplazamiento, y que la f de [3] sea una función de ν/T . La respuesta no es única porque las condiciones anteriores son necesarias, pero no suficientes. Cuando en física se encuentran situaciones como ésta, son los resultados experimentales los que deciden entre las múltiples alternativas que se brindan.

LEY CLÁSICA DE RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA

Una vez conocido el fenómeno de equilibrio entre radiación y materia y expresado mediante leyes empíricas, se necesita un modelo al que se puedan aplicar los principios de la física para deducir de su estudio lo que muestran los datos experimentales. Se puede imaginar que la sustancia material está formada de átomos que vibran como si fueran resortes que se hubiesen extendido y luego soltado. Estos resortes se llaman osciladores y se caracterizan por una frecuencia bien definida y porque sólo pueden absorber y emitir energía de una frecuencia igual a la suya. Si llamamos $\bar{U}(\nu, T)$ al valor promedio de las energías de todos los osciladores que tienen la frecuencia ν a la temperatura T , se encuentra que la intensidad de la radiación de frecuencia ν presente en la cavidad es:

$$I(\nu) = \frac{2\nu^2}{c^3} \bar{U}(\nu, T). \quad [4]$$

Se ha transformado así el problema de encontrar $f(\nu/T)$ en el de determinar $\bar{U}(\nu, T)$ para oscilador. Esta determinación se puede realizar aplicando el principio de equipartición de la energía, ampliamente utilizado en la teoría cinética de los gases. Según este principio, la energía media asociada con cada grado de libertad de una molécula es $\frac{1}{2} kT$, donde k es la constante de Boltzmann, cuyo valor es $1,381 \times 10^{-23}$ J/K. A los efectos de una teoría cinética, se puede asimilar un átomo vibrante a una molécula monoatómica de un solo grado de libertad, pero por tener a la vez energías potencial y cinética, contribuirá al valor promedio de la energía con $\frac{1}{2} kT$ por cada tipo de energía que interviene. Por lo tanto:

$$\bar{U} = kT \text{ y } I(\nu) = \frac{2\nu^2}{c^3} kT. \quad [5]$$

Esta fórmula satisface la ley de Wien, ya que si escribimos $f(\nu/T) = k(T/\nu)$, obtenemos:

$$I(\nu) = \frac{2\nu^3}{c^3} \frac{kT}{\nu}. \quad [6]$$

Sin embargo, esta fórmula no puede satisfacer la [2], puesto que no existe una frecuencia a la cual $I(\nu)$ tenga un máximo. Por otra parte, indicaría que cuanto mayor fuera la frecuencia, mayor sería la intensidad,

lo que está en total desacuerdo con los hechos experimentales reflejados en la figura 1. En ésta se ve claramente que, a frecuencias muy grandes, la intensidad de la radiación decrece notablemente y tiende a cero. Otro inconveniente, y no pequeño, es que, siendo posibles todas las frecuencias, se necesitaría un número infinito de osciladores para asignar a cada uno de ellos por lo menos una de las frecuencias posibles entre $\nu = 0$ y $\nu = \infty$; esto daría a la cavidad una energía total infinita, lo cual es absurdo.

La fórmula [6] expresa la *ley de Rayleigh-Jeans* (1900, 1909). Por derivarse de la combinación del electromagnetismo clásico con el principio de equipartición de la energía al estilo clásico, el rechazarla (y no hay más remedio que hacerlo pues está en desacuerdo con los resultados experimentales) equivale a rechazar la teoría clásica de la radiación. Esta ley parece sugerir que los osciladores de muy alta frecuencia no deben participar en la equipartición de la energía si se quiere evitar los escollos de las energías infinitas. Sin embargo, conviene hacer notar que la fórmula [6] concuerda bastante bien con los resultados experimentales cuando T es muy grande y ν muy pequeño; pero difiere notablemente de ellos cuando T es pequeña o ν grande. Para frecuencias muy altas, Wien encontró (1896) que podía explicar sus resultados experimentales con la fórmula

$$I(\nu) = 2a \frac{\nu^3}{c^3} e^{-b\nu/T},$$

donde a y b era constantes a ajustar empíricamente. Esta fórmula se llama *ley de Wien*.

LEY DE RADIACIÓN DE PLANCK

El que la ley de Wien concuerde con los resultados experimentales a frecuencias altas y la de Rayleigh-Jeans lo haga a frecuencias bajas, hace sospechar de inmediato que la verdadera ley de radiación debe hallarse a mitad de camino entre ambas. Planck encontró una fórmula empírica (que más tarde dedujo por consideraciones "ad hoc") que se ajustaba exactamente a los hechos experimentales. Esta fórmula es:

$$I(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1},$$

donde h es una constante universal, llamada ahora constante de Planck, de dimensiones energía \times tiempo (acción) e igual a $6,62 \times 10^{-34}$ J/seg. Para llegar a esta fórmula, Planck siguió el mismo camino que para obtener la de Rayleigh-Jeans, pero recurrió a hipótesis suplementarias para soslayar las contradicciones de ésta última. Una de tales hipótesis se refiere a cómo los osciladores pueden absorber o emitir energía, lo que de inmediato conduce a abandonar el principio de equipartición de la energía en los osciladores. Según Planck, cada oscilador sólo puede asumir estados de energía $0, h\nu, 2h\nu, \dots, nh\nu$, y el paso de un estado a otro sólo puede ocurrir por absorción o emisión en unidades de $h\nu$. La idea de que un oscilador puede tener cualquier energía es por lo tanto falsa.

Hay otra manera de ver que un oscilador no puede tener cualquier energía. En 1877, Boltzmann demostró por métodos estadísticos que en un conjunto muy grande de sistemas que no interactúan entre sí, tal como el de los osciladores que estamos considerando, la probabilidad de que un sistema tenga energía E es*

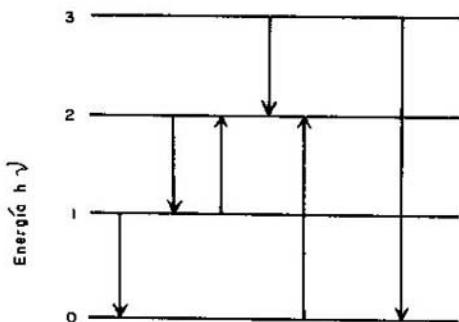
$$P(E) = a e^{-E/kT} \quad [7]$$

donde a es una constante que se determina imponiendo que la probabilidad total sea uno. La probabilidad [7] es proporcional al número de sistemas, en este caso de osciladores, que tienen energía E ; por lo tanto, hay muy pocos osciladores con energías muy grandes (frecuencias muy altas), tal como se desprende de las curvas experimentales de la figura 1. Sin embargo, si se supone que la energía es continua (no cuantificada), la energía media de un oscilador es

$$\bar{U}(\nu, T) = \int_0^{\infty} E P(E) dE \quad [8]$$

y se obtiene $\bar{U}(\nu, T) = kT$, igual que si se utiliza la ley de equipartición de la energía, lo cual, como se vio, conduce a la fórmula de Rayleigh-Jeans. Por lo tanto, como la expresión [7] es de validez completamente general, los osciladores no pueden tener cualquier energía y no se puede usar la ecuación [8] para calcular su energía media. Para hacerlo conforme a la cuantificación sugerida por Planck, representemos cada uno de los estados del oscilador por los niveles de la figura 3:

Fig. 3. Niveles de energía de un oscilador armónico (según Planck). Las flechas indican transiciones.



Sea $E_0 = 0h\nu$; $E_1 = h\nu$; $E_2 = 2h\nu$; ...; $E_n = nh\nu$, y llamemos N_0 ; N_1 ; N_2 ; ...; N_n a la población en cada uno de esos estados, o sea al número de osciladores que tienen esas energías. La energía media será:

$$\bar{U} = \frac{\sum N_i E_i}{\sum N_i}, \quad [9]$$

* En realidad, cuando la energía es continua, la probabilidad de que el oscilador tenga un valor exacto de la energía es cero; sólo se puede hablar de la probabilidad de que el oscilador tenga una energía comprendida entre E y $E + dE$. Esta probabilidad es $P(E) dE$, con $P(E)$ dada por la ecuación [7], la cual es entonces una densidad de probabilidad, en este caso de energía continua.

donde, conforme a la ecuación [8], la población de cada estado está dada por

$$N_1 = b e^{-\epsilon_1/kT}.$$

Para calcular la expresión [9], notemos que

$$N_2 = b e^{-2h\nu/kT} = b N_1 e^{-h\nu/kT}$$

y, en general,

$$N_n = b N_{n-1} e^{-h\nu/kT}$$

Haciendo $e^{-h\nu/kT} = x$ y sumando, se obtiene para la energía media definida por la expresión [9]:

$$\bar{U}(\nu, T) = \frac{h\nu}{e^{-2h\nu/kT} - 1} \quad [10]$$

y la [3] se convierte en

$$I(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad [11]$$

Es fácil comprobar que cuando T es pequeño o ν es muy grande, esta fórmula se transforma en la ley de Wien, y cuando T es grande y ν pequeña, en la de Rayleigh-Jeans. Para obtener esta fórmula, Planck tuvo que abandonar el enfoque termodinámico y recurrir a un concepto probabilístico de la entropía.

LEY DE RADIACIÓN DE EINSTEIN; FOTONES Y EMISIÓN ESTIMULADA; LÁSERES Y MÁSERES

Planck llegó a la deducción de su fórmula basándose en que cada oscilador asume estados igualmente espaciados y en que la transición de uno a otro se hacía de una manera discontinua, en múltiplos de $h\nu$. Esto equivale a una cuantificación de los estados del oscilador, pero en nada se refiere a la luz absorbida o emitida en la transición. Se quería salvar la idea de que la propagación de la luz o de cualquier tipo de radiación se hacía en forma de ondas de acuerdo con las leyes clásicas de Maxwell, y si algo pasaba, era precisamente en las proximidades del oscilador, donde la absorción o la emisión ocurría en forma discreta de cuantos de luz. Einstein fue más allá que Planck en este análisis y demostró que, además de cuantificar los estados de la materia (oscilador), era necesario cuantificar los estados de la radiación (luz): la luz está formada por algo así como corpúsculos, a los que llamó fotones, de energía igual a $h\nu$. Estos fotones son precisamente los que intervienen en los procesos de absorción y emisión de los osciladores, los electrones y los átomos. Einstein llegó a esta teoría fotónica de la luz, que en parte venía a desenterrar la vieja teoría corpuscular de Newton, al estudiar las fluctuaciones de la radiación en una cavidad. Encontró que estas fluctuaciones debían componerse de dos ingredientes; uno compatible con la índole ondulatoria de la radiación y otro que requiere un carácter corpuscular, con corpúsculos de energía $h\nu$. Si sólo se toma en cuenta el primero, se obtiene la fórmula de Rayleigh-Jeans, y

si sólo el segundo, la ley de Wien; volvemos pues a encontrar la fórmula de Planck como una generalización de ambas. Einstein estudió en detalle el proceso de emisión y absorción de energía por los átomos, en los que, a diferencia del oscilador, los niveles que representan sus estados no están igualmente espaciados, y encontró que las transiciones entre los niveles suceden no sólo cuando hay radiación externa, sino también en ausencia de un campo, con cierta probabilidad "a priori", como se producen las desintegraciones radiactivas, de un carácter totalmente estadístico y no determinista.

Si (1) y (2) son dos estados de un conjunto de átomos en equilibrio, el número de átomos que pasa por unidad de tiempo del estado (1) al (2) es proporcional a la intensidad de la luz que incide sobre ellos y al número de átomos que se encuentran en el estado (1). Este proceso se llama simplemente absorción. En cambio, el paso de los átomos del estado (2) de mayor energía al estado (1) puede ocurrir de dos maneras: (a) en ausencia de radiación (emisión espontánea) y (b) en presencia de ella, en cuyo caso habrá que añadir a los átomos que espontáneamente pasarían de (2) a (1), los que pasan forzados por la presencia de la radiación. Se tiene entonces: en el proceso de absorción, que el número de átomos que pasan por unidad de tiempo del estado (1) al (2) es

$$R_{1 \rightarrow 2} = B_{12} N_2 I(\nu). \quad [12]$$

y en el de emisión, que el número de átomos que pasan por unidad de tiempo del estado (2) al (1) es

$$R_{2 \rightarrow 1} = N_1 [A_{21} + B_{21} I(\nu)], \quad [13]$$

donde A_{21} y B_{21} son, respectivamente, los coeficientes de proporcionalidad de emisión espontánea y de absorción, los cuales dependen de los estados que intervienen. En equilibrio a la temperatura T , se tiene entonces:

$$N_2 B_{12} I(\nu) = N_1 [A_{21} + B_{21} I(\nu)],$$

y como ya anteriormente se tenía $h\nu = E_2 - E_1$ y $N_2 = b e^{-E_2/kT}$, a la vez que $N_1 = b e^{-E_1/kT}$, resulta:

$$I(\nu) = \frac{A_{21}}{B_{21} e^{h\nu/kT} - B_{12}}. \quad [14]$$

Para que se pueda comparar este resultado con la fórmula de Planck, es necesario que $B_{21} = B_{12}$, lo que indica que los coeficientes de absorción y de emisión entre dos estados de un átomo son iguales. También surge de la comparación de la fórmula [14] con la [11] que

$$\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{2h^3}{c^2}.$$

La posibilidad de emisión estimulada tiene actualmente aplicaciones en física y en tecnología en forma de láseres y máseres. En estos dispositivos se hace incidir radiación (luz o microondas) de cierta frecuencia sobre una sustancia y la misma emite radiación de la misma fre-

cuencia, pero de intensidad mucho mayor que la incidente. Hay una amplificación de la radiación. El láser funciona según el siguiente principio: La distribución de intensidad [14] corresponde al equilibrio entre la radiación y la materia, en cuyo caso los números dados por las ecuaciones [12] y [13] son iguales. En el caso general, cuando no hay equilibrio, el cociente

$$\frac{\text{Número de emisiones}}{\text{Número de absorciones}} = \frac{R_{21}}{R_{12}} = \left(1 + \frac{A_{21}}{B_{21} I(\nu)}\right) \frac{N_2}{N_1} \quad [15]$$

es diferente de uno. En la expresión anterior, $I(\nu)$ es la distribución de intensidad en la radiación incidente y no la distribución de equilibrio [14]. Para lograr el efecto de amplificación antes mencionado, se prepara, mediante un procedimiento apropiado, el estado (2) de tal manera que tenga una población mucho mayor que la del (1), o sea que $N_2/N_1 \gg 1$. Cuando se ilumina con radiación de la frecuencia correspondiente a la energía $E_2 - E_1$, la sustancia prácticamente no la absorbe por encontrarse casi deshabitado el nivel (1) y en cambio la refuerza con la luz de la misma frecuencia producida en la emisión estimulada del nivel (2) al (1). Con esto se logra que el cociente que aparece dentro del paréntesis en [15], que es igual al cociente entre el número de emisiones espontáneas y el de inducidas, sea mucho menor que uno. En consecuencia se tiene

$$\frac{\text{Número de emisiones}}{\text{Número de absorciones}} \approx \frac{N_2}{N_1} \gg 1.$$

En otras palabras, cuando se ilumina la sustancia con radiación cuya intensidad en función de la frecuencia es $I(\nu)$, sale una radiación de frecuencia igual a $(E_2 - E_1)/h$ con una intensidad mucho mayor que la incidente. Los láseres producen este efecto de amplificación con la luz y los máseres con las microondas. El nombre de estos dispositivos proviene de la sigla de las expresiones inglesas: "Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation" (amplificación de luz mediante emisión estimulada de radiaciones) y "Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiations" (amplificación de microondas por emisión estimulada de radiaciones). Por cierto que, como hay más estados (2) que se desexcitan y pasan al (1) que estados (1) que se excitan al (2) absorbiendo radiación, el nivel superior comienza a despoblarse, de modo que la amplificación disminuye hasta anularse cuando se alcanza nuevamente el equilibrio. Por ello es necesario repoblar continuamente el nivel superior mediante métodos especiales.

APLICACIONES DE LA TEORÍA CUÁNTICA: CALOR ESPECÍFICO DE LOS SÓLIDOS

Muy poco después de formulada la teoría cuántica, Einstein pudo explicar satisfactoriamente el comportamiento del calor específico de los sólidos a bajas temperaturas, en las que se había observado experimentalmente no seguía la ley de Dulong y Petit.

Como es bien sabido, la ley de Dulong y Petit dice que el calor atómico, producto del peso atómico por el calor específico, es aproximadamente igual a 6 cal/mol K. Aceptando que los átomos de un sólido no efectúan movimientos de traslación ni de rotación, sólo tendrán movi-

mientos vibratorios. Cada una de las tres componentes de este movimiento contribuye a la energía con kT ($\frac{1}{2} kT$ por la energía potencial y otro tanto por la energía cinética); en total, $U = 3kT$. El calor atómico está definido por

$$C = N_A \frac{dU}{dT} \quad [16]$$

donde N_A es el número de Avogadro. En consecuencia, con la expresión anterior de la energía media del oscilador resulta $C = 3N_A k = 3R = 6$ cal/mol K, que es el valor experimental a temperaturas altas y que está de acuerdo con la ley de Dulong y Petit. Sin embargo, esta ley no se cumple a bajas temperaturas; en especial, el calor específico debe ser cero en las proximidades del cero absoluto, según requiere la tercera ley de la termodinámica y se observa experimentalmente. Esta especie de contradicción puede superarse suponiendo que, al disminuir la temperatura, algunos de los grados de libertad vibracionales de los átomos no participan en el proceso y por lo tanto no contribuyen a la energía; concretamente, en el caso de cero absoluto, no habrá ningún oscilador en vibración, lo que explica la tendencia a cero del calor específico, como lo exige la tercera ley de la termodinámica.

Einstein tomó la expresión [10] para la energía media de los osciladores atómicos, por supuesto que multiplicada por 3 para tener en cuenta las tres direcciones posibles de vibración. Usando la definición [16] del calor atómico, Einstein obtuvo

$$C = 3R \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2 \frac{e^{h\nu/kT}}{(e^{h\nu/kT} - 1)^3}$$

El acuerdo de esta fórmula con los resultados experimentales demostró que la cuantificación propuesta por Planck para los osciladores de la radiación, se podía generalizar a otros osciladores. Sin embargo, la teoría de Einstein no se aplica a temperaturas muy bajas, del orden de 10 K, para las cuales da valores de C inferiores a los observados. Los refinamientos propuestos para hacer la corrección necesaria no alteran la esencia de la idea de Einstein.

EFECTO FOTOELÉCTRICO

Hertz había notado que la chispa eléctrica saltaba más fácilmente entre dos esferas cargadas si éstas se iluminaban con la luz de otras chispas. Lenard, exponiendo placas de diferentes metales a luz ultravioleta, descubrió que las mismas emitían electrones, a los que se denominó fotoelectrones.

Con un dispositivo parecido al de la figura 4, se puede determinar la velocidad de los fotoelectrones emitidos midiendo el voltaje negativo que se necesita para detener el paso de la corriente de los mismos.

Los experimentos de Lenard demostraron que: a) la velocidad de los fotoelectrones depende de la frecuencia de la luz empleada y no de su intensidad; b) hay una frecuencia umbral por debajo de la cual no se produce emisión de electrones, cualquiera que sea la intensidad de la luz utilizada; c) la emisión ocurre casi instantáneamente con la iluminación. Este fenómeno, tan bien conocido experimentalmente, desafió

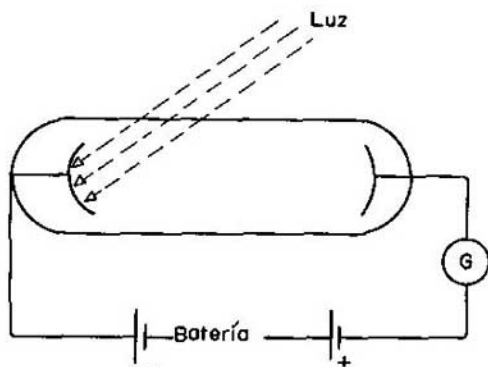


Fig. 4. Dispositivo para observar el efecto fotoeléctrico. G es un galvanómetro sensible que registra el paso de la corriente fotoeléctrica.

12

durante varios años todo intento de explicación a partir de las ecuaciones de Maxwell. De ser estas ecuaciones aplicables al proceso, la onda electromagnética debiera llevar la energía necesaria para arrancar los electrones del metal expuesto a ella y acelerarlos, y esta energía es proporcional a la intensidad y no a la frecuencia de la onda. Por otra parte, se requeriría un tiempo bastante largo para acumular en el átomo la energía procedente de la onda que se necesita para liberar el electrón e impartirle la velocidad que adquiere en este experimento. Einstein, una vez postulada la existencia de los fotones, explicó este fenómeno, llamado *efecto fotoeléctrico*, como la colisión entre un fotón y un electrón ligado a un átomo. Este proceso es casi instantáneo, y en él, parte de la energía del fotón $h\nu$ se emplea para vencer el campo creado en la superficie del metal, y la restante para acelerar al electrón e impartirle una velocidad v . En símbolos:

$$h\nu = \phi_0 + \frac{1}{2}mv^2 \quad \text{ó} \quad \frac{1}{2}mv^2 = h\nu - \phi_0. \quad [17]$$

Cuando la frecuencia es menor que ϕ_0/h , el fotón no tendrá energía suficiente para vencer el campo de la superficie y no habrá emisión. Esta sería la explicación del punto (b). Los datos experimentales están en pleno acuerdo con esta interpretación, como se puede observar en la figura 5.

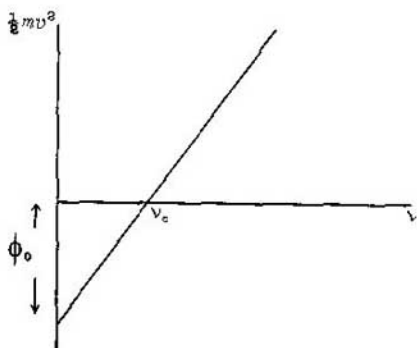


Fig. 5. Energía cinética de los fotoelectrones para diferentes valores de ν . Por debajo de ν_c no hay emisión. La pendiente de la recta es h .

EFECTO COMPTON

Otro fenómeno en pro de la hipótesis de la naturaleza corpuscular de la radiación es el efecto Compton. Consiste en la colisión de fotones con electrones, pero en este caso, contrariamente al del efecto fotoeléctrico, los electrones están libres. En la colisión vale la conservación de la energía y del momentum lineal, lo mismo que si se tratara del choque de esferas elásticas. El fotón, partícula sin masa en reposo, tiene energía $h\nu$ y momentum lineal $h\nu/c$. Es de esperar una disminución de la energía del fotón incidente por ceder parte de ella al electrón, lo que se traduciría en una frecuencia menor de los fotones emergentes, y así se comprueba experimentalmente. También, debido a las leyes de conservación antes mencionadas, se puede predecir la dirección de retroceso del electrón y la de los fotones después de la colisión (distribución angular). Los resultados experimentales están plenamente de acuerdo con las predicciones de la hipótesis que considera el efecto fotoeléctrico como una colisión entre dos partículas, y no como la transferencia de energía de una onda a un corpúsculo.

ÁTOMOS: MODELOS Y ESPECTROS

La teoría atómica tomó cuerpo a principios del siglo pasado; los átomos eran considerados como los constituyentes básicos de las moléculas y se catalogaban como entidades totalmente estables e indestructibles. Aunque con el paso del tiempo se demostró que no eran tan inmutables, su gran estabilidad sigue siendo una de sus características. Muy pronto comenzaron a surgir teorías para explicar estas características, así como también el origen de las rayas espectrales que aparecen cada vez que los átomos se excitan. Naturalmente, para poder explicar un fenómeno, un modelo (en particular, un modelo atómico) no tiene más remedio que aplicar las teorías existentes en su época, y así no es de extrañar que en el siglo XIX se recurriese a la mecánica clásica y a la electrodinámica para construir modelos atómicos. Los primeros modelos atómicos trataban de explicar la estabilidad a partir de los principios de estas dos ramas de la física clásica, y así Lord Kelvin propuso un modelo hidrodinámico según el cual el átomo era algo así como un remolino en el éter. Aunque con ello se probase la estabilidad, poco fue lo que este modelo pudo predecir acerca del átomo que se pudiera comprobar experimentalmente.

Cuando la existencia del electrón quedó fuera de toda duda, Thomson propuso otro modelo atómico en el cual se consideraba que dentro de la electricidad positiva, considerada como fluido continuo, estaban sembrados los electrones, como pasas en un pastel, en cantidad suficiente para que el conjunto resultase eléctricamente neutro. Estos electrones podrían oscilar respecto a cierta posición de equilibrio, absorbiendo y emitiendo radiación, que aparecería como rayas espectrales. El descubrimiento de las cargas positivas llamadas protones y los experimentos de Rutherford sobre dispersión de partículas alfa en hojas metálicas delgadas, acabó con el modelo de Thomson, ya que probaban la existencia de un núcleo de muy pequeñas dimensiones en los átomos.

Se puede afirmar que, con Rutherford, comienzan los modelos atómicos porque el suyo permite explicar una gran cantidad de hechos experi-

mentales. Rutherford bombardeó blancos formados de hojas muy finas de oro con partículas alfa procedentes de una desintegración radiactiva, y observó que un gran número de tales partículas atravesaban el blanco y un pequeño número de ellas se dispersaban según ángulos muy grandes. De acuerdo con estos datos, formuló un modelo planetario del átomo, según el cual hay un núcleo muy pequeño, inmensamente separado de los electrones llamados orbitales, que se mueven alrededor del núcleo en órbitas elípticas. El núcleo contiene toda la carga positiva del átomo y casi toda su masa. El número de cargas positivas es igual al de las cargas negativas de los electrones orbitales, siendo este número el que indica el lugar que ocupa el átomo en la tabla periódica de los elementos químicos. La estabilidad del modelo planetario de Rutherford queda explicada por analogía con la estabilidad del sistema solar, que sabemos ha existido durante millones de años. Sin embargo, no es tan satisfactorio para la explicación de las rayas espectrales. Las ecuaciones de Maxwell implican que una carga acelerada debe radiar energía, con una frecuencia fundamental y otras armónicas que son múltiplos enteros de la misma. Si el movimiento de la carga es circular uniforme, la frecuencia es única. En todo caso, como consecuencia de la emisión de radiación, el electrón debiera pasar a órbitas cerradas de radio cada vez menor descritas por lo tanto en períodos menores, aumentando su frecuencia y la de sus armónicas de manera continua y rápida, lo que ocasionaría líneas espectrales anchas y difuminadas. Las observaciones contradicen totalmente estas predicciones: las líneas espectrales son delgadas y bien definidas, y la relación entre las diferentes rayas está lejos de ser la que hay entre la frecuencia fundamental y sus armónicas.

Los espectroscopistas habían encontrado relaciones empíricas que les permitían calcular diferentes líneas de un espectro, formando lo que ellos llamaban una serie. Así, las líneas del espectro del hidrógeno satisfacen la relación:

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c} = R_y \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad [18]$$

donde c es la velocidad de la luz, n y m son números enteros y $R_y = 1,09678 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ es la llamada constante de Rydberg. Esta relación fue descubierta por Ritz (1905), aunque fue Balmer (1885) el primero en usar esta fórmula con $m = 2$. Para $m = 1$ se encuentra una serie de rayas en el ultravioleta que forma la serie de Lyman; para $m = 2$, las líneas se encuentran en la región visible, y su conjunto se llama serie de Balmer; para $m = 3$, se obtiene la serie de Paschen en el infrarrojo, y para otros valores de m , hay otras series que llevan el nombre de los electroscopistas que las identificaron. Lo que debe recalarse es que la posición de las rayas no corresponde a la posición de la frecuencia fundamental y sus armónicas.

TEORÍA CUÁNTICA DEL ÁTOMO. MODELO DE BOHR

Para explicar el espectro del átomo de hidrógeno, Bohr tomó el modelo planetario del átomo, y para no caer en las contradicciones a que conducía un tratamiento clásico del mismo, lo completó con las ideas cuánticas de Planck, estableciendo los postulados que siguen:

1. El electrón gira alrededor del protón del átomo de hidrógeno describiendo órbitas elípticas, en las cuales se cumple que la acción S es un múltiplo de la constante de Planck h . En estas órbitas el electrón no radia energía y por lo tanto las mismas son estables o estacionarias.

2. La emisión o la absorción de radiación del sistema protón-electrón ocurre al pasar el electrón de una órbita a otra. Esta radiación es un fotón de frecuencia bien definida.

3. La frecuencia de los fotones emitidos o absorbidos en la transición de una órbita a otra está dada por

$$E_n - E_m = h\nu,$$

donde E_m y E_n representan la energía de las órbitas estacionarias inicial y final, respectivamente. Como de acuerdo con la mecánica clásica la relación entre la acción S y el momentum angular L es $S = 2\pi L$, resulta

que la primera hipótesis equivale a $L = n\frac{h}{2\pi}$, lo cual significa que el momentum angular está cuantificado. Suponiendo, por simplicidad, que la órbita del electrón es circular y utilizando como referencial el sistema no inercial en el cual el electrón está en reposo, la fuerza de Coulomb entre el mismo y el núcleo debe ser igual a la fuerza centrífuga, es decir, en unidades SI (Sistema Internacional);

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = m \frac{v^2}{r}.$$

15

La energía cinética de este electrón será

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2r},$$

y su energía total:

$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{e^2}{2r} - \frac{e^2}{r} \right) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2r}, \quad [19]$$

y como $L = mvr = n\hbar/2\pi$, resulta

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} \quad [20]$$

y

$$E_n = \frac{m e^4}{8 \hbar^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2}, \quad [21]$$

donde se ve que los valores de r y de E_n están cuantificados, esto es, no varían de manera continua. Un parámetro importante en física atómica es el radio de la primera órbita, llamado *radio de Bohr* y designado por a_0 , que se obtiene de la ecuación [20] haciendo $n = 1$:

$$a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{\pi m e^2}. \quad [22]$$

Del tercer postulado de Bohr resulta:

$$\nu_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h} = \frac{me^4}{8h^3 \epsilon_0^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad [23]$$

Esta expresión proporciona la frecuencia de la radiación emitida o absorbida cuando el electrón pasa de la órbita m a la n . Comparando esta expresión con la fórmula empírica de Ritz, ecuación [18], se obtiene:

$$R_y = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}. \quad [24]$$

Calculando R_y con los valores más aceptados de m , e y h , resulta $R_y = 1,09737 \times 10^7 m^{-1}$, en acuerdo casi perfecto con el utilizado por los espectroscopistas.* Vemos, pues, que uno de los grandes éxitos del modelo de Bohr fue la determinación de la constante de Rydberg, R_y , a partir de una teoría completa y de constantes universales. El gran mérito de Bohr reside en la síntesis del modelo de Rutherford con la hipótesis cuántica de Planck, y aunque la manera en que la radiación interactúa con la materia todavía aparece misteriosa en este modelo, el éxito en la interpretación del espectro del hidrógeno dio confianza a sus sucesores para aplicar las nuevas ideas de cuantificación a la mecánica de los sistemas microscópicos. El refinamiento de estos métodos e ideas había de cristalizar en un nuevo cuerpo de doctrina física denominado mecánica cuántica.

16

CONFIRMACIÓN EXPERIMENTAL DE LOS ESTADOS ESTACIONARIOS

La primera hipótesis de Bohr, la existencia de estados estacionarios discretos en los átomos, fue confirmada experimentalmente por Franck y Hertz en 1913. Aunque éstos utilizaron átomos de hidrógeno en el estado fundamental, aquí se hablará de átomos de vapor de mercurio, ya que con esta sustancia los estudiantes realizan corrientemente el experimento en los cursos de física. Un filamento calentado emite electrones que excitan los átomos del vapor de mercurio que llena el tubo de la figura 6. Los electrones son susceptibles de ser acelerados por el

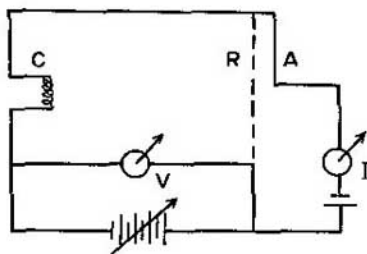


Fig. 6. Experimento de Franck y Hertz
 C = cátodo termiónico
 R = rejilla aceleradora
 A = electrodo colector
 I = amperímetro
 V = voltímetro.

potencial variable entre el filamento y la rejilla. Además en la placa colectoras hay un potencial negativo de alrededor de 0,5 voltios con el fin de

* La pequeña diferencia con los datos experimentales se corrige tomando en cuenta el movimiento del núcleo respecto al centro de masa del sistema.

que los electrones de poca energía no alcancen la placa. La curva de la corriente en función del voltaje es similar a la de la figura 7. Al principio, los electrones sólo pierden energía por colisión elástica, pero cuando llegan precisamente a una energía correspondiente a una transición del átomo de mercurio, casi toda su energía es absorbida por éste último, y la curva presenta un máximo (o un pico, como se dice habitualmente). La diferencia entre picos corresponde pues a la transición entre dos estados, y es del orden de $4,6 \text{ \AA}$, lo cual está de acuerdo con la longitud de onda de la raya del espectro del vapor de mercurio.

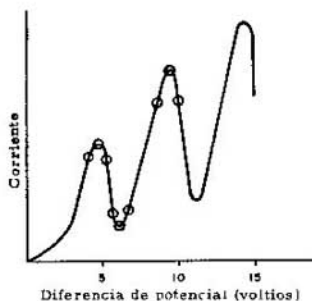


Fig. 7. Curva del experimento de Franck y Hertz para vapor de mercurio. La primera excitación ocurre a $4,9 \text{ eV}$.

PRINCIPIO DE CORRESPONDENCIA

El modelo de Bohr proporciona una manera de determinar la posición de las líneas espectrales de un átomo, pero nada dice acerca de la intensidad o de la polarización de las mismas; tampoco nos dice porqué no aparecen ciertas líneas espectrales que satisfarían la expresión [23]. Estas líneas son las correspondientes a las llamadas *transiciones prohibidas*. Para obviar estas dificultades, Bohr sugirió el *principio de correspondencia*, según el cual, la teoría cuántica debe tender a la clásica cuando, debido al espaciamiento muy pequeño de los niveles, los saltos de energía tienden a cero. Esto puede suceder cuando $\nu \rightarrow 0$. Así aparece la teoría clásica como límite de la cuántica para frecuencias muy pequeñas. Físicamente, se cumple esta condición cuando \hbar es muy grande.

Respecto a la polarización e intensidad de las líneas espectrales, Bohr sugirió que se deben seguir calculando por la vía clásica, y cuando en el cálculo clásico la intensidad de la raya resulta cero, la misma corresponde a una transición prohibida. De acuerdo con este principio, las leyes de conservación de la física clásica tienen que seguir siendo válidas en la teoría cuántica. Aunque heurístico y no muy convincente, este principio tiene el valor histórico de haber guiado todos los trabajos de investigación en la física de las interacciones de la radiación con la materia desde 1919 hasta 1925, trabajos que condujeron a la mecánica cuántica.

NÚMEROS CUÁNTICOS Y ESTRUCTURA FINA

Analizando el movimiento del electrón que gira en torno del núcleo en el átomo de hidrógeno, Sommerfeld hizo notar que la velocidad del

electrón debe ser muy alta y, por lo tanto, de acuerdo con la relatividad, su masa debe aumentar. Este aumento de masa equivaldría a introducir una fuerza adicional en las ecuaciones, la cual haría que las órbitas, en vez de ser elipses cerradas, fuesen elipses que rotan formando una roseta entre dos círculos. Este fenómeno se conoce con el nombre de precesión y es común en los movimientos planetarios. Tenemos entonces dos movimientos periódicos: uno, el del electrón en la elipse, y otro, el de las propias elipses barriendo la superficie entre los dos círculos (Fig. 8). De acuerdo con las ideas de cuantificación de Bohr, tendríamos

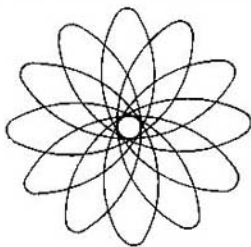


Fig. 8. Trayectoria en roseta debida a la precesión de la órbita del electrón, cuando se toma en cuenta la corrección relativista sugerida por Sommerfeld.

dos acciones: $S_1 = n\hbar$ y $S_2 = k\hbar$, que definirían este movimiento. Los números n y k son enteros, pero como S_2 no puede ser mayor que S_1 , resulta que k no puede ser mayor que n . Estos números n y k se llaman números cuánticos del átomo de hidrógeno. De ellos, n se llama *número cuántico principal*, por ser de mayor importancia en la determinación de la energía del nivel, y k está relacionado con la cuantificación del momentum angular. El valor de la energía de un nivel atómico depende fundamentalmente de n y muy poco de k , es decir que niveles que tengan el mismo n y diferente k están muy poco separados. Así, para $n = 3$, los posibles valores de k son: $k = 3$, $k = 2$, $k = 1$, formando los estados $(3, 3)$, $(3, 2)$ y $(3, 1)$, de energía muy próxima. Esta corrección relativista predice que, junto a cada raya del espectro con $n > 1$, deben aparecer varias rayas cercanas correspondientes a los diferentes valores de k . Esto es lo que constituye la estructura fina, la cual está confirmada experimentalmente. En realidad, fue precisamente la observación de la estructura fina lo que condujo a Sommerfeld a intentar explicarla como corrección relativista.

ONDAS DE DE BROGLIE

A pesar del éxito de las órbitas cuantificadas propuestas por Bohr para explicar el espectro del átomo de hidrógeno, éstas fueron aceptadas durante algún tiempo como algo misterioso, casi místico, no provisto de demasiado significado físico. ¿Por qué esas órbitas de un radio bien definido y no otras? ¿Qué papel jugaba el momentum angular en la definición de su radio y su energía? Louis de Broglie, en su tesis doctoral, trató de establecer una analogía entre los niveles discretos de energía de un átomo y los estados discretos de vibración estacionaria de una cuerda tensa. A todos nos es familiar el fenómeno de una cuerda vibrante cuando en ella se producen ondas estacionarias: en la cuerda se forma un número bien definido de ondas y los extremos corresponden a puntos de vibración nula. En la cuerda existen varios puntos de vibración nula (nodos) y otros puntos de vibración máxima (vientres).

Según de Broglie, las propiedades ópticas (espectros) de los átomos podrían deberse a una especie de ondas estacionarias confinadas dentro del mismo átomo. Según esta hipótesis, el electrón está acompañado de una onda estacionaria u onda piloto que oscila a lo largo de la trayectoria electrónica. Por consiguiente, las únicas trayectorias u órbitas electrónicas permitidas son las que contienen un número exacto de longitudes de onda de de Broglie. Sabemos que el radio r_n de la n -ésima órbita estacionaria de Bohr está dado por la ecuación [20] y de acuerdo con la hipótesis anterior, llamando λ_n a la longitud de onda asociada al electrón, se deberá cumplir $\lambda_n = 2\pi r_n$, de donde se deduce

$$\lambda_n = \frac{nh^2}{2\pi m_e e^2}.$$

Recordando que la velocidad del electrón en su órbita de Bohr permitida es $v_n = (2\pi e^2)/h$, se obtiene

$$\lambda_n = \frac{h}{m v_n}, \quad [25]$$

donde $m v_n$ es el momentum lineal del electrón que se encuentra en la n -ésima órbita. Este resultado obtenido para electrones dentro de un átomo, debiera ser válido también para los electrones libres, y si fuera una ley general de la naturaleza, para toda clase de corpúsculos y ondas. De esta manera se establece una simetría perfecta entre corpúsculos y ondas. La teoría de Planck había establecido la naturaleza corpuscular de la radiación electromagnética, fenómeno clásicamente ondulatorio. Ahora, esta nueva hipótesis conduce a aceptar la existencia de ondas asociadas con el movimiento de las partículas, ondas capaces de producir fenómenos de interferencia y de difracción. Esta dualidad partícula-onda parece a primera vista difícil y casi contradictoria, pues ambos conceptos son mutuamente excluyentes; sin embargo, el dilema encuentra cierta explicación mediante el principio de complementariedad, que se expondrá más adelante.

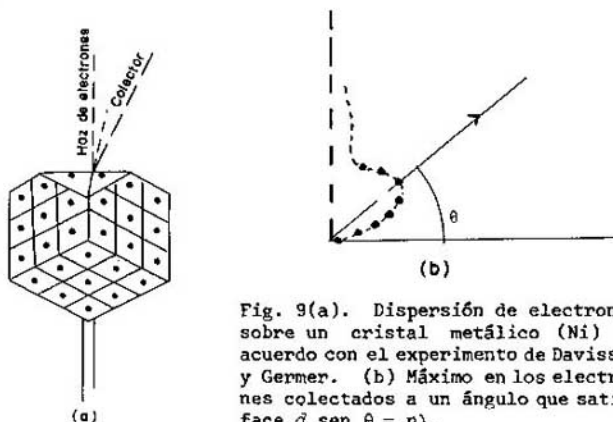
Una vez postulada la existencia de ondas y su propagación en el átomo, se presenta un sinnúmero de preguntas. ¿Cómo es la onda de de Broglie? ¿Qué velocidad tiene? ¿Qué es lo que se propaga? Algunas de estas preguntas no tienen sentido experimental, ya que, aun dentro de la física clásica, se trabaja con ondas electromagnéticas, en las que no hay nada material que oscile u ondule. Son el vector eléctrico y el magnético los que oscilan cambiando de módulo. Análogamente, podemos pensar que la onda de de Broglie es la oscilación de algo cuyo cuadrado representa la probabilidad de localización del electrón en un punto.

La naturaleza ondulatoria del electrón fue confirmada por los experimentos de G. J. Davisson y L. N. Germer e, independientemente, por G. P. Thomson,* en 1927. Los primeros descubrieron los efectos

* Es curioso notar que G. P. Thomson es hijo de J. J. Thomson, quien descubrió el electrón. Así, el hijo de quien había demostrado la naturaleza corpuscular del electrón, fue uno de los que complementaron la descripción del mismo como onda.

ondulatorios por casualidad mientras realizaban experimentos de reflexión de electrones en superficies cristalinas. El segundo, conociendo los trabajos de de Broglie, se propuso probar la naturaleza ondulatoria, tal como se había hecho unos años antes con los rayos X, transmitiendo electrones a través de una delgada capa cristalina.

En el experimento de Davisson y Germer, se dirige un haz de electrones contra la cara de un cristal de níquel en el vacío, como se indica en la figura 9. Los electrones dispersados elásticamente se recogen en un colector que se puede mover alrededor del cristal, el cual a su vez puede adquirir diversas posiciones respecto a la dirección del haz incidente; esto permite medir la intensidad de la dispersión en cualquier dirección respecto a la cara del cristal.



Si suponemos que los átomos superficiales del cristal forman una red de espaciamiento uniforme, lo que se puede probar mediante la difracción de rayos X y por otros métodos, la intensidad de los electrones dispersados acusa un máximo para aquellos ángulos de incidencia que cumplen la condición:

$$d \sin \theta = n\lambda \quad [26]$$

donde n es un entero, d el espaciamiento entre los átomos, λ la longitud de onda de los electrones incidentes y θ el ángulo de incidencia medido respecto a la superficie. Esta relación, llamada condición de Bragg, se cumple también en la difracción de rayos X. Otros físicos realizaron experimentos similares con haces de átomos en vez de electrones, demostrando plenamente el fenómeno de difracción y por tanto la naturaleza ondulatoria de los mismos.

PRINCIPIOS DE COMPLEMENTARIDAD

Los conceptos de onda y de partícula son muy importantes en la física porque representan las dos posibles maneras de transportar energía. A todos nos es familiar la propagación de energía que se verifica en el agua de una cuba cuando en uno de sus puntos se produce una

perturbación: vemos cómo la superficie del líquido se ondula y cómo un objeto flotante comienza a moverse cada vez que la onda lo alcanza.

También es de todos sabido que se puede realizar trabajo a expensas de la energía cinética de una o varias partículas en movimiento. Sin embargo, en el caso de las ondas electromagnéticas o en el de las moléculas de un gas, no se puede establecer tan claramente si son ondas o son partículas las que transportan energía. Utilizando un modelo de onda en un caso y uno de partículas en el otro, se pueden explicar los fenómenos de interferencia y difracción de las ondas en un caso, y la presión y temperatura en el otro. La descripción ondulatoria y la corpuscular son mutuamente incompatibles, ya que si la onda tiene una frecuencia bien definida, su extensión es infinita, y recíprocamente, si se localiza para que se parezca a una partícula, se necesita un número muy grande de frecuencias superpuestas que produzcan un batido. En consecuencia, longitud de onda y frecuencia, que son características de un movimiento ondulatorio, nada significan en un modelo, según el cual una partícula tiene una extensión nula en el espacio y por tanto está perfectamente localizada. Esto indica que no se puede hacer simultáneamente una descripción ondulatoria y una descripción corpuscular de un fenómeno físico, a no ser que se amplíe el concepto de partícula para incluir los efectos ondulatorios. Cuando se dice que la radiación electromagnética tiene características ondulatorias y características corpusculares, no se implica que las manifieste simultáneamente en el mismo experimento, sino que para explicar cierto tipo de experimentos se recurre a un modelo de ondas y para otro tipo de experimentos, a uno de partículas; ambas características, por lo tanto, son propiedades intrínsecas de la radiación.

Según el principio de complementariedad, enunciado por Bohr en 1928, los aspectos ondulatorio y corpuscular del mundo físico son mutuamente excluyentes (complementarios) y nuestro conocimiento de las propiedades del mismo es parcial si sólo utilizamos uno de ellos.

LA MECÁNICA CUÁNTICA

POSTULADOS FUNDAMENTALES

Quizás sea conveniente que, a partir de ahora, abandonemos el desarrollo histórico de la teoría cuántica, ligado a la atomicidad de la acción y a los procesos de emisión y absorción de la radiación, y tratemos de explicar el movimiento de los cuerpos mediante un conjunto de hipótesis que impliquen la cuantificación de la acción y la naturaleza ondulatoria asociada a toda partícula material. Esto nos obligará a recurrir a un conjunto de postulados que a veces parecen contradecir la experiencia diaria, pero que, no obstante, conducen a las leyes que explican el comportamiento del micromundo.

Se puede estudiar el movimiento por medio de trayectorias o de propagación de ondas. Estas, las ondas, tienen la ventaja de no requerir necesariamente un medio para propagarse. A pesar de la aparente disimilitud entre ambos tipos de movimiento, hay leyes bastante comunes que los gobiernan. Así, cuando la longitud de onda asociada al movimiento ondulatorio es muy pequeña comparada con las dimensiones de la región donde se propaga, se puede tratar la onda como un rayo, que correspondería a la trayectoria de un corpúsculo. Sin embargo, cuando las dimensiones de la región son comparables a la longitud de onda del movimiento, aparece el fenómeno de difracción y su tratamiento por medio de rayos ya no es válido. Quien haya estudiado un curso de óptica sabe que la explicación por medio de rayos es correcta para hallar la imagen de un objeto formada por una lupa, pero no lo es para determinar el poder de separación o poder resolutivo de un microscopio.

23

Aceptada la naturaleza ondulatoria del electrón, postulada por de Broglie y confirmada por los experimentos de Davisson y Germer, es imperioso aceptar como consecuencia su propagación en forma de onda. Sería oportuno señalar aquí que la mecánica cuántica nació como una posibilidad de interpretación del movimiento de electrones, que luego se extendió a otras partículas para valores de energía y longitud de onda que dan lugar a los fenómenos de difracción. Nunca ha pretendido la mecánica cuántica explicar qué es una partícula, ni cuáles su estructura. Sin embargo, ha ampliado el concepto clásico de partícula, lo cual ha resultado muy útil en la descripción de propiedades de cuerpos macroscópicos, como los sólidos, por ejemplo.

Volvamos al tema del electrón y de su difracción. Examinemos otra vez el experimento de aceleración de los mismos. El resultado experimental confirma que su longitud de onda λ es inversamente proporcional al momentum lineal $m v$, de tal modo que

$$\lambda = \frac{h}{m v} \quad [27]$$

Esta h es la misma constante de Planck utilizada hasta ahora, pero en esta ocasión aparece en un contexto muy diferente; se la ha introducido como una constante asociada al movimiento de un electrón, siendo una relación entre dos magnitudes dinámicas de la partícula: su momentum lineal y su longitud de onda. La ecuación [27] es en cierto modo una especie de ley dinámica del electrón. Si se aplica la relación [27] para cualquier tipo de partícula, además del electrón, los valores mv y λ deben ser compatibles con la constancia de h .

Sorprende que esta nueva mecánica comience con una notable peculiaridad: en muchas ocasiones habrá que olvidarse de trayectorias y de localizaciones. Al aceptar $\lambda = h/mv$ como longitud de onda de la partícula, habrá que esperar fenómenos de difracción en las regiones de dimensiones comparables con esta longitud de onda. ¿Se producirán efectos de difracción al moverse el electrón en el átomo de hidrógeno? Según lo tratado previamente, se sabe que este electrón tiene una energía de unos 10 eV, lo que corresponde a una longitud de onda del orden de 10^{-10} m. Como el radio del átomo de hidrógeno es de este mismo orden, es de esperar que se manifieste la naturaleza ondulatoria del electrón y por tanto hay que abandonar toda descripción del átomo en forma de electrones que circulan alrededor del núcleo en trayectorias de radio bien definido, como requiere el modelo de Bohr. Esta imagen del átomo de Bohr, con órbitas bien definidas, puede ser de bastante ayuda para imaginar algunos efectos y fenómenos dentro de los átomos, pero necesita a cada paso ser suplementada con hipótesis *ad hoc* y conduce a numerosas contradicciones. Todo ello se debe a haber definido trayectorias, órbitas y energías de una manera totalmente clásica. Una vez abandonada la descripción de los fenómenos por medio de trayectorias, se renuncia a asignar a una partícula tanto una posición como una velocidad bien definidas en cada instante. Hay que buscar otra manera de representar el mundo físico, lo que se hace en forma de ondas. Entonces se puede representar cada acontecimiento de la física por una amplitud que puede ser diferente en cada punto y en cada instante. A fin de precisar un poco los conceptos que se van a manejar en lo sucesivo, llamaremos *acontecimiento* a todo conjunto específico de condiciones iniciales y finales, como por ejemplo: un electrón que pasa de un estado de energía m a otro estado de energía n . Para estudiar un proceso como éste, enunciaremos antes los siguientes postulados, que tienen validez general en el análisis de todo tipo de experimentos (véase Feynman y colaboradores, "Lectures on Physics", tomo 1).

24

1. La probabilidad de un acontecimiento está dada por el cuadrado del valor absoluto de un número complejo, llamado amplitud de probabilidad.

2. Cuando el acontecimiento puede ocurrir alternativamente de varios modos, la amplitud total de probabilidad es la suma de las amplitudes correspondientes a cada uno de estos modos, y por tanto su probabilidad será

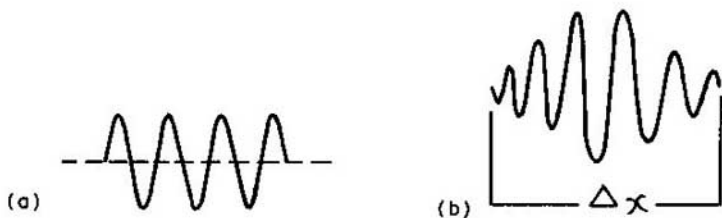
$$P = |\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \dots + \phi_n|^2. \quad [27]$$

3. Si se hace un experimento de tal manera que es posible determinar según cuál de las posibles alternativas se ha producido, la probabilidad total es la suma de probabilidades:

$$P = |\xi_1|^2 + |\xi_2|^2 + \dots + |\xi_n|^2. \quad [28]$$

Obsérvese que cuando es posible saber por dónde va precisamente la partícula, como en el caso 3, se suman las probabilidades, en tanto que si el acontecimiento tiene simultáneamente cierta amplitud respecto de cada una de las alternativas posibles, como en el caso 2, se suman las amplitudes. La diferencia entre ambos es que en el caso 2 existen términos de interferencia correspondientes a los dobles productos de las ξ . Los postulados de la física cuántica tienen cierto grado de plausibilidad tomando como base para la descripción del acontecer físico la naturaleza ondulatoria de las partículas, y su validez ha sido confirmada por el acuerdo entre los resultados obtenidos a partir de ellos y los datos experimentales.

Esta descripción en términos de amplitudes, quita a la física su carácter determinístico en un sentido clásico. En la física clásica es posible, por medio de trayectorias, predecir exactamente el futuro a partir del pasado. Es un principio metodológico de la física moderna que aquellos conceptos cuya aplicación requiere de condiciones que "a priori" no pueden ser observadas, no tienen significado y deben ser eliminados. Según esta filosofía ¿tienen mucho sentido las predicciones de la mecánica clásica que sólo son precisas cuando se conocen exactamente las condiciones iniciales de un sistema cerrado? La física cuántica permite sólo afirmaciones estadísticas sobre el comportamiento de las variables, condición que está de acuerdo con la situación empírica de la física atómica, nuclear y de partículas, donde los experimentos se efectúan de preferencia contando eventos. Así en la física cuántica, por medio de las amplitudes, sólo se puede predecir las probabilidades de ciertas cantidades que tienen significado experimental. Si, por ejemplo, lo que se quiere saber es si una partícula dará en un blanco dado, lo que se hace es calcular la probabilidad en ese punto, para lo cual se necesita conocer previamente la amplitud en ese y otros puntos en diferentes tiempos. La amplitud será en general una función de la posición y del tiempo. Se puede escribir como amplitud de la partícula en diferentes lugares y tiempos la función $e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$, donde $\omega = 2\pi\nu$ es la frecuencia angular; $k = 2\pi/\lambda$ es el número de onda, y \vec{r} el vector de posición. La situación correspondería a una partícula de energía $E = h\nu$ y momentum lineal $\vec{p} = (h/2\pi)\vec{k}$. Esta amplitud debe ser un número complejo y no real, ya que una exponencial sólo representa una onda en el caso de que sea una función compleja. Si tomamos esta función $e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$ como representación de la amplitud de probabilidad de encontrar la partícula en diferentes lugares y tiempos, el cuadrado de su valor absoluto $|e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}|^2$ es constante, lo que indica que tiene la misma probabilidad de encontrarse en cualquier punto, o lo que es lo mismo, no podemos precisar dónde se encuentra; *está muy mal localizada* (Fig. 10(a)). Si queremos confinar la partícula a cierta región, tal como Δx , (Fig. 10(b)), es necesario que su amplitud fuera de dicha región sea cero. Tenemos entonces un tren de ondas, pero ¿cuál es el precio que hay que pagar por ello? El precio es que en un tren de ondas no hay posibilidad de definir una longitud de onda única. Por tanto tampoco podremos definir un número de onda k , por lo que nos quedará totalmente indefinido el momentum lineal. Vemos que existe un problema esencial en la localización de una partícula o en la definición de k .



PRINCIPIO DE INDETERMINACIÓN

La descripción ondulatoria de una partícula lleva de inmediato a fijar los límites dentro de los cuales se pueda determinar experimentalmente ciertas variables dinámicas. Se puede entender estas limitaciones al examinar el experimento de difracción de partículas a través de una rendija y ver que no es posible determinar al mismo tiempo la posición y el momentum lineal de las partículas que atraviesan la rendija. Ahora bien, se detectarán las diferentes partículas que atraviesan la rendija de ancho d y su distribución sera como muestra la figura 11. Esta es una distribución típica de todo experimento de difracción. Supóngase que antes de que las partículas lleguen a la rendija se conozca exactamente su velocidad, y por tanto, su momentum lineal p_0 , que para mayor sencillez supondremos que está totalmente en la dirección horizontal. Después de atravesar la rendija, la velocidad de la partícula puede tener cualquier dirección compatible con el diagrama de difracción. Nos circunscribiremos a las que se detectan entre el máximo central y el primer mínimo. Entonces el momentum lineal en la dirección vertical se habrá extendido de cero a $\Delta p_y = p_0 \Delta \theta$, lo que llamaremos indeterminación del momentum lineal. Como según la óptica $\Delta \theta \approx \lambda/d$, resulta $\Delta p_y \sim p_0 \lambda/d$. De aquí se ve que cuanto más se trate de disminuir la indeterminación en la localización de las partículas, achicando el ancho de la rendija, mayor será la indeterminación Δp_y . El ancho Δy en la posición de las partículas, así encontramos $\Delta y \Delta p_y \approx p_0 \lambda$. El producto en el segundo término es precisamente h , por lo que

$$\Delta y \Delta p_y \approx h. \quad [29]$$

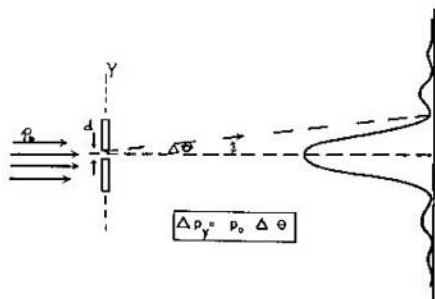


Fig. 11. Difracción producida por una rendija de ancho d . La componente Δp_y aparece en la figura de difracción, tal que $\Delta p_y \cdot \Delta y \sim h$.

Este es el principio de indeterminación, enunciado por Heisenberg, que indica la máxima precisión con que se pueden predecir simultáneamente la posición y el momentum lineal de una partícula. Este principio no afirma que sea imposible determinar por separado, con toda la precisión imaginable, la posición de una partícula o su momentum lineal, sino la imposibilidad de determinar ambos a la vez. Esto es una consecuencia de la naturaleza ondulatoria de las partículas y parecería que limita severamente la utilidad de la teoría cuántica como teoría predictiva, pero no es así. En la física clásica sí es necesario conocer exactamente la posición y el momentum de una partícula para predecir su evolución posterior. La mecánica cuántica es una teoría distinta y por lo tanto requiere datos diferentes para hacer predicciones (probabilísticas, como se ha dicho) sobre la evolución de un sistema; la mecánica cuántica no requiere el conocimiento preciso y simultáneo de la posición y el momentum para hacer predicciones verificables experimentalmente.

Esta misma relación se cumple por separado para las componentes x, y, z de la posición y del momentum lineal. No nos dice que no podamos determinar con toda precisión x y p_x , por ejemplo, simultáneamente.

La posición y el momentum lineal no son las únicas variables dinámicas para las que se cumple la relación anterior. Consideremos el momentum angular $L = rP$ de rotación alrededor de un eje fijo. Pareciera que siendo P y r perpendiculares pudieran determinarse con infinita precisión. Sin embargo, hay que notar que debido a $\dot{\phi}$ se produce un desplazamiento $\Delta x = r\Delta\phi$, y como para r fijo es $\Delta L = r\Delta P$, se verifica, teniendo en cuenta [29],

$$\Delta\phi\Delta L \approx h, \quad [30]$$

donde r es constante. Esta es la relación de indeterminación respecto al ángulo azimutal y al momentum angular. Una relación semejante se cumple para energía y tiempo:

$$\Delta E\Delta t \approx h, \quad [31]$$

la que indicaría que una medición totalmente precisa de un nivel de energía requeriría un tiempo infinito. El principio de indeterminación da de inmediato una herramienta para analizar los principios de conservación, como por ejemplo, el principio de conservación de la energía. Si nos concretamos a las energías potencial y cinética, la primera depende de la posición y la segunda de la velocidad, y por lo tanto no pueden determinarse ambas con absoluta precisión. ¿Quiere decir esto que el principio de conservación de la energía deja de cumplirse en la física cuántica? Nada de eso. Aquí subsisten las mismas leyes de conservación de la mecánica clásica, como exige el principio de correspondencia. Lo que indica el principio de Heisenberg es que no tiene sentido la separación precisa en energía potencial y energía cinética, condición que se aplicará más adelante para explicar penetración de barreras y pozos de potencial.

Para finalizar, cabe señalar que el principio de indeterminación no es en realidad un principio. Al igual que el de complementariedad y el de correspondencia, está implícito en las ecuaciones fundamentales de la mecánica cuántica y, como éstos, tuvo importancia histórica en la aclaración de los nuevos conceptos cuánticos. Actualmente tiene valor didáctico, ya que permite introducir las ideas físicas esenciales de la mecánica cuántica sin recurrir a la compleja matemática requerida por la misma.

EL PRINCIPIO DE INDETERMINACIÓN Y LOS ÁTOMOS

El principio de indeterminación nos proporciona un medio seguro y rápido de estimar el tamaño y la estabilidad de los átomos, sin utilizar las hipótesis completamente *ad hoc* introducidas por Bohr, y que hemos analizado previamente. Dada la naturaleza ondulatoria de las partículas, hay que renunciar, por supuesto, a la idea de trayectorias y de radios bien definidos de las órbitas de los electrones, como se ha anticipado en la sección anterior. El primer resultado será que el electrón no puede, como prevé la teoría clásica, perder continuamente energía y caer en espiral sobre el núcleo, ya que ello supondría que en esa situación se conocerían exactamente su posición y su velocidad, y ello violaría el principio de indeterminación. Por otra parte, en su estado fundamental o de más baja energía, el átomo es un sistema estable, como se demuestra experimentalmente, lo que corresponde a una energía mínima. Esta se compone de la energía cinética, T , y de la potencial, V , que en el sistema electrón-núcleo es $-e^2/4\pi\epsilon_0 r$, donde r es el radio del sistema. Podemos considerar el radio de este sistema como la indeterminación en la posición que clásicamente debiera ser cero, esto es, considerar que el radio proviene totalmente del principio de Heisenberg; entonces,

$$\Delta x \sim r \text{ y } \Delta p \sim E; \quad T = \frac{E^2}{2m}$$

y como $p \approx h/r$, se tiene

$$E = \frac{h^2}{2m r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Para que esta energía sea mínima, debe cumplirse $dE/dr = 0$, lo cual lleva a $h^2/mr^3 - e^2/4\pi\epsilon_0 r^2 = 0$; esto requiere, a su vez, que

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0 h^2}{me^2} \approx 10^{-10} \text{ m.} \quad [32]$$

Se obtiene así una estimación del radio de la primera órbita del electrón en el átomo de hidrógeno, valor que está de acuerdo con los resultados experimentales. Aquí el radio r tiene más bien el sentido de distancia a la cual la amplitud de probabilidad alcanza un máximo, pudiendo encontrarse el electrón con alguna probabilidad entre cero e infinito.

PENETRACIÓN DE BARRERAS Y POZOS DE POTENCIAL

Una curva de la energía potencial, como en la de la figura 12 expresa la variación de la energía potencial de un sistema respecto a la

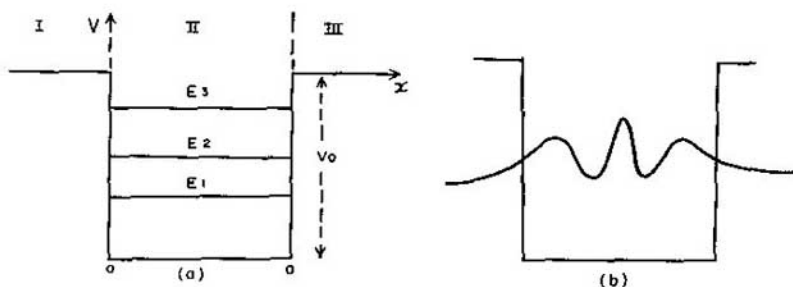


Fig. 12. Pozo cuadrado. a) Energías posibles de una partícula ligada. b) Penetración de la onda de probabilidad en las regiones prohibidas I y III.

distancia. A partir de esta curva se puede determinar la fuerza que actúa sobre una partícula situada en este potencial en cualquier punto; dicha fuerza es: $-\partial V/\partial x$. También se puede determinar la velocidad de la partícula para una energía y un punto dados, ya que siendo E constante, se representará por una recta paralela al eje x en la gráfica del potencial. Dicha velocidad es $v = \sqrt{\frac{2}{m}(E - V)}$. Todo esto, claro está, desde el punto de vista clásico. La figura 12(a) indica la variación de la energía potencial entre 0 y a . La gráfica dice que es cero entre 0 y a , y fuera de esta región es V_0 para cualquier punto. Esto se llama pozo de potencial. Si se tiene una partícula con una energía como cualquiera de las indicadas, no es posible, desde el punto de vista clásico, que la partícula penetre en las regiones I ó III, ya que en estas regiones $V > E$, y su velocidad corresponde a la raíz cuadrada de un número negativo, esto es, un número imaginario, y en la física las velocidades imaginarias no tienen sentido. Estas dos regiones se denominan clásicamente prohibidas para las energías $E < V$. Sin embargo, ya hemos mencionado que, si bien la energía total tiene sentido en mecánica cuántica, no lo tienen ni la energía potencial ni la energía cinética solas, como consecuencia de la indeterminación en la predicción precisa y simultánea de la posición y del momentum lineal. Cabe esperar, como un efecto derivado de la localización de la partícula, que la indeterminación de la energía potencial o la de la energía cinética sea tal que permita a la partícula encontrarse algunas veces en las regiones clásicamente prohibidas. Analicemos estos procesos (cuya existencia está bien demostrada experimentalmente) basándonos en las amplitudes de probabilidad, dado el carácter ondulatorio del movimiento. Consideremos la parte de la amplitud que depende de la posición x , $e^{ipx/\hbar}$. Para el caso de que p sea imaginario, esta expresión deja de ser algo que oscila para representar algo que se atenúa rápidamente con x , pero que tiene un valor finito durante cierta distancia. Esta distancia en la cual $e^{ipx/\hbar}$ tiene un valor apreciable, medirá la penetración de la amplitud de probabilidad o, como se dice corrientemente, la penetración de la onda en la región prohibida. La amplitud de probabilidad será como muestra la figura 12(b).

Consideremos ahora el caso de una barrera de potencial (Fig. 13). Supóngase que en la región I se tiene una partícula con energía E_1 y se

quiere calcular qué amplitud tiene si está en la región II o en la III. Sabiendo que en la región I, la onda tiene una longitud de onda $\lambda_1 = h/p_1$, en la II se tendrá una exponencial decreciente cuyo factor de x es p_2/h , y en la III volverá a repetirse la misma onda que en I, pero con menor amplitud. Esto se resuelve exigiendo que el empalme de las dos curvas en la frontera entre las regiones II y III, sea totalmente suave, así como el empalme de sus derivadas. Otro tanto debe suceder en la frontera de las regiones I y II. Estas exigencias, que en lenguaje matemático corresponden a condiciones de contorno de las ecuaciones diferenciales que satisface la amplitud de probabilidad, se deben a que, físicamente, la probabilidad y la corriente de probabilidad deben variar de manera suave en tanto no existan discontinuidades infinitas.

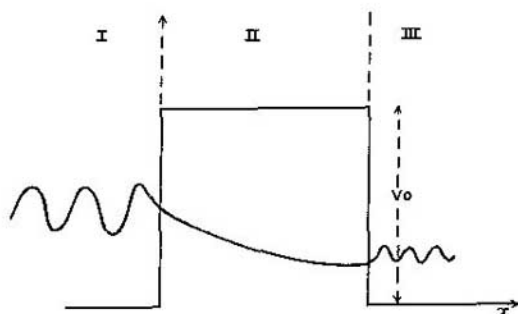


Fig. 13. Penetración de la onda de probabilidad en la región prohibida de una barrera de potencial.

CUANTIFICACIÓN DE LA ENERGÍA EN POZOS INFINITOS Y FINITOS

La figura 14(a) representa un pozo infinito. En este caso no se debe esperar penetración alguna a través de las paredes del pozo, dado que el principio de indeterminación no suministra suficiente energía cinética para poder atravesar la pared. Ello obligará a la amplitud de la onda a hacerse cero en los bordes del pozo y, por tanto, la distancia a debe contener un número exacto de semilongitudes de onda (Fig. 14(b)). Esta condición se escribe $n(\frac{1}{2}\lambda) = a$, y como $\lambda = h/mv = h/\sqrt{2mE}$, se tiene

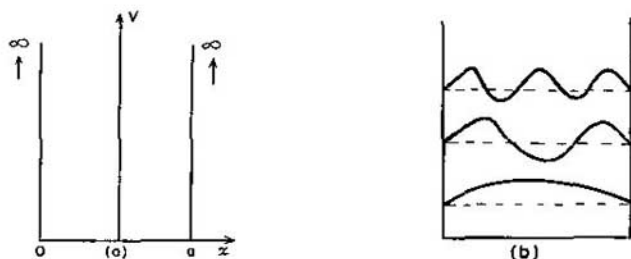


Fig. 14. a) Pozo cuadrado infinito. b) Variación de la amplitud de probabilidad para el pozo infinito.

$$E = \frac{n^2 \hbar^2}{8m a^2}. \quad [33]$$

Se observa que a cada valor de n corresponde un valor de E , y que los diferentes valores, llamados niveles de energía, están separados por una cantidad finita y distinta de cero. La separación entre los niveles es tanto mayor cuanto menor sea la masa m de la partícula y mayor la región en la cual ésta está obligada a moverse.

Cada uno de estos estados de energía de la partícula m en consideración está *ligado*, esto es, se necesita una energía externa para poderla sacar del pozo. (En este caso particular, ¡la energía necesaria es infinita!)

El conjunto de todos los estados de cierto sistema forma un espectro que, en el caso de los estados ligados, se llama espectro discreto, por haber una separación distinta de cero entre ellos. Si en vez de infinita la pared fuera finita, habría, como ya se dijo antes, cierta probabilidad de penetración, y al no ser cero la función de onda en los bordes, no es necesario que haya un número exacto de semilongitudes de onda dentro de la región de 0 a a . Sin embargo, las mismas condiciones físicas invocadas anteriormente exigirán una unión suave de las curvas en las regiones I-II y I-III, lo que selecciona sólo ciertos valores de E que cumplen con esta condición, resultando los niveles cuantificados. Estos estados ligados del pozo cuadrado finito formarán también un espectro discreto, pero contrariamente al caso anterior, no se necesitará una energía infinita para desligar una partícula que se encuentre en ellos, o sea llevarla al estado libre. Para una energía total de la partícula $E > V$, la misma no tendrá ninguna restricción en su movimiento y sus estados no estarán cuantificados, por lo que entonces se dice que forman un espectro continuo.

31

OSCILADOR ARMÓNICO

Otro sistema respecto al cual existe un número infinito de estados ligados es el oscilador armónico, cuyo potencial corresponde a fuerzas que, como las elásticas, son directamente proporcionales al desplazamiento de la posición de equilibrio.

La energía de este sistema es

$$E = \frac{1}{2} k x^2 + \frac{1}{2} m v^2 = \frac{E^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2, \quad [34]$$

donde x es la distancia a la posición de equilibrio y k la constante elástica. El estado fundamental de este sistema corresponde clásicamente a $E = 0$, con $p = 0$ y $x = 0$. Sin embargo, esto estaría en oposición al principio de indeterminación, ya que se conocería exactamente la posición y el momentum lineal.

Llamemos p y x al momentum lineal y a la posición, respectivamente, del estado fundamental, el cual se debe totalmente al principio de indeterminación. Entonces $x p = \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$. (Esta es la forma más refinada del principio de Heisenberg.) Con esto:

$$E = \frac{1}{4} \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2 \frac{1}{2m\lambda^2} + \frac{1}{2} h\nu^2, \quad [35]$$

lo cual corresponderá a un mínimo (estado fundamental) cuando $\lambda^2 = \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{km}}$, o sea $E_0 = \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi} \sqrt{k/m}$. Como para el oscilador $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{k/m}$, nos queda: $E_0 = \frac{1}{2} h\nu$. Al agregar los estados del oscilador armónico igualmente espaciados, la energía de un estado cualquiera n será:

$$E_n = E_0 + n h\nu = \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu. \quad [36]$$

Si comparamos esta fórmula con la obtenida por Planck, $E_n = n h\nu$, vemos que hay un término adicional $\frac{1}{2} h\nu$, llamado *energía en el punto cero*, que representaría en una teoría corpuscular la energía de la partícula en el cero absoluto, la cual sería distinta de cero. En una teoría cuántica, se interpreta como la energía mínima necesaria para observar el sistema. Este término es necesario para explicar el calor específico de los sólidos.

ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

El comportamiento ondulatorio de todo corpúsculo de acuerdo con las hipótesis de de Broglie, junto con el principio de indeterminación, han sido utilizados previamente para explicar cualitativamente la penetración de barreras, la cuantificación de los niveles en un pozo de potencial y la energía en el punto cero de un oscilador, que no tienen explicación en el marco de la física clásica. Estas mismas hipótesis de de Broglie pueden ser incorporadas en un formalismo matemático mediante una ecuación diferencial de segundo orden, cuya solución, conocida como *función de onda*, con las apropiadas condiciones de contorno, proporciona una descripción cuantitativa del sistema físico objeto de estudio.

Si consideramos una partícula libre (por tal se entiende una partícula que no está sujeta a fuerzas), la función de onda asociada a la misma, que exige la hipótesis de de Broglie, se puede describir en una dimensión mediante

$$\psi = e^{2\pi i(kx - \nu t)} = e^{2\pi i(px - Et)/h}, \quad [37]$$

donde k y ν son el número de onda y la frecuencia, respectivamente, de la onda de de Broglie, relacionados con la energía y el momentum lineal de la partícula por $\nu = E/h$ y $k = 1/\lambda = p/h$. Derivando parcialmente la expresión [37] respecto a x y respecto a t , se obtiene:

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = p\psi \quad \text{y} \quad -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi. \quad [38]$$

Estas dos expresiones se pueden interpretar así: si conocemos la función de onda ψ , obtenemos el momentum lineal o la energía de la partícula que actúa sobre la función de onda con la operación diferencial $(h/2\pi i) (\partial/\partial x)$ en un caso, y $(-h/2\pi i) (\partial/\partial t)$ en el otro. Cabe entonces pensar que éstos son los operadores correspondientes al momentum lineal y a la energía, pues se obtienen estas magnitudes al operar con ellos sobre la función de onda. Si, en vez de considerar la función de onda en

una dimensión, se considera una onda en tres dimensiones, es posible escribir para las tres componentes del momentum lineal

$$p_x = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}; \quad p_y = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}; \quad p_z = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad [39]$$

En general, tomaremos $p = (\hbar/2\pi i)(\partial/\partial q)$. El operador p^2 indica la repetición de la operación p , y así:

$$p^2 = p \cdot p = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \cdot \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2} \frac{\partial^2}{\partial q^2}. \quad [40]$$

Ahora bien, sabemos que la energía total de un sistema se compone de energía cinética y de energía potencial (una partícula libre no tiene energía potencial), por lo que escribimos, llamando T a la energía cinética y $V(q)$ a la potencial, $T + V(q) = E$; o sabiendo que $T = p^2/2m$; $p^2/2m + V(q) = E$, o, lo que es lo mismo

$$\frac{p^2}{2m} + V(q) - E = 0.$$

En esta expresión, p , V y E deben entenderse como operadores que tienen significado físico al actuar sobre la función de onda. Por lo tanto conducen a la ecuación diferencial

$$\left(-\frac{1}{2m} \frac{\hbar^2}{4\pi^2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q) + \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi = 0. \quad [41]$$

Esta es la famosa ecuación de Schrödinger para el sistema que estamos considerando. 33

La resolución de la ecuación de Schrödinger se logra encontrando soluciones uniformes y finitas para cada problema. Nos interesan, en particular, las *soluciones estacionarias*, que son aquellas en que la amplitud de la función de onda es independiente del tiempo, para lo cual es necesario que la dependencia de t se manifieste en la forma $e^{-(2\pi i/\hbar)Et}$. Entonces la ecuación de Schrödinger se transforma en:

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial q^2} + [E - V(q)]\Psi = 0, \quad [42]$$

o, más precisamente, en

$$[H(p, q) - E]\Psi = 0, \quad [43]$$

donde $H(p, q)$ es un operador llamado *hamiltoniano*, que representa la energía total del sistema y es igual a $T + V$.

La ecuación [43] corresponde matemáticamente al problema de encontrar los autovalores del operador H , esto es, encontrar los valores del parámetro E para los cuales la ecuación diferencial tiene soluciones uniformes y finitas. Si para cada valor de E , existe una solución o autofunción Ψ , el autovalor se llama no degenerado o simple, y si existen varias soluciones para cada autovalor, se le denomina degenerado.

El hecho de que Ψ sea esencialmente compleja llevó a Born a proponer que la cantidad $|\Psi|^2$ debiera entenderse como una densidad de

probabilidad. Por ejemplo, en el caso de una partícula obligada a moverse sobre el eje x , la cantidad $|\psi(x)|^2 \Delta x$ representa la probabilidad de que la partícula se encuentre entre x y $x + \Delta x$. Anteriormente hemos utilizado esta interpretación como un postulado.

Aceptada esta interpretación de ψ , es necesario introducir el concepto de *normalización* de la función de onda, con el cual se quiere indicar que la amplitud debe ajustarse de tal modo que

$$\int_{\text{todo el espacio}} |\psi|^2 dx = 1, \quad [44]$$

ya que la partícula se considera situada en algún punto entre $-\infty$ y $+\infty$.

Es hoy claro que lo que corresponde hacer es simplemente postular la ecuación de Schrödinger, basándose en que sus consecuencias sirven para explicar en forma adecuada una gran variedad de fenómenos físicos. No obstante, durante varios años subsistió una línea de pensamiento que sostenía que dicha ecuación se podía explicar, e incluso derivar, utilizando teorías clásicas a la vez que alguna hipótesis adicional. Pero esta actitud es refutable; es tal la cantidad de hechos que han encontrado explicación mediante la ecuación de Schrödinger, y que de otra manera hubieran permanecido oscuros y aún contradictorios, que merece la pena postularla y aprender a resolverla con miras a su aplicación a muchos problemas del mundo microscópico.

Siendo una ecuación diferencial, se podría pensar que es necesario usar métodos matemáticos complicados para resolverla, pero en realidad es fácil llegar a conocer alguna de sus características más importantes y desarrollar cierta habilidad para estimar el comportamiento de la función de onda para varios potenciales.

Básicamente, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo establece que la segunda derivada de cierta función, la *función de onda*, debe ser proporcional a la diferencia entre la energía de un nivel fijo de referencia y la energía potencial, multiplicada por la función de onda. En lugar de la segunda derivada, se puede pensar en la curvatura de la función; la ecuación de Schrödinger requiere entonces que la curvatura sea muy grande, donde la energía potencial es muy diferente del nivel de referencia, y pequeña donde esta diferencia es pequeña. El signo de esta diferencia es muy importante. Cuando es positivo, la función de onda es cóncava hacia afuera, y si su módulo ya es grande tenderá a ser mucho mayor, con lo que el sistema resultará inestable. Si el signo de la diferencia es negativo, la concavidad es hacia el eje de las abscisas y una función positiva creciente será inducida a decrecer y una negativa decreciente a crecer, con lo que resultarán oscilaciones.

Ambas regiones ocurren para potenciales de la mayor parte de los sistemas físicos, y como resultado de ello cualquier función de onda tendería a crecer sin límite, lo que es contrario a la interpretación probabilística de Born, que establece que el cuadrado del módulo de la función de onda es proporcional a la probabilidad de encontrar la par-

tícula en un lugar dado. El módulo al cuadrado de una función de onda que crece rápidamente no puede encerrar con el eje de las abscisas un área finita que represente la probabilidad total. Veamos cómo el hecho de que la probabilidad total sea finita da lugar a la cuantificación de los niveles de energía. Sucede que para cierta energía (Fig. 15a) la función de onda decrece y luego comienza a subir de nuevo, tendiendo al infinito, y que para una energía un poco menor (Fig. 15c) puede decrecer tan rápidamente que no sólo se haga cero sino que pase a ser negativa y otra vez se torne inaceptable. Debe haber entonces una energía intermedia (Fig. 15b) para la cual la función de onda tienda a cero al aumentar la distancia al origen.

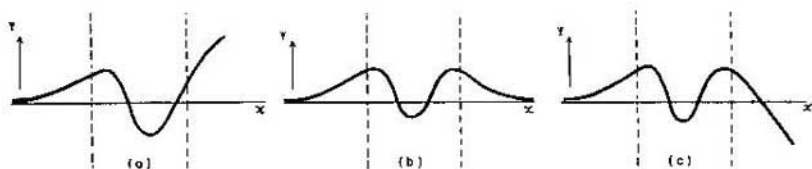


Fig. 15. Ejemplos típicos de comportamiento de las funciones de onda de un pozo de potencial para diferentes valores de E . a) La función de onda tiende a $+\infty$ a la derecha; b) la función de onda tiende asintóticamente a cero por ambos lados; c) la función de onda tiende a $-\infty$ a la derecha. a) y c) corresponden a valores de E no apropiados, por producir soluciones de la ecuación físicamente inaceptables; b) corresponde a soluciones $\psi(x)$ físicamente aceptables y a un valor de E apropiado.

Por estas razones se puede concebir con seguridad que para ciertos valores muy precisos de la energía es posible encontrar una función de onda oscilatoria dentro de las regiones permitidas clásicamente y decreciente en las regiones prohibidas, tendiendo a cero en las regiones que son en extremo inaccesibles, tales como las muy alejadas. Así aparece la cuantificación de la energía como consecuencia de la ecuación de Schrödinger.

Conforme a las consideraciones de curvatura expuestas más arriba, es de esperar que la oscilación sea muy rápida en las regiones de gran energía cinética clásica, y más lenta cerca de los puntos de retorno clásicos. Donde haya energía cinética clásica, la partícula permanecerá mayor tiempo y por lo tanto habrá mayor oportunidad de encontrarla en esa región. El resultado hasta cierto punto sorprendente es que esta región de alta probabilidad se puede extender también a regiones que serían prohibidas a un movimiento clásico.

Otra información que permite hacer estimaciones razonables acerca de las soluciones de la ecuación de Schrödinger, es que el espaciamiento de los niveles de energía permitidos depende del área debajo del potencial en la región oscilatoria de la función de onda. Siempre que la

energía total cambie de modo tal que esta área aumenta en una unidad, otro nivel de energía es permitido.

En lo que sigue se trata de aplicar la ecuación de Schrödinger a algunos sistemas de interés físico, advirtiéndose que los resultados que se obtienen no figuran en un tratamiento clásico. Estos resultados surgen de una manera natural a partir del análisis matemático de la ecuación diferencial; la cuantificación, las transiciones prohibidas, la intensidad y polarización de las líneas espectrales, etc., resultan correctamente expresadas, reproduciéndose no sólo aquellas características predichas por la teoría de Bohr, sino algunas más que ésta no podía anticipar y que los datos experimentales confirman.

No se reproducirá aquí los resultados ya obtenidos para el pozo cuadrado o para el oscilador armónico, puesto que, habiendo sido tratados antes de una manera cualitativa a partir del principio de indeterminación, no se obtendrá nada sustancialmente nuevo al tratarlos con este nuevo formalismo matemático. Sin embargo, volveremos a la discusión del átomo de hidrógeno a fin de verificar lo anteriormente aseverado y definir aspectos nuevos del problema.

EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO

La energía potencial del electrón en el átomo de hidrógeno es:

$$V = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

donde $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. La energía potencial depende solamente de la distancia relativa entre el electrón y el protón. Este tipo de campo se llama central.

Lo anterior permite escribir la ecuación de Schrödinger en la forma:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2 / 4\pi\epsilon_0}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right] \psi = 0. \quad [45]$$

Resolver esta ecuación es hallar $\psi(x, y, z)$, y una vez obtenida ésta, la probabilidad de que el electrón se encuentre en el volumen $dx dy dz$ al redor de un punto de coordenadas (x, y, z) es $|\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz$. Allí, donde este valor sea grande, habrá gran probabilidad de encontrar al electrón, y donde sea pequeño, habrá poca, ocurriendo una transición continua entre ambos extremos. Se tiene así una distribución electrónica. No entraremos aquí en los detalles matemáticos de la solución de esta ecuación, si bien mencionaremos que como la energía potencial depende solamente de la distancia relativa entre el electrón y el protón, el problema tiene simetría esférica, y las coordenadas más apropiadas a este tipo de problemas son las esféricas. Así pues, se transforma la ecuación [45] en variables r, θ y ϕ y la ψ obtenida será $\psi(r, \theta, \phi)$, la cual puede descomponerse en la forma

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi). \quad [46]$$

Para valores de $E > 0$, lo cual corresponde, como ya se ha indicado, a la situación física en que el electrón posee energía suficiente para escapar del átomo, la ecuación diferencial tiene solución cualquiera que sea el valor de E . Sin embargo, cuando $E < 0$, correspondiente al electrón ligado en el átomo, $\Psi(r, \theta, \varphi)$ tiene valores aceptables físicamente sólo para energías

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV} \quad [47]$$

(n entero), exactamente igual que en la teoría de Bohr. Estos valores de E_n forman el espectro discreto del átomo de hidrógeno, en tanto que los estados con $E > 0$ forman el continuo.

Se puede caracterizar la dependencia radial de la función de onda por un subíndice n , y entonces el número cuántico n representa la densidad de probabilidad en función de r . La cantidad $|R_n(r)|^2$ es la probabilidad por unidad de volumen de encontrar al electrón a una distancia r del núcleo; n no indica en esta formulación una órbita de radio bien definido, sino que está asociado a cierta probabilidad radial (Fig. 16).

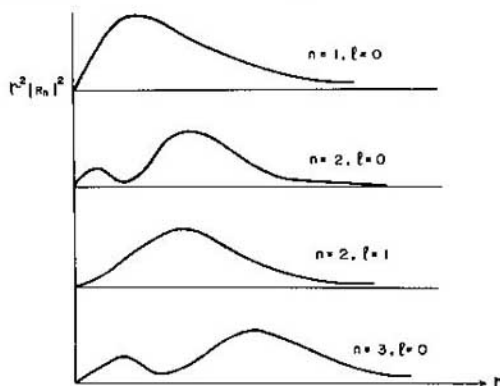


Fig. 16. Variación de la densidad de probabilidad $r^2 |R_n|^2$ en el átomo de hidrógeno para diferentes valores de n y l .

Una vez encontrada $R_n(r)$, se puede encontrar $\Theta(\theta)$, y las propiedades matemáticas del problema revelan de inmediato una peculiaridad ausente en la formulación de Bohr. Con un valor dado de n son posibles una o varias funciones $\Theta(\theta)$, que se caracterizan por un nuevo subíndice o número cuántico l , el que puede asumir alguno de los valores siguientes:

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1).$$

Este número determina cuán rápidamente varía Ψ con θ para r constante. Nótese que valores grandes de l no pueden estar asociados con valores pequeños de n , y por corresponder éstos a distribuciones de probabilidad radial cuyo mayor valor está cerca del núcleo, esto indicaría que un electrón con l grande tiene poca probabilidad de estar cerca del núcleo.

Prosiguiendo con el análisis de la solución de la ecuación diferencial [45], se halla que para un valor dado de l existen una o varias soluciones $\psi(\varphi)$ que se pueden caracterizar por un tercer subíndice o número cuántico m_l , el que puede asumir cualquiera de los valores:

$$m_l = -l, -(l-1), -(l-2), \dots, -1, 0, 1, 2, \dots, (l-1), l,$$

que son $2l+1$ valores distintos. Tenemos así que para un n dado, que define la energía del estado del electrón en el átomo de hidrógeno, existen n^2 posibilidades de estados con diferentes l y m_l , los que serán degenerados.

MOMENTUM ANGULAR

Aunque se omite aquí, se puede demostrar que el número cuántico l está relacionado con el momentum angular del movimiento del electrón alrededor del núcleo, de tal manera que el módulo L del mismo es:

$$L = \sqrt{l(l+1)} \frac{\hbar}{2\pi}. \quad [48]$$

La componente del momentum angular en la dirección del eje Z está relacionado con el tercer número cuántico m_l así:

$$L_z = m_l \frac{\hbar}{2\pi}. \quad [49]$$

38

Esto indica que el vector momentum angular, para un valor dado de l , puede orientarse solamente de $(2l+1)$ maneras diferentes, correspondientes a los $(2l+1)$ valores diferentes que puede tomar m_l , de modo que sus proyecciones sean múltiplos positivos o negativos de $\hbar/2\pi$ (Fig. 17). Esto se suele indicar diciendo que hay cuantificación espacial del momentum angular, ya que este vector no se orienta de manera arbitraria, sino en posiciones que satisfagan la expresión [49].

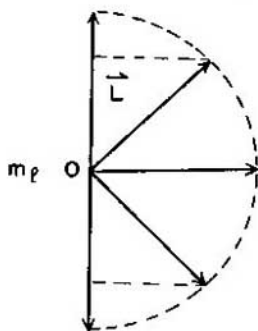


Fig. 17. Posibles orientaciones del vector \vec{L} , de módulo $\sqrt{l(l+1)}\hbar/2\pi$, compatibles con $m_l = +1, 0, -1$.

La degeneración correspondiente a un valor dado de n para un campo central desaparece cuando se coloca el átomo en un agente externo que ponga de manifiesto los efectos magnéticos; en este caso, el momento magnético del átomo, caracterizado por los valores m_l , interactúa con el campo externo aplicado, rompiendo la degeneración. Experimentalmente esto se pone de manifiesto con el efecto Zeeman, cuando la fuente emisora se coloca en un campo magnético homogéneo y las rayas del espectro que antes aparecían como simples, se desdoblán en varias.

Analizando las líneas del espectro visible, es posible determinar la intensidad del campo magnético solar, pues si una raya bien identificada del espectro aparece desdoblada, la magnitud de la separación indicará cuál es la intensidad del campo. También se recurre a este efecto para determinar los campos magnéticos internos en los átomos.

El efecto Zeeman se puede explicar así: Considérese un electrón en movimiento en una de sus órbitas, como una corriente igual a $e(\omega/2\pi)$ en un conductor circular, donde ω es la velocidad angular del electrón y e su carga. Esta corriente produce un campo magnético proporcional a la misma, con un momento magnético $\vec{\mu}$. Como se observa en la figura 18, $\vec{\mu}$ tiene la misma dirección de \vec{L} , pero sentido opuesto. El valor del momento dipolar μ de la corriente es el producto de la intensidad de la misma por el área, esto es:

$$\mu = e\left(\frac{\omega}{2\pi}\right) (\pi r^2) = \frac{1}{2} e\omega r^2. \quad [50]$$

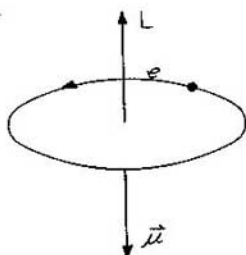


Fig. 18. Dirección del momentum angular y del momentum dipolar magnético para una corriente circular.

39

Como, por otra parte, el módulo del momentum angular es $m_e\omega r^2$, se puede establecer la siguiente relación vectorial:

$$\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2m_e} \vec{L}. \quad [51]$$

La constante de proporcionalidad $e/2m_e$ se denomina relación *giromagnética* del electrón. Esta relación clásica sigue siendo aproximadamente válida en mecánica cuántica, donde las relaciones entre las componentes Z de ambos vectores, que son las que tienen sentido físico, es

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e} L_z = -\frac{e\hbar}{2\pi m_e} m_l = -\mu_B m_l, \quad [52]$$

donde

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2\pi m_e}$$

es una unidad de medida del magnetismo atómico y se llama *magnetón de Bohr*.

Al colocar el dipolo formado por el electrón girante en un campo magnético uniforme, éste experimenta, exactamente igual que una aguja magnética, un torque y precesa sin sufrir una fuerza de traslación; la energía potencial del sistema átomo-campo externo dependerá de la orientación del dipolo respecto al campo externo. Las energías correctas se

obtienen para los diferentes valores $m_l \hbar/2\pi$ de la componente del momentum angular en la dirección del campo aplicado. En total, $(2l + 1)$ valores distintos que originan $(2l + 1)$ líneas correspondientes a partir de una caracterizada por un determinado l en ausencia del campo. Este es el efecto Zeeman normal que explica la separación de las líneas como debida a los valores de la componente del momentum angular orbital en la dirección del campo. Existen otras separaciones de líneas del espectro que exigen otro tipo de momentum angular y que constituyen el efecto Zeeman anómalo, el que se discutirá más adelante al introducir el concepto de spin del electrón.

EXPERIMENTO DE STERN Y GERLACH

La prueba más concluyente de la cuantificación espacial del momentum angular se atribuye al experimento sugerido por O. Stern, en 1921, y realizado más tarde por él mismo en colaboración con Gerlach. Como éste es uno de los experimentos clave en mecánica cuántica merita que se lo trate con algún detalle.

Ya se ha dicho que un dipolo magnético en un campo magnético uniforme sufre un torque que lo obliga a precesar, pero no fuerzas que lo trasladen. Sin embargo, si el campo no es uniforme sufre un torque y además una fuerza traslacional. Se puede lograr este campo no uniforme haciendo uno de los polos del imán, por ejemplo el norte, en forma de cuña, con lo que las líneas de fuerza aparecerán muy concentradas en la punta de la cuña (Fig. 19).

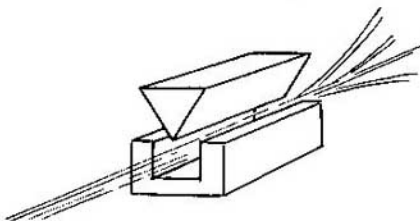


Fig. 19. Esparcimiento de un haz de átomos con $l = 1$ por efecto de un campo magnético no homogéneo en el experimento de Stern-Gerlach.

Los átomos que, procedentes de alguna fuente, entran en este campo paralelamente a los bordes del polo, tienen una energía que por lo regular no es suficiente para excitarlos por encima de su estado fundamental.

Supongamos que m_l pueda tomar uno cualquiera de los valores $1, 0, -1$. Dentro de los átomos del haz habrá todos estos valores posibles de m_l . Siendo la dirección que define m_l totalmente convencional, por lo general en la dirección del campo aplicado, si hay átomos con $m_l = +1$, también los habrá con $m_l = -1$ y en tanto los primeros sentirán un efecto magnético en una dirección, los otros lo sentirán en la dirección opuesta. Los átomos con $m_l = 0$ no sentirán el efecto del campo aplicado. Todo esto trae como consecuencia que el haz original de átomos se divida en tres haces, uno de los cuales continúa en su dirección original, y los otros dos separados por igual de éste, uno por encima y el otro por debajo. Es importante notar que si no hubiera cuantificación espacial, en vez de dividirse en tres, el haz se ensancharía.

Si el campo magnético aplicado cambia de posición, por ejemplo rota, el haz original se divide de nuevo en tres componentes, probando que para los átomos las expresiones *hacia arriba* y *hacia abajo* sólo tienen sentido respecto a la dirección del campo.

Parece contradictorio desde el punto de vista clásico que se obtenga el mismo valor de la componente Z del momentum angular, aun al rotar el eje Z. Desde el punto de vista cuántico tal contradicción no existe, ya que las otras dos componentes del momentum angular según los ejes X e Y, respectivamente, no se pueden medir simultáneamente. Lo único que tiene significado físico es una sola componente con valores bien definidos (+1, 0, -1 en el ejemplo anterior) y una vez determinada ésta, es imposible determinar simultáneamente las otras dos. Resulta de todo esto que el momentum angular es un vector muy especial, ya que sólo se puede conocer con exactitud una de las componentes del mismo.

En el caso de que el estado fundamental tenga $l = 0$, parecería que el haz de átomos no debiera dividirse por efecto del campo magnético aplicado. Sin embargo, no es ésta la situación experimental, ya que realizado este experimento con átomos cuyo $l = 0$ (átomos de plata obtenidos ionizando plata en un pequeño horno al vacío), se observó que el haz original se dividía en dos partes probando la existencia de fenómenos magnéticos en el átomo, que no se debían al momentum angular orbital. Esto llevó a postular la existencia de un momentum angular intrínseco o *spin*, del que nos ocupamos a continuación.

41

SPIN

La interpretación del experimento de Stern y Gerlach hace necesario atribuir al electrón cierto momentum angular propio, no relacionado con su movimiento en el espacio. Esta propiedad de carácter esencialmente cuántico y que no admite interpretación clásica se llama *spin*.* Es lícito hablar de spin tanto para partículas elementales, como para una partícula que, aunque compuesta, se comporte como elemental en cierto tipo de fenómenos (por ejemplo, un núcleo atómico). El spin vendría a ser el momentum angular de una partícula en un sistema en el cual ésta se encuentra en reposo. Designaremos el spin por \vec{S} ; su módulo es

$$S = \sqrt{s(s+1)} \frac{h}{2\pi}, \quad [53]$$

donde s es el número cuántico de spin y lo mismo que el momentum angular orbital, se mide en unidades de $h/2\pi$. En el caso de un electrón, este momentum angular intrínseco puede tomar dos valores según el eje z: $m_s = +\frac{1}{2}$ y $m_s = -\frac{1}{2}$. Los dos haces que aparecen en el experimento de Stern y Gerlach para átomos con $l = 0$ se deben a estos dos valores de la componente del spin según la dirección del campo aplicado, ya que el estado fundamental de los átomos utilizados en el experimento tiene $s = \frac{1}{2}$. Si el electrón tiene un momentum angular orbital \vec{L} y un spin \vec{S} , se los puede acoplar como se suman dos vectores, para dar un momentum angular total \vec{J} , tal que $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ (Fig. 20); su módulo será, por analogía con el caso de \vec{L} y \vec{S} ,

* Del término inglés: "spin"

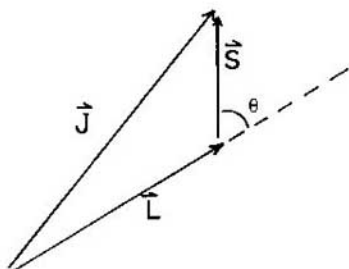


Fig. 20. El acoplamiento de \vec{L} y \vec{S} se hace a ángulos θ compatibles con la expresión [57].

$$J = \sqrt{j(j+1)} \frac{h}{2\pi} , \quad [54]$$

donde j es el número cuántico correspondiente al momentum angular total. La componente de \vec{J} según el eje z vale $J_z = m_j h/2$. Los valores de m_j abarcarán desde $m_j = -j$ hasta $m_j = +j$ en saltos de una unidad o sea, en total, $(2j+1)$ valores diferentes. Vemos así que la degeneración del estado de un electrón definido por un j dado es $(2j+1)$. Se podría preguntar si la suma de \vec{L} y \vec{S} se puede hacer de una manera totalmente arbitraria; es decir, si el ángulo que forman \vec{L} y \vec{S} para dar lugar a \vec{J} puede tener un valor cualquiera. La respuesta es a las claras negativa debido a la cuantificación espacial tanto de \vec{L} como de \vec{S} . En efecto, si en la identidad

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2LS \cos \theta , \quad [55]$$

donde θ es el ángulo indicado en la figura 20, se utiliza los módulos de los vectores en unidades de $h/2\pi$, se obtiene

$$j(j+1) = l(l+1) + s(s+1) + 2\sqrt{l(l+1)}\sqrt{s(s+1)} \cos \theta , \quad [56]$$

y de aquí:

$$\cos \theta = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2\sqrt{l(l+1)}\sqrt{s(s+1)}} , \quad [57]$$

donde se ve claramente que el valor de θ queda definido por los valores de los números cuánticos l y s .

En un electrón con un l determinado, j puede tener dos valores, $l + \frac{1}{2}$ y $l - \frac{1}{2}$, y por lo tanto hay dos ángulos para el acoplamiento o suma de L y S . Los dos estados resultantes acusan una pequeña diferencia de energía debida al campo magnético creado por el núcleo, ya que desde el punto de vista del electrón, el núcleo gira a su alrededor. La energía potencial del spin del electrón en el campo magnético creado por el movimiento orbital del núcleo, se llama *interacción spin-órbita*. El desdoblamiento de las líneas espectrales debido al spin del electrón constituye lo que se denomina *estructura fina* de las mismas.

Los núcleos de los átomos constan de protones y neutrones, partículas ambas que individualmente tienen spin igual a $\frac{1}{2}$. La suma de estos spines produce un momentum angular en los núcleos, que se indica con \vec{I} . Este momentum angular tiene las mismas propiedades y sigue las mismas reglas que cualquier momentum angular en mecánica cuántica. Es de esperar que este momentum angular \vec{I} contribuya al espectro de

los átomos. Así es en realidad, pero teniendo en cuenta que la masa de los núcleos es muchísimo mayor que la del electrón y que el momento magnético está relacionado con el momentum angular por una constante que es inversamente proporcional a la masa, resulta que la magnitud de este efecto es varios miles de veces menor que el efecto debido al spin del electrón, por lo que se llama apropiadamente *estructura hiperfina*.

Es útil resaltar el efecto de un campo magnético externo sobre los números cuánticos que caracterizan un estado atómico. En ausencia de campo magnético externo, de fuerzas y de torques, el momentum angular total del átomo se conservará, esto es, será fijo en módulo y en dirección, en tanto que \bar{L} y \bar{S} precesan a su alrededor. Cuando se aplica un campo magnético débil, \bar{L} y \bar{S} continúan la precesión en torno de \bar{J} , en tanto que éste tiende a orientarse por efecto del campo, precesando alrededor de la dirección del mismo. La orientación que toma \bar{J} respecto al campo aplicado será aquella que sea compatible con uno de los valores permitidos de m_j . Si se somete el átomo a un campo magnético muy intenso, se rompe el acoplamiento entre el spin y el momentum angular orbital, dejando ambos de precesar en torno de \bar{J} .

De todo esto se deduce que para campos magnéticos débiles o nulos, los números cuánticos que caracterizan un sistema atómico son n , l , j y m_j ; en tanto que para campos magnéticos muy fuertes los números que lo caracterizan son n , l , m_l , y m_s .

PRINCIPIO DE PAULI. NÚMEROS CUÁNTICOS Y ESTRUCTURA ATÓMICA

El principio de Pauli establece que en un átomo no puede haber dos electrones con el mismo conjunto de números cuánticos. Esto permite hallar la configuración electrónica de los átomos, ya que sabemos que para un n dado, l puede valer $0, 1, \dots, n-1$, y que para un l dado, existen $2(2l+1)$ estados posibles correspondientes a los $(2l+1)$ diferentes valores de m_l multiplicados por los dos posibles valores, $\pm \frac{1}{2}$, de m_s . Este número $2(2l+1)$ da entonces el número máximo de electrones que puede haber en un estado caracterizado por n y l .

Podemos imaginar que los átomos se van formando al añadir electrones, lo que va creando órbitas o capas sucesivas una vez que las previas se llenan por alcanzar el número máximo de electrones permitidos en las mismas. Caracterizamos una capa por el número n , la cual puede considerarse dividida en varias subcapas correspondientes a los diferentes valores de l para un n dado. Las subcapas se denominan s , p , d , f , g según que el valor de l sea, respectivamente, $0, 1, 2, 3, 4$.

Así, $n=1$, $l=0$ constituye la primera capa que se llena con 2 electrones; para la capa $n=2$ tenemos dos subcapas correspondientes una a $l=0$, que admite 2 electrones, y otra a $l=1$, que se llena con 6 electrones; en total 8 electrones; para $n=3$, tenemos $l=0$, $l=1$ y $l=2$, o sea un total de 18 electrones. De esta manera vamos construyendo los átomos y la tabla periódica de los elementos, pues una vez llena cada capa, vuelven a repetirse los valores de l con cierta perio-

Tabla de Elementos Químicos, por Capas y Subcapas

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	Configuración
	1 = 0	1 = 0, 1	1 = 0, 1, 2	1 = 0, 1, 2, 3	
H	1s				1s
He	1s ²				1s ²
Li	1s ²	2s			2s
Be	1s ²	2s ²			2s ²
B	1s ²	2s ² 2p			2p
C	1s ²	2s ² 2p ²			2p ²
N	1s ²	2s ² 2p ³			2p ³
O	1s ²	2s ² 2p ⁴			2p ⁴
P	1s ²	2s ² 2p ⁵			2p ⁵
Ne	1s ²	2s ² 2p ⁶			2p ⁶
Na	1s ²	2s ² 2p ⁶	3s		3s
Mg	1s ²	2s ² 2p ⁶	3s ²		3s ²
Al	1s ²	2s ² 2p ⁶	3s ² 3p		3p
Si	1s ²	2s ² 2p ⁶	3s ² 3p ²		3p ²
P	1s ²	2s ² 2p ⁶	3s ² 3p ³		3p ³
S	1s ²	2s ² 2p ⁶	3s ² 3p ⁴		3p ⁴
Cl	1s ²	2s ² 2p ⁶	3s ² 3p ⁵		3p ⁵
A	1s ²	2s ² 2p ⁶	3s ² 3p ⁶		3p ⁶
K	1s ²	2s ² 2p ⁶	3s ² 3p ⁶	4s*	4s
Ca	1s ²	2s ² 2p ⁶	3s ² 3p ⁶	4s ²	4s ²
Sc	1s ²	2s ² 2p ⁶	3s ² 3p ⁶ 3d	4s ²	3d
Ti	1s ²	2s ² 2p ⁶	3s ² 3p ⁶ 3d ²	4s ²	3d ²

* Existe una anomalía en el llenado de las capas del K y el Ca, en los que comienza a llenarse la 4s antes de hacerlo la 3d. Esto se puede explicar con una teoría más detallada del átomo.

dicidad, lo que corresponde a similares propiedades químicas. Así, todo átomo que tenga en su última capa un solo electrón en el estado s tiene propiedades parecidas. Los electrones de la última capa se describen por su *configuración*, esto es, por los números cuánticos $n\ell$ con un superíndice que indica el número de electrones de la subcapa que se está llenando.

Por ejemplo, el neón con $Z = 10$ tiene 10 electrones distribuidos así: 2 electrones que llenan la capa $n = 1$ y 8 electrones en la capa $n = 2$, de los cuales 2 completan la subcapa $\ell = 0$ y 6 están en la subcapa $\ell = 1$. De esta manera su configuración será $2p^6$.

El número total de electrones permitidos en una capa se obtiene sumando los electrones de cada una de las subcapas, sobre los valores permitidos de ℓ . Cada subcapa contiene $2(2\ell + 1)$ y para un n dado las subcapas se caracterizan por $\ell = 0, 1, \dots, (n - 1)$. Entonces

$$\begin{aligned} \text{Número de electrones} &= 2\{[2(0) + 1] + [2(1) + 1] + [2(2) + 1] + \\ &+ \dots + [2(n-1) + 1]\} = 2[1 + 3 + 5 + \dots + \\ &+ (2n-1)] = 2n^2. \end{aligned}$$

SISTEMAS DE PARTÍCULAS IDÉNTICAS: PRINCIPIO DE SIMETRIZACIÓN

Al tratar de aplicar la mecánica cuántica a colecciones o sistemas de varias partículas idénticas surgen nuevos problemas de profundas implicaciones, derivados del carácter de indistinguibilidad de las partículas submicroscópicas idénticas que los componen. Si se observa una colección de partículas idénticas clásicas, por ejemplo, un enjambre de abejas idénticas, siempre es posible seguir sus trayectorias, porque por muy idénticas que las abejas sean, siempre se puede, al principio de la observación, poner una marca sobre una, que no afecte su dinámica y que permita seguirla e identificarla en posiciones y tiempos posteriores.

Esto no se puede hacer, sin embargo, cuando se estudia un conjunto de partículas cuánticas idénticas como los electrones: en primer lugar, el seguimiento de sus trayectorias individuales carece de sentido de acuerdo con el principio de indeterminación y, en segundo lugar, si bien los electrones se conciben como paquetes de onda individualizados y bien separados inicialmente, con el tiempo se difunden traslapándose sus funciones de onda, lo que impide seguirles la pista.

Las partículas cuánticas idénticas son completamente indistinguibles entre sí y por ello si se tiene una partícula localizada, por ejemplo, en el origen, y otra idéntica localizada en una posición \vec{r}_1 , el estado obtenido al poner la segunda partícula en el origen y la primera a una distancia \vec{r}_1 , es el mismo estado que el primero, ya que no hay manera alguna de diferenciar ambas situaciones (nos estamos olvidando del spin).

Llamemos $\Psi(1, 2, 3, \dots, n)$ a la probabilidad de encontrar la primera partícula en \vec{r}_1 con spin s_1 , la segunda partícula en \vec{r}_2 con spin s_2 , y así

sucesivamente. En lo que sigue se llamará primera partícula a la descrita por el primer argumento de Ψ , segunda partícula a la del segundo argumento, etc.

Decir que n partículas son idénticas equivale a afirmar que no existe interacción que las pueda distinguir y así cualquier operador y , por consiguiente, cualquier partícula observable de la colección de las n partículas debe depender simétricamente de los índices o de otra forma de designarlos elegida arbitrariamente, ya que nada cambia cuando se intercambian entre sí dos de ellas.

Si definimos el operador de permutación P_{ij} como el que intercambia la partícula i -ésima y j -ésima en el estado, tendremos:

$$P_{ij}(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, n) = \Psi(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, n).$$

Cualquier permutación puede escribirse como un producto de las permutaciones P_{ij} de dos partículas, por ejemplo

$$P_{123} = P_{12}P_{13},$$

tomando en cuenta que las permutaciones, en general, no conmutan entre sí, por lo que es importante el orden en que se escribe la permutación. Así:

$$P_{12}P_{13}\Psi(123) = \Psi(231) = P_{123}\Psi(123),$$

no es igual que

$$P_{13}P_{12}\Psi(123) = \Psi(312).$$

Si se tiene un operador de varias partículas $A(1, 2, \dots, n)$, no necesariamente simétrico, que actúa sobre una función de onda de varias partículas, se tiene en general

$$P_{ij}A(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots)\Psi(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots) = A(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots) \cdot \Psi(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots) = A(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots)P_{ij}\Psi(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots),$$

por lo que debe interpretarse

$$P_{ij}A(\dots, i, \dots, j, \dots) = A(\dots, j, \dots, i, \dots)P_{ij}.$$

Si el operador A es simétrico se cumple $PA = AP$.

Es muy importante señalar que si el operador es simétrico, el valor de expectación del mismo en cualquier estado es independiente del orden en que se designen las partículas de ese estado, lo que da por resultado que mientras se trabaje con operadores simétricos, los resultados físicos no se alteran si se intercambiándose partículas, cualquiera que sea la simetría del estado. Por ello en el caso del operador correspondiente a la energía total de un estado de valor E , si P^{Ψ} es distinto de Ψ , a este último estado le corresponde también el mismo valor E . Tenemos así dos estados diferentes a los que correspon-

de la misma energía. Estos estados se llaman degenerados, y el fenómeno, *degeneración de intercambio*.

Es un hecho experimental que un par de partículas idénticas se encuentran siempre en un estado cuya función de onda respecto al operador P_{12} tiene autovalores ± 1 , es decir tal que $P_{12}\Psi(1,2) = \pm\Psi(2,1)$, dependiendo del tipo de partículas que se trate. Cuando se cumple que $P_{12}\Psi(1,2) = +\Psi(2,1)$, se dice que la función de onda es simétrica, y cuando $P_{12}\Psi(1,2) = -\Psi(2,1)$, se dice que la función de onda es antisimétrica. Para el caso de dos partículas, la función de onda siempre se puede escribir como la suma de dos funciones, una totalmente simétrica y otra totalmente antisimétrica, por que

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{2}[\underbrace{\Psi(1,2) + \Psi(2,1)}_{\Psi_s(1,2)}] + \frac{1}{2}[\underbrace{\Psi(1,2) - \Psi(2,1)}_{\Psi_a(1,2)}]$$

Se puede comprobar que

$$P_{12}\Psi_s(1,2) = \Psi_s(1,2) \quad P_{12}\Psi_a(1,2) = -\Psi_a(1,2).$$

La función de onda de dos electrones es siempre antisimétrica, en tanto que la función de onda de dos mesones π^0 es siempre simétrica. Las partículas que corresponden a estados simétricos se llaman bosones, en tanto que las partículas cuyos estados deben ser antisimétricos frente al intercambio de dos partículas se llaman fermiones. Ejemplos de los primeros son los piones, fotones y núcleos de He^4 , y de los segundos: electrones, protones, neutrones, neutrinos, muones, etc. Hay en general una conexión entre spin de la partícula y la simetría de los estados frente al intercambio de dos partículas. Las partículas con spin entero ($s = 0, 1, 2, \dots$) son siempre bosones, en tanto que las partículas de spin semientero son siempre fermiones. La conexión entre el spin y la estadística no se ha podido explicar en el marco de la mecánica cuántica no relativista, pero sí en el de la teoría cuántica de los campos.

47

Otro hecho experimental bien comprobado es que la función de onda de un sistema de n fermiones idénticos debe ser totalmente antisimétrico para el intercambio de dos cualesquiera de ellos y que la función de onda de n bosones debe ser completamente simétrica frente al intercambio de dos de ellos, señalando de paso que un sistema de n partículas idénticas que al comienzo de una observación se encuentra en un estado totalmente simétrico o totalmente antisimétrico debe permanecer indefinidamente en ese estado. Todo esto conduce a la formulación del Principio de Simetrización en estos términos: *Los estados puros de un sistema de partículas idénticas deben ser completamente simétricos o antisimétricos respecto del intercambio de dos partículas cualesquiera.*

La antisimetría de la función de onda para fermiones implica de inmediato que los fermiones idénticos deben satisfacer el principio de exclusión de Pauli, puesto que para ellos $\Psi(1,2,3,\dots) = -\Psi(2,1,3,\dots)$, donde se han intercambiado 1 y 2. Si, por ejemplo, $1 = 2$, entonces, $\Psi(1,2,3,\dots) = -\Psi(1,2,3,\dots)$, lo cual sólo es posible si Ψ es cero. Es

decir, la probabilidad de encontrar dos fermiones con iguales números cuánticos es cero o en términos más precisos dos fermiones no pueden ocupar el mismo estado cuántico.

TEORÍA CUÁNTICA DE LAS MOLÉCULAS

En la teoría de las moléculas juega un papel muy importante el hecho de que la masa de los núcleos de los átomos que las componen es muy grande comparada con la masa de los electrones. Por lo tanto, las velocidades de éstos son mucho mayores que la de los núcleos, lo que permite tratar en primera aproximación estos últimos como masas que se mantienen a una distancia fija. Esto se llama *aproximación adiabática*.

Veamos con más detalle en qué consiste esta aproximación. La energía total de una molécula es

$$E_t = T_e + T_N + V(e, N), \quad [58]$$

donde T_e es la energía cinética de los electrones, T_N la energía cinética de los núcleos y $V(e, N)$ la energía potencial de interacción de todas las partículas, la cual implica la interacción entre electrones, entre núcleos, y entre electrones y núcleos. Como aun en los casos más simples la energía potencial es una función bastante compleja, es muy difícil resolver la ecuación de Schrödinger. La aproximación adiabática consiste en suponer que $T_N \ll T_e$, y por lo tanto se puede considerar como una pequeña perturbación del sistema en el cual los núcleos están en reposo y los electrones se mueven respecto a los mismos. Esto permite estudiar por separado el movimiento de los electrones y el de los núcleos. Por razones de simplicidad estudiaremos una molécula diatómica, y de ellas la más sencilla; la molécula de hidrógeno, H-H.

En las moléculas diatómicas, se puede llegar a una ecuación de Schrödinger en una dimensión, reemplazando el término $V(e, N)$ por un potencial efectivo que depende únicamente de la distancia internuclear, como se ha representado en la figura 21. En ésta se observa que cuando la distancia internuclear es infinita, el potencial tiene una profundidad aproximada igual a 5 eV. Esta es la energía necesaria para separar los dos núcleos de hidrógeno y se la llama *energía de disociación*.

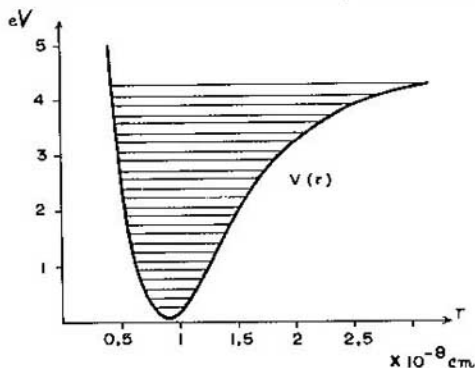


Fig. 21. Potencial efectivo $V(r)$ en la molécula de hidrógeno en función de la separación internuclear.

También se aprecia en la figura 21 el gran parecido del potencial efectivo con la curva del oscilador armónico, por lo menos en las proximidades del mínimo. Es de esperar que las propiedades de éste sean parecidas a las del oscilador armónico y así es en efecto; los niveles de energía de los núcleos están separados en forma aproximadamente uniforme y se encuentran en un número finito siempre que la energía de excitación no sea muy grande. Estos niveles de energía dentro del potencial efectivo son los *niveles vibracionales*, así llamados por corresponder a la energía potencial de los dos núcleos vibrando según el eje que los une, respecto a la posición de mínima energía.

Es útil hacer aquí una pregunta: ¿por qué hay un mínimo en el potencial efectivo? La respuesta puede darse analizando una configuración como la representada en la figura 22, correspondiente a la molécula de hidrógeno. Esta está compuesta por dos protones y dos electrones. Si se calcula la energía potencial electrostática de esa configuración y se la compara con la de aquella en la que los átomos están infinitamente separados, se halla que su diferencia es *negativa*, lo que indica que tal sistema está ligado.

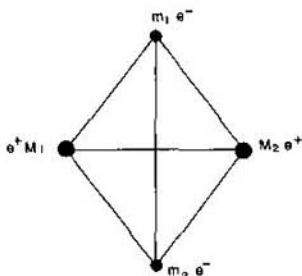


Fig. 22. Una posible configuración de electrones y protones en la molécula de hidrógeno.

Escribiendo la energía potencial en la forma

$$V = +e^2 \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{R} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{21}} - \frac{1}{r_{11}} - \frac{1}{r_{22}} \right), \quad [59]$$

donde r es la distancia entre ambos electrones, R la distancia entre los dos protones, y r_{ij} la distancia entre el protón i y el electrón j , la energía total será

$$E = T + V,$$

donde

$$T = \frac{1}{2m} (P_1^2 + P_2^2) + \frac{1}{2M} (P_1^2 + P_2^2),$$

y las letras mayúsculas indican masa y momentum de los protones, y las minúsculas, las correspondientes magnitudes de los electrones.

Manipulando V hasta lograr su mayor valor negativo, se encontraría que T tiene un valor tan grande que $E > 0$. Sin embargo, haciendo un balance apropiado de V y T , se puede hallar un máximo valor negativo de la energía, E_1 . Este corresponde a la energía del estado fundamental de la molécula y está representado en la figura 21 por el mínimo de

la misma. (En la figura se ha elegido el origen de las energías de modo que $E_1 = 0$.)

En las proximidades del mínimo, el potencial efectivo se puede escribir aproximadamente en la forma:

$$V(R) \approx \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dR^2} \right)_{R=R_0} (R - R_0)^2, \quad [60]$$

donde R es la distancia internuclear y R_0 la distancia correspondiente al mínimo de la energía potencial, cuyo valor se ha convenido en tomar nulo. Se ve que cerca del mínimo el potencial efectivo es aproximadamente igual al de un oscilador armónico de constante $k = (d^2V/dR^2)_{R=R_0}$, y cuya frecuencia angular es, por tanto, $\omega = \sqrt{k/M}$, donde

$$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \quad [61]$$

es la masa reducida. Por cierto, la constante se determina empíricamente a partir de los datos experimentales. En el caso de la molécula de hidrógeno, se halla que k es del orden de $R_y \hbar c / 4a_0^2$, donde R_y es la constante de Rydberg, ecuación [24], y a_0 es el radio de Bohr, ecuación [22]. Por consiguiente, se tiene para el orden de magnitud de la frecuencia de vibración:

$$\nu_v \sim \sqrt{\frac{R_y \hbar c}{4a_0^2 M}} = \nu_e \left(\frac{m}{M} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad [62]$$

donde $\nu_e = R_y c$ es la frecuencia asociada con una transición óptica en un átomo de hidrógeno. Esto indica que las frecuencias de vibración son mucho menores que las frecuencias correspondientes al espectro visible, debiéndose por lo tanto encontrar en la región infrarroja, tal como lo demuestran los datos experimentales.

Además de la energía potencial originada por la vibración de los núcleos respecto a su posición de equilibrio, la molécula tiene una cierta energía de rotación, ya que puede rotar alrededor de algún eje propio. Si, como antes, nos referimos a la molécula diatómica del hidrógeno, la línea que une los dos protones es un eje de simetría y es fácil imaginar que la molécula rota alrededor de un eje perpendicular a este eje de simetría con una velocidad angular ω , como si fuese un par de pesas unidas por una barra rígida.

El momento de inercia de la molécula respecto al eje de rotación es

$$I = MR^2,$$

donde M es la *masa reducida*, ecuación [61], y R la separación internuclear. El momentum angular J es

$$J = MR^2 \omega^2$$

y la energía cinética es

$$T = \frac{J^2}{2I}.$$

Es de esperar que las energías correspondientes a los niveles rotacionales sean del mismo orden que T, esto es

$$E \sim \frac{J^2}{2I},$$

y como el valor cuántico de J^2 es

$$J^2 = J(J+1) \frac{\hbar^2}{4\pi^2 I},$$

se tiene que

$$E \sim J(J+1) \frac{\hbar^2}{8\pi^2 I}.$$

La frecuencia asociada a estas energías sería del orden de

$$\nu_{\text{rot}} = \frac{E}{h} \sim \frac{\hbar}{8\pi^2 I}$$

y como para la molécula de hidrógeno I es aproximadamente $2M_{H_0} a_0^2$, donde a_0 es el radio de Bohr (ecuación [22]), se obtiene

$$\nu_{\text{rot}} \sim \frac{\hbar}{8\pi^2 M_{H_0} a_0^2} = \nu_0 \frac{m}{M_{H_0}}. \quad [63]$$

Las expresiones [62] y [63] para el orden de magnitud de las frecuencias de vibración y de rotación de la molécula de hidrógeno también describen en forma cualitativa las de cualquier molécula. De esta manera, podemos establecer la siguiente relación entre las frecuencias debidas a los electrones, a las vibraciones y a las rotaciones de las moléculas:

$$\nu_0 : \nu_v : \nu_{\text{rot}} \sim 1 : \left(\frac{m}{M}\right)^{\frac{1}{2}} : \frac{m}{M}.$$

Según esta relación, las rayas o bandas del espectro rotacional de las moléculas se deben hallar en la parte más lejana del espectro infrarrojo, en la región de las microondas, y así es en efecto.

TEORÍA CUÁNTICA DE CAMPOS

Al irse desarrollando la mecánica cuántica se pensó que no podía aplicarse a los problemas complejos y no lineales de la relatividad especial y general, teorías que sin embargo tenían validez en la escala macroscópica y cuyos principios estaban bien fundamentados. Hasta se llegó a creer que ambas teorías, la relatividad y la mecánica cuántica, fueran incompatibles. Sin embargo, la fusión de ambas disciplinas, o mejor dicho, la aplicación de las ideas de cuantización en relatividad ha dado origen a una nueva rama denominada Teoría Cuántica de Campos, que ha permitido un entendimiento de las interacciones fundamentales y una descripción de las partículas elementales.

En esencia, esta rama es una generalización de la mecánica cuántica adaptada a la descripción de un sistema con un número infinito de grados de libertad, donde no se cumple la ley de la conservación de partículas. El formalismo matemático adecuado a la descripción de los sistemas con número variable de partículas es el llamado de Segunda Cuantización, que abarca operadores que representan la creación y aniquilación de las partículas y para los cuales se cumplen las hipóte-

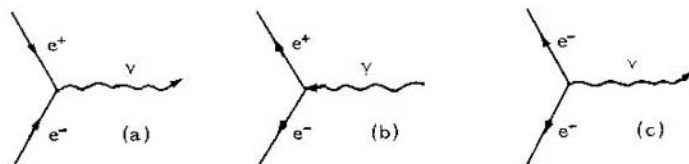
sis fundamentales de la mecánica cuántica. El nombre de Teoría Cuántica de Campos procede de que inicialmente se utilizó para explicar en términos cuánticos el comportamiento del campo electromagnético. Las predicciones teóricas de este nuevo enfoque estuvieron de acuerdo con algunos datos experimentales, por ejemplo en el del momento magnético anómalo del electrón, con una precisión extraordinaria (una parte en 10^9), lo que fue un gran incentivo para extender y aplicar la teoría a otras partículas, a otras interacciones y a otros campos.

Una partícula en esta teoría es un estado, caracterizado por ciertos números cuánticos, que aparece sistemáticamente en los procesos físicos. Esta definición se puede aplicar de la misma manera a sistemas con masa nula como el fotón y el neutrino, que a "partículas respetables" como el electrón, el protón y el neutrón y aun a otros entes como los fonones, considerados como estados colectivos de muchos sistemas en interacción. A estos últimos sistemas se les suele llamar cuasipartículas.

La Teoría Cuántica de Campos explica las fuerzas que actúan sobre las partículas a base de otras partículas que pueden ser absorbidas o emitidas, llamadas partículas virtuales por no poder detectarse.

El evento mediante el cual una partícula se desintegra en dos o más partículas, algunas de ellas virtuales, se representa gráficamente mediante un vértice. Por ejemplo, en el caso del campo electromagnético, los vértices básicos son:

52



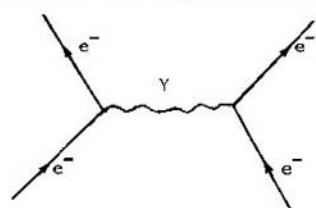
que corresponden, respectivamente, a los procesos: (a) aniquilación de un par electrón-positrón creando un fotón; (b) creación de un par electrón-positrón al desintegrarse un fotón, y (c) la desintegración de un electrón en otro electrón y un fotón.

De ahí que las interacciones entre las partículas se pueden visualizar por medio de diagramas que resultan de conectar dos vértices mediante las líneas correspondientes a las partículas virtuales intercambiadas.

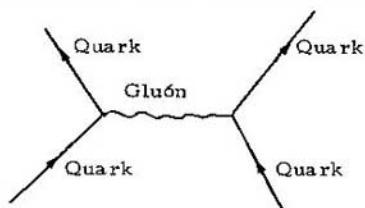
Cada una de las cuatro interacciones fundamentales de la naturaleza tiene su partícula de intercambio específica o cuanto correspondiente a esa interacción. El cuanto de las interacciones electromagnéticas es el fotón. El cuanto de las interacciones fuertes entre los quarks (supuestos componentes de los nucleones y mesones) es el gluón.* Las in-

* Para un tratamiento más extenso y sistemático de las partículas, véase Física de Partículas por I. Saavedra, en esta misma colección (monografía no. 4).

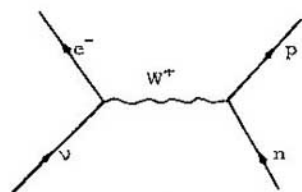
teracciones débiles se llevan a cabo mediante el intercambio de cuanta que son, en este caso, los bosones pesados W^+ , W^- y Z^0 , parecidos a los fotones excepto por el hecho de que tienen masa. El cuanto de gravitación es el gravitón, otra partícula sin masa, que aunque no ha podido ser observada, existe gran confianza de que se pueda detectar en el futuro. Los diagramas correspondientes a estas interacciones son:



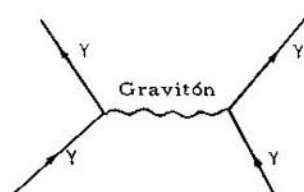
Electromagnética



Fuerte



Débil



Gravitatoria

Estas interacciones difieren mucho en cuanto a su alcance y a su intensidad relativa, ya que mientras las interacciones gravitatorias y electromagnéticas son de alcance muy largo, las interacciones débiles sólo se aprecian cuando la distancia entre las partículas en interacción es del orden de 10^{-17} m y las fuertes cuando es alrededor de 10^{-15} m. Estas dos últimas se dice que son de corto alcance. Hay entre ellas diferencias más notables aún en lo que se refiere a la intensidad de la fuerza. Si la interacción fuerte entre dos protones se define como intensidad 1, la interacción electromagnética entre estas mismas dos partículas es alrededor de 10^{-2} , la interacción débil de 10^{-6} y la interacción gravitatoria de 10^{-39} :

Interacción	Intensidad	Alcance	Actúa sobre	Partícula Intercambiada
Fuerte	1	10^{-15} m	Quarks	Gluón
Electromagnética	10^{-2}	∞	Partículas cargadas eléctricamente	Fotón
Débil	10^{-6}	10^{-17}	Hadrones Leptones	Bosones intermedios
Gravitatoria	10^{-39}	∞	Todo	Gravitones

A pesar de las discrepancias tan notables, que hay entre todas estas interacciones, la física de las tres últimas décadas ha puesto particular empeño en encontrar un elemento común unificador entre ellas, o en encontrar un formalismo físico y matemático apropiado a la descripción de las propiedades de las mismas y a la predicción de nuevas partículas y nuevos efectos, detectables experimentalmente.

La Teoría Cuántica de Campos con sus simetrías y leyes de conservación ha proporcionado el formalismo para esta descripción.

Una cosa es simétrica si después de someterse a cierta operación aparece exactamente igual. Por ejemplo, si se hace rotar un cubo 90° y aparece como si no hubiese cambiado y una esfera permanece invariante después de cualquier rotación alrededor de su eje. Las teorías físicas poseen también simetrías, pero lo que permanece invariante es su forma matemática después de ser sometidas a cierto tipo de transformaciones matemáticas. Las simetrías de las leyes físicas fundamentales se acostumbran a dividir en: exosimetrías que se refieren a atributos espacio temporales de las partículas, como energía, momentum, posición, spin, y endosimetrías relacionadas con sus atributos internos como cargas, isospin, hipercarga, etc.* Más importante desde el punto de unificación de las interacciones es la división de las simetrías en globales y locales. Una simetría es global cuando la transformación se aplica uniformemente a todos los puntos del espacio y es local cuando cada punto es transformado de manera independiente. Cuando ciertas leyes físicas son invariantes respecto a cierta simetría global, para que esas mismas leyes sean invariantes respecto a una simetría local es necesario introducir nuevos campos que dan lugar a nuevas fuerzas. Los campos así introducidos se llaman campos de norma y las transformaciones empleadas al efecto, transformaciones de norma o de "gauge".

54

Por ejemplo, la existencia de las fuerzas electromagnéticas se puede derivar del requisito de simetría local. En una teoría cuántica de campos las partículas cargadas se describen por campos caracterizados por dos números para todo punto en el espacio tiempo: una amplitud y una fase. Las cantidades observables correspondientes a estas partículas, como la energía total, no cambian cuando la fase es la misma para todos los puntos, es decir que el campo así descrito tiene simetría global respecto al cambio de fase. Una simetría local exigiría que estas cantidades observables permanecieran invariantes cuando la fase cambie independientemente para cada punto. Para lograr esto es necesario introducir el campo electromagnético como campo de norma, cuyos cuanta son los fotones, que son la causa de la fuerza electromagnética. De ahí que con simetría global no habría fuerzas electromagnéticas entre partículas cargadas, ni fotones y, como consecuencia, ni luz. Vemos así que aunque global pareciera de mayor importancia que local, de acuerdo con estas ideas, son las simetrías locales y las transformaciones de norma las que proporcionan el elemento unificador en la descripción de los procesos fundamentales de la física. Con es-

* Véase Física de Partículas, I. Saavedra, monografía no. 4 de esta serie.

tas ideas y el formalismo matemático apropiado para este tipo de transformaciones se han podido explicar y unificar en una misma teoría las interacciones electromagnéticas y las interacciones débiles. Ahora bien, se está muy cerca de lograr una unificación de estos dos con la interacción fuerte y se pretende que las cuatro interacciones: electromagnética, débil, fuerte y gravitatoria puedan ser involucradas en una superteoría que unifique partículas con spins diferentes, lo que se logra mediante la supersimetría. Con esto se haría realidad el largo y casi viejo sueño de Einstein, quien durante la última parte de su vida trabajó infructuosamente en la búsqueda de una teoría unificada de campos que incluyese la gravitación y el electromagnetismo. Quizás los resultados fueron negativos por no haber incorporado en esa teoría las ideas de la mecánica cuántica, como ahora lo hace la teoría cuántica de campos. Sin embargo, el esquema unificador completo de la supersimetría, dista aún de ser convincente.

CONCLUSIÓN

En los que antecede se ha tratado de bosquejar los principios y algunas de las aplicaciones elementales de la mecánica cuántica, verificando la comprobación experimental de las predicciones de la teoría.

Después de explicar las moléculas desde el punto de vista cuántico, se han explicado algunas de las propiedades microscópicas de los sólidos, tales como la superconductividad, las propiedades dieléctricas, los cambios de fase, etc. Ello ha exigido suplementar los fundamentos de la teoría con métodos matemáticos complejos que toman en cuenta las interacciones entre los diversos componentes del sistema objeto de estudio.

Este es un largo y difícil programa, cuya principal dificultad estriba en el tratamiento matemático de sistemas de muchas partículas. Las computadoras de mayor capacidad resultan inadecuadas para procesar los cálculos y ecuaciones que se obtienen al tomar en cuenta interacciones entre varios cuerpos. Sin embargo, se ha comenzado a recorrer el camino, y aunque siempre es necesario formular hipótesis y aproximaciones simplificadoras, el futuro parece prometedor.

Se podría pensar en aplicar los mismos principios a los sistemas biológicos y entender la vida y sus fenómenos como procesos cuánticos. La energía a la que las moléculas se agrupan para formar la vida es al parecer tan crítica que salvo en muy pocos componentes de nuestro sistema solar ello puede verificarse. A una temperatura muy baja las moléculas forman cristales o líquidos, y a temperatura elevada se disocian formando átomos y aun núcleos, como es el caso del Sol.

¿Será la vida una cosa tan singular desde el punto de vista físico?
¿Podrá ella ser explicada por las mismas leyes del mundo atómico y molecular?

La aplicación de la mecánica cuántica a los sistemas biológicos constituye la biología molecular y es probable que a través de su estudio se llegue a conocer cómo las células acumulan la información que les permite agruparse para dar lugar a un hombre o a un árbol.

BIBLIOGRAFÍA

- (1) WICHMANN, H. Quantum Physics (edición preliminar), Berkeley Physics Course, Vol. 4, McGraw-Hill, Nueva York, N. Y. (1967).
- (2) KOMPANEYETS, A. Basic Concepts in Quantum Mechanics, Reinhold Publishing Co., Nueva York, N. Y. (1966).
- (3) RICHTMEYER, F. y colaboradores. Introduction to Modern Physics, McGraw-Hill, Nueva York, N. Y. (1955).
- (4) FEYNMAN, R. P., LEIGHTON, R. B. y SANDS, M. The Feynman Lectures on Physics, Vol. I, Addison Wesley, Reading, Massachusetts (1964).
- (5) D'ABRO, A. The Rise of the New Physics, Vol. II, Dover Publications, Nueva York, N. Y. (1951).