

FISICA

Vol. III FUNDAMENTOS CUANTICOS Y ESTADISTICOS

Autores:

MARCELO ALONSO

EDWARD J. FINN

Versión en español de:

CARLOS ALBERTO HERAS

JOSE A. BARRETO ARAUJO



FONDO EDUCATIVO INTERAMERICANO, S.A.

Tabla A-1 Tabla periódica de los elementos

Las masas atómicas, basadas en el número exacto 12,00000 asignado como masa atómica del isótopo del carbono, ^{12}C , son los valores más recientes (1961) adoptados por la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada. La unidad de masa usada en esta tabla se denomina *unidad de masa atómica* (uma): $1 \text{ uma} = 1,6604 \times 10^{-27} \text{ kg}$. En esta

Grupo	I	II	III	IV
Período 1	Serie 1 1 H 1,00797			
2	2 3 Li 6,939	4 B 9,0122	5 B 10,811	6 C 12,01115
3	3 11 Na 22,9898	12 Mg 24,312	13 Al 26,9815	14 Si 28,086
4	4 19 K 39,102	20 Ca 40,08	21 Sc 44,956	22 Ti 47,90
	5 29 Cu 63,54	30 Zn 65,37	31 Ga 69,72	32 Ge 72,59
5	6 37 Rb 85,47	38 Sr 87,62	39 Y 88,905	40 Zr 91,22
	7 47 Ag 107,870	48 Cd 112,40	49 In 114,82	50 Sn 118,69
6	8 55 Cs 132,905	56 Ba 137,34	55-71 Serie de los lantánidos*	72 Hf 178,49
	9 79 Au 196,967	80 Hg 200,59	81 Tl 204,37	82 Pb 207,19
7	10 87 Fr [223]	88 Ra [226,05]	89-Serie de los actinidos**	

*Serie de los lantánidos: (57 La 138,91 58 Ce 140,12 59 Pr 140,907 60 Nd 144,24 61 Pm [147] 62 Sm 150,35

**Serie de los actinidos: (89 Ac [227] 90 Th 232,038 91 Pa [231] 92 U 238,03 93 Np [237] 94 Pu [242]

Tabla 4.2 Constantes fundamentales

Constante	Símbolo	Valor
Velocidad de la luz	c	$2,9979 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Carga elemental	e	$1,6021 \times 10^{-19} \text{ C}$
Masa en reposo del electrón	m_e	$9,1091 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Masa en reposo del protón	m_p	$1,6725 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Masa en reposo del neutrón	m_n	$1,6748 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Constante de Planck	h	$6,6256 \times 10^{-34} \text{ J s}$
	$\hbar = h/2\pi$	$1,0545 \times 10^{-34} \text{ J s}$
Carga específica del electrón	e/m_e	$1,7588 \times 10^{11} \text{ kg}^{-1} \text{ C}$
Relación carga-carga	h/e	$4,1356 \times 10^{-15} \text{ J s C}^{-1}$
Radio de Bohr	a_0	$5,2917 \times 10^{-11} \text{ m}$
Longitud de onda Compton del electrón	$\lambda_{C,e}$	$2,4262 \times 10^{-12} \text{ m}$
	$\lambda_{C,p}$	$1,3214 \times 10^{-15} \text{ m}$
	R	$1,0974 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$
	μ_B	$9,2732 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$

escala, la masa atómica del carbono es 12,01115 porque es el promedio de la de los diferentes isótopos presentes en el carbono natural. (Para los elementos producidos artificialmente, se da entre corchetes la masa atómica aproximada del isótopo más estable.)

V		VI		VII		VIII			0
									2 He 4,0026
7 N 14,0067		8 O 15,9994		9 F 18,9984					10 Ne 20,183
15 P 30,9738		16 S 32,064		17 Cl 35,453					18 Ar 39,948
23 V 50,942		24 Cr 51,996		25 Mn 54,9380	26 Fe 55,847	27 Co 58,9332	28 Ni 58,71		
33 As 74,9216		34 Se 78,96		35 Br 79,909					36 Kr 83,80
41 Nb 92,906		42 Mo 95,94		43 Tc [99]	44 Ru 101,07	45 Rh 102,905	46 Pd 106,4		
51 Sb 121,75		52 Te 127,60		53 I 126,9044					54 Xe 131,30
73 Ta 180,948		74 W 183,85		75 Re 186,2	76 Os 190,2	77 Ir 192,2	78 Pt 195,09		
83 Bi 208,980		84 Po [210]		85 At [210]					86 Rn [222]

63 Eu 151,96 [243]	64 Gd 157,25 [245]	65 Tb 158,924 [249]	66 Dy 162,50 [249]	67 Ho 164,930 [253]	68 Er 167,26 [255]	69 Tm 168,934 [256]	70 Yb 173,04 [256]	71 Lu 174,97 103
--------------------------	--------------------------	---------------------------	--------------------------	---------------------------	--------------------------	---------------------------	--------------------------	------------------------

Constante	Símbolo	Valor
Constante de Avogadro	N_A	$6,0225 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Constante de Boltzmann	k	$1,3805 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Constante de los gases	R	$8,3143 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
Volumen normal del gas ideal (a temperatura y presión normales)	V_0	$2,2414 \times 10^{-2} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$
Constante de Faraday	F	$9,6487 \times 10^4 \text{ C mol}^{-1}$
Constante de Coulomb	K_e	$8,9874 \times 10^9 \text{ N m}^2 \text{ C}^{-2}$
Permitividad del vacío	ϵ_0	$8,8544 \times 10^{-12} \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ C}^2$
Constante magnética	K_m	$1,0000 \times 10^{-7} \text{ m kg C}^{-2}$
Permeabilidad del vacío	μ_0	$1,2566 \times 10^{-6} \text{ m kg C}^{-2}$
Constante de gravitación	γ	$6,670 \times 10^{-11} \text{ N m}^2 \text{ kg}^{-2}$
Aceleración de la gravedad a nivel del mar en el ecuador	g	$9,7805 \text{ m s}^{-2}$

Constantes numéricas: $\pi = 3,1416$; $e = 2,7183$; $\sqrt{2} = 1,4142$; $\sqrt{3} = 1,7320$

FISICA

**VOLUMEN III: FUNDAMENTOS CUANTICOS
Y ESTADISTICOS**

FISICA

VOLUMEN III: FUNDAMENTOS CUANTICOS Y ESTADISTICOS

MARCELO ALONSO

*Departamento de Física, Universidad de Georgetown
Washington, D.C.*

Departamento de Asuntos Científicos, Organización de los Estados Americanos

EDWARD J. FINN

*Departamento de Física, Universidad de Georgetown
Washington, D.C.*



FONDO EDUCATIVO INTERAMERICANO, S. A.

Bogotá - Caracas - México - Panamá - San Juan - Santiago - São Paulo

Versión en español de la obra inglesa titulada
Fundamental University Physics, Volume III,
Quantum and Statistical Physics, por Marcelo
Alonso y Edward J. Finn, edición de 1968,
publicada por Addison-Wesley Publishing Company,
Reading, Mass., EE. UU. Esta edición en español
es la única autorizada.

El diseño de la cubierta de este volumen es una
adaptación del número publicado en agosto de 1966
de la revista *Américas* que publica la Unión
Panamericana en español, inglés y portugués.
La adaptación se ha hecho con permiso especial.

© 1971 por FONDO EDUCATIVO INTERAMERICANO, S. A.

Todos los derechos han sido reservados. Ni este libro ni parte de él pueden ser
reproducidos en forma alguna sin el permiso escrito de su editor. Printed in Spain.
Impreso en España. Tarjeta del catálogo de la Biblioteca del Congreso de los
EE. UU.: 74-123319.

Depósito Legal: B. 34 213 (III)-1971

Talleres Gráficos Ibero-Americanos, S. A. Provenza, 86. Barcelona-15 (España)

Este libro es el tercero y último volumen de una serie publicada bajo el título general de *Física*. La finalidad de esta serie es ofrecer a los estudiantes de ciencias y de ingeniería una presentación lógica y unificada de la física al nivel introductorio, dando énfasis a las ideas básicas que constituyen el fundamento de la física: las leyes de conservación, la interacción entre partículas y campos y la descripción atómica de la materia. Hemos tratado de presentar los conceptos físicos de tal modo que el estudiante logre una comprensión clara de su significado teórico y se dé cuenta de su fundamento experimental, notando la interrelación estrecha entre la teoría y el experimento. Hemos tratado también de desarrollar en el estudiante la habilidad para manipular la matemática necesaria a fin de expresar esos conceptos. Los tres volúmenes cubren el equivalente a un curso de dos semestres de física general más un curso de física moderna en uno (o dos) semestres. El volumen I trata de la mecánica y la interacción gravitacional. El volumen II se ocupa de las interacciones electromagnéticas y de las ondas. El volumen III abarca la física cuántica y la física estadística (incluyendo la termodinámica). Aunque los tres volúmenes están estrechamente relacionados y constituyen una secuencia lógica, cada uno es autocontenido y se puede utilizar independientemente de los otros. Esto se aplica particularmente al volumen III, que cubre la mayoría de los temas habitualmente incluidos en un curso introductorio de física moderna.

Los planes de estudio de todas las ciencias se hallan presionados para que incorporen nuevos temas que están cobrando mayor importancia. Esperamos que esta serie alivie esas presiones, elevando en el estudiante el nivel de comprensión de los conceptos de la física y la habilidad para aplicarlos a situaciones concretas. De este modo se pretende mejorar el nivel de muchos cursos intermedios que se ofrecen en los planes de estudio de pregrado. Los cursos tradicionales de pregrado: mecánica, electromagnetismo y física moderna, son los que más se benefician con este mejoramiento de nivel. Así, el estudiante terminará su carrera de pregrado con conocimientos superiores a los de antes, beneficio de importancia para aquellos que finalicen sus estudios a esta altura. Además habrá más oportunidad para introducir cursos nuevos y más interesantes al nivel graduado. Esta misma tendencia se encuentra en los textos básicos más recientes de otras ciencias para los primeros y segundos años universitarios.

La primera parte de este volumen se denomina física cuántica. Las ideas cuánticas son la esencia de la física de hoy. Desafortunadamente, excepto por una breve introducción a las ideas de Bohr y a la dualidad onda-partícula en los cursos introductorios de física general, ha habido a menudo una demora en «exponer» los estudiantes a los conceptos de la mecánica cuántica y sus aplicaciones. Tradicionalmente, sólo los estudiantes de física y de química aprendían mecánica cuántica y aun en esos casos raramente antes del último año. Sin embargo, los estudiantes de física y de química deberían adquirir un conocimiento operativo de las ideas cuánticas en una etapa anterior dentro de su plan de estudios de modo que puedan utilizar este conocimiento en los cursos subsiguientes de pregrado. La Comisión de Física

para Universitarios (*Commission on College Physics*) recomienda calurosamente este procedimiento. Las tendencias actuales en la biología y en la ingeniería exigen que los estudiantes de estos campos alcancen también una comprensión básica del estado sólido y de la estructura molecular. Por ello hemos tenido el cuidado de presentar la mecánica cuántica de un modo que, aunque elemental, permita al estudiante aplicar los conceptos cuánticos a situaciones diversas.

El capítulo 1 es una introducción a los fundamentos de las ideas cuánticas. En el capítulo 2 se continúa con las bases necesarias de la mecánica cuántica, dando énfasis a la manera de extraer información física acerca de un sistema partiendo de la forma de la función energía potencial y de un conocimiento de la naturaleza general de las funciones de onda. En los capítulos siguientes, del 3 al 9, se aplican los conceptos y las técnicas cuánticas al análisis de átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas fundamentales.

En la segunda parte del texto (denominada física estadística), usamos métodos estadísticos para tratar las propiedades macroscópicas de la materia. La física estadística es, como la mecánica cuántica, una herramienta bien fundamentada y poderosa que se debe poner en manos estudiantiles tan pronto como sea posible. Después de estudiar la mecánica estadística clásica en el capítulo 10, presentamos en el capítulo 11 la termodinámica desde un punto de vista estadístico y la aplicamos a los gases ideales y reales en el capítulo 12. Estamos firmemente convencidos de que éste es el método más apropiado para iniciar al estudiante en los conceptos de la termodinámica. El texto termina con una breve introducción a la estadística cuántica en el capítulo 13.

Como muchos estudiantes aprenden actualmente las ideas básicas de la relatividad en su curso de física general, la teoría especial de la relatividad se trata en el apéndice. (En los volúmenes I y II de la serie hay una discusión completa de la relatividad.) En el apéndice se tratan también algunos aspectos colaterales como velocidad de grupo y métodos de detección de partículas.

Hemos mantenido las exigencias matemáticas dentro de los temas cubiertos en un curso normal de cálculo diferencial o integral. A menudo hemos omitido o relegado a las secciones de problemas los desarrollos matemáticos que no son esenciales para la comprensión de las ideas en física: un ejemplo de tales desarrollos es la labor, un poco aburrida a veces, de encontrar ciertas soluciones a la ecuación de Schrödinger.

Muchas aplicaciones de los principios fundamentales, así como la discusión de algunos tópicos más avanzados, aparecen en forma de ejemplos resueltos. El texto ha sido escrito de manera que el estudiante pueda omitir todos los ejemplos en la primera lectura. En una segunda lectura, el estudiante deberá considerar los ejemplos elegidos por el profesor. Según la conveniencia de éste, los ejemplos se pueden discutir o proponer conforme a cierta selección. Ciertas secciones del texto se pueden omitir sin pérdida de continuidad. Los problemas que se encuentran al final de cada capítulo siguen el orden del mismo, y hay algunos más difíciles al final. El gran número y la diversidad de problemas significa que el profesor puede elegir los que mejor se adapten a la capacidad de sus estudiantes. De aquí que seleccionando en forma apropiada el material del texto, el profesor pueda adaptarlo a un curso de uno o de dos semestres y al mismo tiempo motivar al estudiante suficientemente para que se enfrente con ese desafío.

Queremos expresar nuestra gratitud a todos aquellos que con su estímulo y su ayuda hicieron posible este trabajo. Nuestro reconocimiento especial al Profesor David Lazarus, cuyos comentarios y críticas permitieron mejorar muchos aspectos del texto. Por último, pero no con menos calor, damos las gracias a nuestras esposas, quienes nos han apoyado pacientemente en esta tarea.

MARCELO ALONSO
EDWARD J. FINN

PARTE I FISICA CUANTICA

Capítulo 1 Fundamentos de la física cuántica

Introducción 4. Radiación electromagnética 4. Radiación de cuerpo negro 7. Emisión fotoeléctrica 12. Dispersión de la radiación por electrones libres 14. Fotones 18. Estados estacionarios 22. Evidencia experimental de los estados estacionarios 27. Interacción de la radiación con la materia 30. Partículas y campos 34. Partículas y paquetes de ondas 39. El principio de indeterminación de Heisenberg para la posición y el momentum 40. La relación de indeterminación para el tiempo y la energía 44.

Capítulo 2 Mecánica cuántica

Introducción 55. Función de onda y densidad de probabilidad 55. Ecuación de Schrödinger 58. Escalón de potencial 61. Partícula en una caja de potencial 63. El oscilador armónico 74. Niveles de energía y funciones de onda en general 78. Penetración a través de una barrera de potencial 83. Simetría, funciones de onda y paridad 91. La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo 93. Probabilidad de transición y reglas de selección 97. Teoría formal de la mecánica cuántica 99.

Capítulo 3 Átomos con un electrón

Introducción 113. Átomo de hidrógeno 113. Espectro del hidrógeno 119. Cuantización del momentum angular 122. Funciones de onda de un electrón en un campo de fuerzas centrales 126. Efecto Zeeman 137. Espín del electrón 140. Adición de momenta angulares 142. Interacción espín-órbita 144.

Capítulo 4 Átomos con muchos electrones

Introducción 155. Átomo de helio 155. El principio de exclusión 164. Estructura atómica 166. Acoplamiento L-S 170. Átomos con uno o dos electrones de valencia 177. Espectros de rayos X 182.

Capítulo 5 Moléculas

Introducción 190. La molécula de hidrógeno ionizada 191. Orbitales moleculares de moléculas diatómicas 199. Configuración elec-

trónica de algunas moléculas diatómicas 202. Moléculas poliatómicas 209. Moléculas conjugadas 216. Rotaciones moleculares 220. Vibraciones moleculares 223. Transiciones electrónicas en moléculas 230. Conclusión 233.

Capítulo 6 Sólidos

Introducción 240. Tipos de sólidos 240. Teoría de bandas 252. Modelo de electrones libres 255. Movimiento electrónico en una estructura periódica 260. Conductores, aisladores y semiconductores 270. Teoría cuántica de la conductividad eléctrica 278. Transiciones radiativas en sólidos 283.

Capítulo 7 Estructura nuclear

Introducción 293. Isótopos, isótonos e isóbaros 293. La unidad de masa atómica 296. Propiedades del núcleo 297. Energía de ligadura nuclear 304. Fuerzas nucleares 308. El estado fundamental del deuterón 311. Dispersión neutrón-protón a bajas energías 313. Modelo de capas 321. Transiciones radiativas nucleares 329.

Capítulo 8 Procesos nucleares

Introducción 340. Desintegración radioactiva 340. Desintegración alfa 346. Desintegración beta 351. Reacciones nucleares 359. Fisión nuclear 368. Fusión nuclear 374. El origen de los elementos 378.

Capítulo 9 Partículas fundamentales

Introducción 389. Genealogía de las partículas 390. Partículas y antipartículas 392. Inestabilidad de las partículas 398. Leyes de conservación 409. Invariancia, simetría y leyes de conservación 415. Resonancias 427. ¿Qué es una partícula fundamental? 432.

PARTE 2 FISICA ESTADISTICA

Capítulo 10 Mecánica estadística clásica

Introducción 446. Equilibrio estadístico 446. Ley de distribución de Maxwell-Boltzmann 448. Temperatura 455. Equilibrio térmico 460. Aplicación al gas ideal 462.

Capítulo 11 Termodinámica

Introducción 474. Conservación de la energía de un sistema de partículas 474. Sistemas de muchas partículas; trabajo 476. Sistemas de muchas partículas; calor 478. Primera ley de la termodinámica 479. Representación gráfica de procesos 481. Procesos especiales 485. Entropía y la segunda ley de la termodinámica 487. Entropía y calor 492. Estudio de procesos mediante la entropía. 496.

Capítulo 12 Propiedades térmicas de los gases

Introducción 506. La ecuación de estado de un gas ideal 506. Ecuación de estado para los gases reales 509. Capacidades caloríficas de un gas ideal monoatómico 516. Capacidades caloríficas de un gas ideal poliatómico 517. El principio de equipartición de la energía 524.

Capítulo 13 Estadística cuántica

Introducción 531. Ley de distribución de Fermi-Dirac 531. Gas de electrones 535. Aplicación de la estadística de Fermi-Dirac a los electrones de los metales 538. Ley de distribución de Bose-Einstein 540. Gas de fotones 543. Capacidad calorífica de los sólidos 548. Gas ideal en la estadística cuántica 552. Comparación de las tres estadísticas 555.

Apéndices

I Mecánica relativista 563. II Colisiones 567. III Velocidad de grupo 573. IV Algunas integrales útiles 574. V La fórmula de Stirling 575. VI Multiplicadores indeterminados de Lagrange 576. VII Detección de partículas 577.

Tablas 589

Lista de tablas 593

Respuestas a los problemas con número impar 595

Índice alfabético 603

PARTE I

FISICA CUANTICA

- 1 *Fundamentos de la física cuántica*
- 2 *Mecánica cuántica*
- 3 *Atomos con un electrón*
- 4 *Atomos con muchos electrones*
- 5 *Moléculas*
- 6 *Sólidos*
- 7 *Estructura nuclear*
- 8 *Procesos nucleares*
- 9 *Partículas fundamentales*

Uno de los objetivos fundamentales de la física es analizar las propiedades de los componentes básicos de la materia y los procesos que ocurren entre ellos como resultado de sus interacciones. Estos componentes básicos — llamados partículas fundamentales o elementales — son electrones, protones, neutrones (y otros) que se agrupan formando núcleos, átomos y moléculas. A su vez, estos grupos se combinan para formar la materia que observamos macroscópicamente. Aunque el movimiento de las partículas fundamentales sigue los principios de conservación del momentum, del momentum angular y de la energía, el análisis de este movimiento requiere un esquema conceptual diferente, en muchos aspectos, del desarrollado en la mecánica clásica (o newtoniana) para el análisis del movimiento macroscópico. Esta teoría más refinada se denomina *mecánica cuántica*. Debemos comprenderla antes de embarcarnos en el estudio de átomos, moléculas y núcleos. Afortunadamente, los átomos y las moléculas son esencialmente el resultado de *interacciones electromagnéticas* entre los núcleos (carga positiva) y los electrones (carga negativa). Podemos entonces estudiar los átomos y las moléculas, sin recurrir a otras fuerzas menos comprendidas, combinando las leyes del electromagnetismo con las de la mecánica cuántica. También se puede usar la misma técnica para los gases, los líquidos y los sólidos. Por otro lado, los núcleos son básicamente el resultado de un nuevo tipo de fuerza: la llamada *interacción fuerte o nuclear*. Como la interacción fuerte aún no se comprende bien, su análisis es mucho más complicado. Es por ello que nuestro estudio de los núcleos en este texto debe ser de índole más bien descriptiva.

El estudio de las partículas fundamentales es posiblemente el campo más dinámico y estimulante de la física contemporánea. Las interacciones que se observan entre estas partículas exigen la introducción de otro tipo de fuerza además de la interacción fuerte. Esta fuerza se denomina *interacción débil*. La *interacción gravitacional*, que es la más débil de todas las interacciones, juega un rol de poca importancia en lo que respecta a la estructura básica de la materia.

La intensidad relativa de las cuatro interacciones es:

fuerte	1
electromagnética	10^{-2}
débil	10^{-13}
gravitacional	10^{-38}

Los procesos que involucran partículas fundamentales han dado origen a un nuevo formalismo algo diferente de la mecánica cuántica llamado *teoría cuántica de campos*. Esta teoría es demasiado compleja para ser considerada en este texto.

1

FUNDAMENTOS DE LA FISICA CUANTICA

- 1.1* Introducción
- 1.2* Radiación electromagnética
- 1.3* Radiación de cuerpo negro
- 1.4* Emisión fotoeléctrica
- 1.5* Dispersión de la radiación por electrones libres
- 1.6* Fotones
- 1.7* Estados estacionarios
- 1.8* Evidencia experimental de los estados estacionarios
 - 1.9* Interacción de la radiación con la materia
 - 1.10* Partículas y campos
 - 1.11* Partículas y paquetes de ondas
 - 1.12* El principio de indeterminación de Heisenberg
para la posición y el momentum
- 1.13* La relación de indeterminación para el tiempo y la energía

1.1 Introducción

A fines del siglo XIX y durante el primer cuarto del XX se acumuló cierta evidencia experimental de que la interacción de la radiación electromagnética con la materia no estaba enteramente de acuerdo con las leyes del electromagnetismo. Estas leyes, que son el resultado de los trabajos de Ampère, Laplace, Faraday, Henry, Maxwell y muchos otros, están sintetizadas en las ecuaciones de Maxwell para el campo electromagnético. Al mismo tiempo se estaba desarrollando la teoría de la estructura atómica de la materia, principalmente como resultado del descubrimiento del electrón y de la confirmación del modelo nuclear para el átomo. Otra serie de experimentos obligó a los físicos a revisar sus conceptos sobre el movimiento de partículas subatómicas, ya que aparentemente no se movían exactamente de acuerdo con las suposiciones de la mecánica newtoniana. Para explicar las nuevas observaciones, varios físicos incorporaron, más o menos *ad hoc*, una serie de nuevas ideas. Con el correr del tiempo, y gracias a los esfuerzos de muchos hombres brillantes, estas ideas evolucionaron hasta constituir lo que hoy día se conoce como *teoría cuántica*; esta teoría es posiblemente la esencia de la física contemporánea. En este capítulo pasaremos revista a las bases experimentales más importantes de la física cuántica.

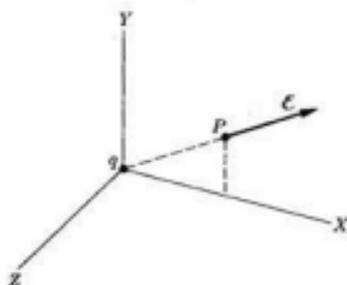


Fig. 1-1. Campo eléctrico de una carga en reposo.

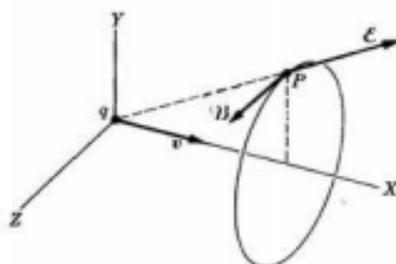


Fig. 1-2. Campos eléctrico y magnético de una carga en movimiento uniforme.

1.2 Radiación electromagnética

La mejor forma de describir la interacción electromagnética entre dos partículas cargadas es en función del concepto de campos eléctrico y magnético producidos por las cargas. Cuando una partícula cargada está en reposo respecto a un observador inercial, éste mide un campo que se denomina campo eléctrico de la carga (fig. 1-1). Sin embargo, si la carga está en movimiento respecto al observador, éste observa un campo diferente, denominado campo electromagnético de la carga (fig. 1-2). Uno de los componentes del campo se sigue llamando campo eléctrico, mientras que el otro se denomina campo magnético. Estos campos dependen de la velocidad y de la aceleración de la carga respecto al observador. Como la separación del campo producido por una carga en una parte eléctrica

y en una magnética depende del movimiento relativo de la carga y el observador, debemos hablar sólo del campo electromagnético de la partícula cargada. Inversamente, cuando una partícula se mueve en el campo electromagnético producido por otras cargas, experimenta una fuerza dada por

$$F = q(\mathcal{E} + \mathbf{v} \times \mathcal{B}),$$

donde \mathcal{E} y \mathcal{B} son, respectivamente, los campos eléctrico y magnético medidos por un observador y \mathbf{v} la velocidad de la partícula relativa al observador. De este modo podemos describir en función de campos la interacción electromagnética de partículas cargadas.

Se necesita energía para establecer un campo electromagnético. La energía por unidad de volumen de un campo electromagnético en el vacío es

$$E = \frac{1}{2}\epsilon_0\mathcal{E}^2 + \frac{1}{2\mu_0}\mathcal{B}^2, \quad (1.1)$$

donde ϵ_0 y μ_0 son la permitividad y la permeabilidad del vacío, respectivamente.

La energía de un campo electromagnético *estático* (esto es, un campo que no varía en el tiempo) permanece evidentemente constante. Sin embargo, cuando el campo *depende del tiempo*, la energía electromagnética también depende de éste en cada punto. Las variaciones de un campo electromagnético en el tiempo dan lugar a ondas electromagnéticas que se propagan con velocidad

$$c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0} \approx 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}, \quad (1.2)$$

que es igual a la velocidad de la luz en el vacío. Podemos decir que la onda lleva la energía del campo electromagnético. Esta energía transportada por una onda electromagnética se denomina a veces *radiación electromagnética*.

Como una carga en reposo respecto a un observador produce un campo estático, la carga no irradia energía electromagnética. Se puede demostrar también que una carga en movimiento rectilíneo uniforme no irradia energía electromagnética porque la energía total de su campo electromagnético permanece constante. Cuando una carga está en movimiento acelerado se presenta una situación totalmente diferente. La energía total del campo electromagnético de una carga acelerada varía en el tiempo. Por lo tanto

una carga acelerada irradia energía electromagnética.

La rapidez con que una carga q moviéndose con velocidad \mathbf{v} y aceleración \mathbf{a} irradia energía es, cuando la velocidad es pequeña respecto a la de la luz,

$$\frac{dE}{dt} = \frac{q^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}. \quad (1.3)$$

Una conclusión importante es que para mantener la carga en movimiento acelerado se le debe suministrar energía para compensar la que se transfiere como radiación. Esto significa que cuando se acelera un ion en un acelerador Van de

Graaff o en un ciclotrón, por ejemplo, una fracción de la energía suministrada al ion se pierde en forma de radiación electromagnética. Esta pérdida de energía es sin embargo despreciable excepto a energías relativistas. Las partículas cargadas atrapadas en el campo magnético terrestre, en las manchas solares o en cuerpos celestes distantes tal como la nebulosa del Cangrejo, también emiten radiación llamada *radiación sincrotrónica*. Esta radiación se extiende desde las radiofrecuencias hasta el ultravioleta lejano.

Si la partícula se frena en vez de acelerarse, vale aún la ec. (1.3) y la energía radiada es el exceso que tiene el campo electromagnético como resultado de la disminución de la velocidad de la carga. Por ejemplo, cuando una carga rápida, tal como un electrón o un protón, incide en un blanco y se detiene, una parte sustancial de su energía se transforma en radiación (fig. 1-3). Esta radiación se denomina radiación de frenado, o más comúnmente *bremsstrahlung* [del alemán *Bremmung* (frenado) y *Strahlung* (radiación)]. Este es el principal mecanismo de producción de radiación en los tubos de rayos X que se usan en las aplicaciones físicas, médicas e industriales.

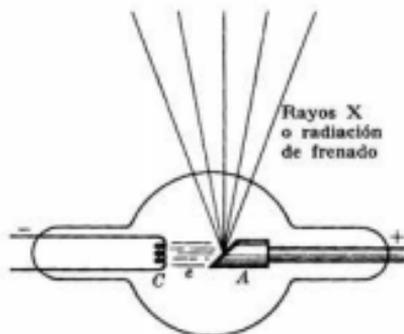


Fig. 1-3. Radiación emitida por una carga que se frena al incidir sobre el blanco en un tubo de rayos X.

La energía radiada por una partícula cargada puede ser absorbida por otras partículas cargadas que están sujetas a la acción del campo electromagnético producido por la primera partícula. Podemos describir entonces la interacción de dos partículas cargadas como el intercambio de energía por medio de la emisión y la absorción de radiación. Por ejemplo, los electrones oscilantes de la antena de una radioemisora irradian energía; los electrones de la antena de un radiorreceptor absorben parte de esta energía dando lugar a una señal en la estación receptora.

El análisis de los procesos de emisión y de absorción de la radiación (es decir, de la interacción de la radiación y la materia) es fundamental para comprender el comportamiento de la materia. Como veremos en las secciones siguientes, la física cuántica apareció como resultado del análisis de tales procesos.

EJEMPLO 1.1. Rapidez con que un dipolo eléctrico oscilante irradia energía.

Solución: Consideremos una carga q moviéndose a lo largo del eje Z de modo tal que en todo instante su posición está dada por $z = z_0 \cos \omega t$. Esto corresponde a un

movimiento oscilatorio de amplitud z_0 y frecuencia angular ω . La carga es entonces equivalente a un dipolo eléctrico oscilante. La aceleración de la partícula es $a = -\omega^2 z$. Sustituyendo este valor de a en la ec. (1.3), tenemos

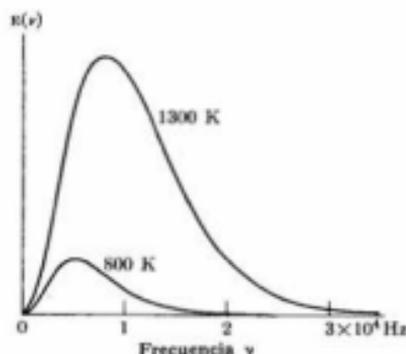
$$\frac{dE}{dt} = \frac{q^2 z_0^4 \omega^4}{6\pi \epsilon_0 c^3}. \quad (1.4)$$

La rapidez de radiación de energía oscila debido a la variación de z en el tiempo. Para obtener la rapidez promedio de radiación de energía, recordemos que $\bar{z^2} = \frac{1}{2} z_0^2$. Por lo tanto

$$\left(\frac{dE}{dt}\right) = \frac{q^2 z_0^4 \omega^4}{12\pi \epsilon_0 c^3}. \quad (1.5)$$

Podemos decir que un dipolo eléctrico oscilante irradia energía con una rapidez promedio dada por la ec. (1.5) y que la radiación corresponde a un campo electromagnético que oscila con la misma frecuencia que el dipolo.

Fig. 1-4. Densidad de energía monocromática de la radiación de cuerpo negro en función de la frecuencia para diversas temperaturas.



1.3 Radiación de cuerpo negro

Consideremos una cavidad cuyas paredes están a cierta temperatura. Los átomos que componen las paredes están emitiendo radiación electromagnética y al mismo tiempo absorben la radiación emitida por otros átomos de las paredes. El campo de radiación electromagnética ocupa toda la cavidad. Cuando la radiación encerrada dentro de la cavidad alcanza el equilibrio con los átomos de las paredes, la cantidad de energía que emiten los átomos en la unidad de tiempo es igual a la que absorben. En consecuencia, cuando la radiación dentro de la cavidad está en equilibrio con las paredes, la densidad de energía del campo electromagnético es constante. Los experimentos han mostrado que en el equilibrio, la radiación electromagnética encerrada tiene una distribución de energía bien definida; es decir: a cada frecuencia corresponde una densidad de energía que depende solamente de la temperatura de las paredes y es independiente de su material. La densidad de energía correspondiente a la radiación con frecuencia entre ν y $\nu + d\nu$ se escribe $\epsilon(\nu) d\nu$, donde $\epsilon(\nu)$ es la densidad de energía por intervalo unitario de frecuencias, denominado a veces *densidad de energía monocromática*.

En la fig. 1-4 se ilustra la variación observada de $\epsilon(\nu)$ con la frecuencia ν para dos temperaturas. Lummer y Pringsheim fueron los primeros en obtener experimentalmente curvas como éstas en 1899. Se puede ver en las curvas que para cada temperatura la densidad de energía presenta a cierta frecuencia un máximo pronunciado. Obsérvese también que la frecuencia para la cual la densidad de energía es máxima aumenta al aumentar la temperatura. Esto explica el cambio de color de un cuerpo radiante a medida que su temperatura varía.

Si se abre un pequeño agujero en una de las paredes de la cavidad, parte de la radiación escapa y se puede analizar. El agujero se ve muy brillante cuando el cuerpo está a temperatura alta y la intensidad de la radiación de equilibrio dentro de la cavidad es alta, pero se ve completamente negro a temperaturas bajas cuando la intensidad de la radiación de equilibrio es despreciable en la región visible del espectro. Es por esa razón que los que analizaron en el siglo XIX la radiación que sale de la cavidad la llamaron *radiación de cuerpo negro*.

El problema de encontrar qué mecanismo hace que los átomos radiantes produzcan la distribución de energía de la radiación de cuerpo negro dio lugar a la física cuántica. Hacia fines del siglo pasado todas las tentativas de explicar esta distribución de energía, usando los conceptos conocidos entonces, habían fracasado completamente. El físico alemán Max Planck (1858-1947) sugirió alrededor de 1900 que si la radiación dentro de la cavidad está en equilibrio con los átomos de las paredes, debía haber una correspondencia entre la distribución de energía de la radiación y las energías de los átomos en la cavidad. Planck supuso, como modelo para los átomos radiantes, que los mismos se comportan como osciladores armónicos y que cada uno oscila con una frecuencia dada ν . Planck sugirió como segunda hipótesis que

cada oscilador puede absorber o emitir energía de radiación en una cantidad proporcional a su frecuencia ν .

Esta última condición no se exige en la teoría clásica del electromagnetismo (expresada por las ecuaciones de Maxwell), la cual permite una emisión o una absorción continua de energía. Si E es la energía absorbida o emitida en un solo proceso de interacción de un oscilador con la radiación electromagnética, la hipótesis de Planck establece que

$$E = h\nu, \quad (1.6)$$

donde h es una constante de proporcionalidad que se supone sea la misma para todos los osciladores. Por lo tanto, cuando un oscilador absorbe o emite radiación electromagnética, su energía aumenta o disminuye en una cantidad $h\nu$. La ec. (1.6) implica que

la energía de los osciladores atómicos está cuantizada.

Esto significa que la energía de un oscilador de frecuencia ν sólo puede tener ciertos valores que son (suponiendo que la energía mínima del oscilador es cero) $0, h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \dots$. De modo que, en general, los posibles valores de la energía

de un oscilador de frecuencia ν son

$$E_n = nh\nu, \quad (1.7)$$

donde n es un entero no negativo. Como sabemos, la energía de un oscilador es proporcional al cuadrado de su amplitud y, *a priori*, podemos hacer que un oscilador de frecuencia dada tenga una energía elegida arbitrariamente ajustando la amplitud de las oscilaciones en forma apropiada. Por consiguiente, la idea de Planck fue una suposición *ad hoc* que no se podía explicar usando conceptos clásicos; estaba justificada solamente porque "funcionaba" y porque los físicos de la época no tenían explicación mejor. Aún no tenemos una explicación mejor; debemos aceptar la cuantización de algunas magnitudes físicas como un hecho fundamental de la naturaleza.

Aplicando algunas consideraciones de naturaleza estadística juntamente con la ec. (1.6), Planck obtuvo para la densidad de energía en la radiación de cuerpo negro, la expresión

$$\epsilon(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}, \quad (1.8)$$

donde k es la constante de Boltzmann. Esta expresión, que concuerda sorprendentemente bien con los valores experimentales de $\epsilon(\nu)$ a muy diversas temperaturas, ha sido aceptada como la expresión correcta para la radiación de cuerpo negro. Se denomina *ley de radiación de Planck*.

Un aspecto interesante es que actualmente la deducción de Planck no se puede considerar físicamente correcta, razón por la cual la hemos omitido. En otras palabras, el problema que precipitó el nacimiento de la teoría cuántica fue resuelto originalmente usando un método no satisfactorio. El problema tuvo que esperar varios años hasta que la teoría cuántica se desarrolló según otros lineamientos permitiendo encontrar un método adecuado de cálculo. En la sección 13.6 se dará la deducción revisada. Sin embargo, las ideas de Planck, particularmente las ecs. (1.6) y (1.7) estimularon nuevas líneas de pensamiento en muchos otros físicos que trabajaban en la interpretación de otros fenómenos relacionados; esto dio lugar a un rápido desarrollo de la teoría cuántica.

En la ec. (1.6) introdujimos una constante arbitraria h , llamada *constante de Planck*. Su valor, obtenido ajustando los valores experimentales de $\epsilon(\nu)$ con la ec. (1.8), es

$$h = 6,6256 \times 10^{-34} \text{ J s.} \quad (1.9)$$

La constante de Planck es una de las más importantes de la física.

EJEMPLO 1.2. Expresar la densidad de energía monocromática de la radiación de cuerpo negro en función de la longitud de onda.

Solución: En algunas ocasiones es preferible expresar la densidad de energía monocromática en función de la longitud de onda en vez de la frecuencia. Definimos $\epsilon(\lambda)$ conforme a la relación $\epsilon(\lambda) d\lambda = -\epsilon(\nu) d\nu$. El signo menos se debe a que $d\lambda$

y dv tienen signos opuestos mientras que $\varepsilon(\lambda)$ y $\varepsilon(\nu)$ son positivas. Como $\nu = c/\lambda$, tenemos

$$dv/d\lambda = -c/\lambda^2$$

y

$$\varepsilon(\lambda) = -\varepsilon(\nu) dv/d\lambda = \varepsilon(\nu)c/\lambda^2.$$

Reemplazando $\varepsilon(\nu)$ por el valor dado en la ec. (1.8) y poniendo $\nu = c/\lambda$, obtenemos finalmente

$$\varepsilon(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}. \quad (1.10)$$

En la fig. 1-5 se muestra el gráfico de $\varepsilon(\lambda)$ para diversas temperaturas. Presenta un pico pronunciado para una longitud de onda que depende de la temperatura.

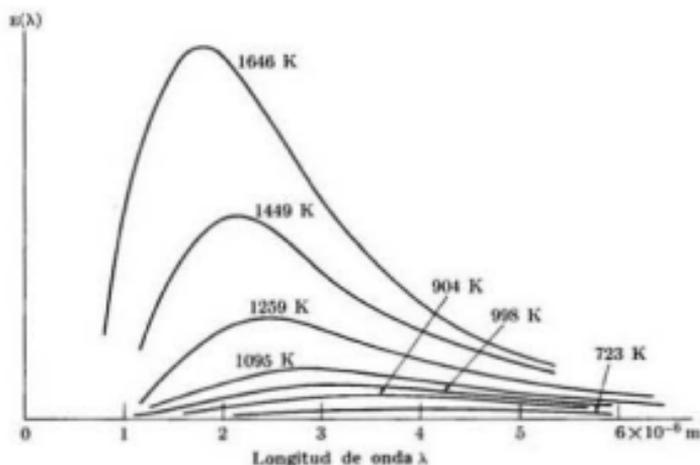


Fig. 1-5. Densidad de energía monocromática de la radiación de cuerpo negro en función de la longitud de onda para diversas temperaturas.

EJEMPLO 1.3. Encontrar la longitud de onda para la cual la densidad de energía monocromática de la radiación de cuerpo negro es máxima a una temperatura dada.

Solución: Usemos la ec. (1.10) y, para simplificar nuestra exposición, pongamos $x = hc/\lambda kT$; la expresión de $\varepsilon(\lambda)$ se convierte entonces en

$$\varepsilon(\lambda) = \frac{8\pi k^3 T^3}{c^4 h^4} \frac{x^5}{e^x - 1}.$$

Para encontrar el máximo de $\varepsilon(\lambda)$ calculamos $d\varepsilon/dx$ y la igualamos a cero. La ecuación resultante es

$$e^{-x} + \frac{5}{3}x - 1 = 0.$$

Esta es una ecuación trascendente que resolvemos por aproximaciones sucesivas obteniendo $x = 4,9651$. Por lo tanto: $\lambda T = b$, donde

$$b = hc/4,9651k = 2,8978 \times 10^{-3} \text{ m K}$$

se denomina *constante de desplazamiento de Wien*. La expresión

$$\lambda T = b \quad (1.11)$$

constituye la *ley de desplazamiento de Wien*, descubierta en 1896 por Wilhelm Wien. Esta ley establece que los máximos de $\epsilon(\lambda)$ a diferentes temperaturas T_1, T_2, T_3, \dots ocurren para las longitudes de onda $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots$ tales que

$$\lambda_1 T_1 = \lambda_2 T_2 = \lambda_3 T_3 = \dots$$

Observemos que a medida que la temperatura del cuerpo aumenta, el máximo de su distribución de energía se desplaza hacia longitudes de onda más cortas, lo cual origina un cambio de color en el cuerpo. La ley de desplazamiento de Wien es por lo tanto muy útil para determinar la temperatura de cuerpos calientes, como hornos o estrellas, hallando la longitud de onda para la cual la intensidad de la radiación es máxima.

La ley de Wien también proporciona un método para determinar h en función del valor experimental de b y de su definición en función de h, c y k dada anteriormente. La compatibilidad de los resultados con otras determinaciones de h es otra prueba de la corrección de la ley de distribución de Planck.

EJEMPLO 1.4. Obtener la densidad total de energía de la radiación de cuerpo negro en función de la temperatura.

Solución: Como $\epsilon(\nu) d\nu$ es la densidad de energía en el intervalo $d\nu$ de la radiación de cuerpo negro, la densidad total de energía es

$$\epsilon = \int_0^{\infty} \epsilon(\nu) d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^{\infty} \frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

Es evidente que ϵ es igual al área bajo la curva $\epsilon(\nu)$ de la fig. 1-4. Introduciendo la variable $x = h\nu/kT$, tenemos $d\nu = (kT/h) dx$ y

$$\epsilon = \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

El valor de esta integral es 6,4938, por lo que

$$\epsilon = aT^4, \quad (1.12)$$

donde

$$a = 51,9504\pi k^4/c^3 h^3 = 7,5643 \times 10^{-16} \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-4}.$$

La ec. (1.12) se conoce con el nombre de *ley de Stefan-Boltzmann* y fue descubierta empíricamente en 1879 por Josef Stefan y demostrada teóricamente por Ludwig Boltzmann algunos años más tarde usando métodos termodinámicos. Un cálculo que omitiremos muestra que la energía emitida por un cuerpo negro por unidad de área y por unidad de tiempo, llamada su *emitividad de radiación*, está dada por $\nu = \sigma T^4$, donde $\sigma = \frac{1}{4}ca = 5,6693 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ se denomina *constante de Stefan-Boltzmann*.

La proporcionalidad de ϵ o ν a T^4 ha sido verificada experimentalmente. Usando los valores medidos de a o de σ podemos recalculer h obteniendo nuevamente el mismo valor. Podemos usar la ley de Stefan-Boltzmann para determinar la temperatura de un cuerpo negro midiendo su emitividad de radiación.

Se debe notar que la mayoría de los cuerpos radiantes — como el sol, un filamento incandescente o un gas caliente — no se comportan como cuerpos negros y por lo tanto no siguen rigurosamente las relaciones obtenidas en esta sección.

1.4 Emisión fotoeléctrica

En 1887, investigando la descarga eléctrica entre dos electrodos usada como fuente de ondas electromagnéticas, Heinrich Hertz observó que la intensidad de la descarga aumentaba cuando se iluminaba los electrodos con luz ultravioleta. Este efecto sugirió que las superficies iluminadas emitían más electrones. Un año más tarde, Wilhelm Hallwachs observó emisión electrónica cuando iluminaba las superficies de ciertos metales como el zinc, el rubidio, el potasio y el sodio. El proceso por el cual se liberan electrones de un material por la acción de la radiación se denomina *emisión fotoeléctrica* o *efecto fotoeléctrico*. Los electrones emitidos se denominan *fotocorrientes* debido al método de producción. La emisión electrónica aumenta cuando aumenta la intensidad de la radiación que incide sobre la superficie del metal, ya que hay más energía disponible para liberar electrones; pero también se observa que depende en forma característica de la frecuencia

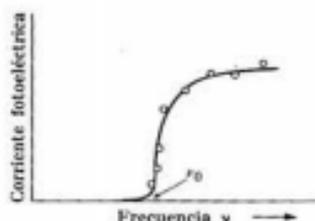


Fig. 1-6. Corriente fotoeléctrica en función de la frecuencia de la radiación incidente.

de la radiación incidente. Esto significa que para cada sustancia hay una frecuencia mínima o umbral de frecuencia ν_0 de la radiación electromagnética por debajo de la cual no se producen fotoelectrones por más intensa que sea la radiación. La fig. 1-6 muestra la corriente fotoeléctrica en función de la frecuencia de la radiación electromagnética incidente.

En los metales hay electrones que se mueven más o menos libremente a través de la red cristalina. Estos electrones no escapan del metal a temperaturas normales porque no tienen energía suficiente para sobrepasar la energía potencial coulombiana en la superficie del metal. Una manera de aumentar la energía de los electrones es calentar el metal. Los electrones "evaporados" se denominan entonces *termoelectrones*. Este es el tipo de emisión electrónica que hay en las válvulas electrónicas. Sin embargo, como muestran los experimentos de Hertz y de Hallwachs, otra manera de liberar electrones de un metal es posibilitar que los mismos absorban energía de la radiación electromagnética. Llamemos ϕ a la energía necesaria para que un electrón escape de un metal dado. Luego, si el electrón absorbe una energía E , la diferencia $E - \phi$ aparecerá como energía

cinética E_k del electrón que escapa. Podemos escribir entonces

$$E_k = E - \phi. \quad (1.13)$$

Es evidente que si E es menor que ϕ no habrá emisión electrónica.

En 1905 Einstein propuso una explicación para la forma en que la emisión fotoeléctrica depende de la frecuencia de la radiación. Einstein sugirió que los electrones libres, en su interacción con la radiación electromagnética, se comportan en la forma propuesta por Planck para los osciladores atómicos en relación con la radiación de cuerpo negro. Luego, según la ec. (1.6), la energía E que en un solo proceso un electrón absorbe de una radiación electromagnética de frecuencia ν es $E = h\nu$. Por lo tanto podemos escribir la ec. (1-13) en la forma

$$E_k = h\nu - \phi. \quad (1.14)$$

No todos los electrones necesitan la misma energía ϕ para escapar del metal. Llamamos *energía de arranque* del metal al valor mínimo ϕ_0 de la energía. Luego, la máxima energía cinética de los electrones que escapan es

$$E_{k,max} = h\nu - \phi_0. \quad (1.15)$$

Según esta ecuación vemos que para una frecuencia ν_0 tal que

$$h\nu_0 - \phi_0 = 0 \quad \text{ó} \quad \nu_0 = \phi_0/h,$$

la energía cinética máxima de los electrones es cero. Por lo tanto, ν_0 es la frecuencia mínima o umbral de frecuencia para el cual comienza la emisión fotoeléctrica. Para frecuencias menores que ν_0 , de modo que $h\nu < \phi_0$, no hay emisión porque los electrones no pueden absorber en un solo proceso energía suficiente para escapar del metal, independientemente de la intensidad de la radiación. Se ve entonces que la propuesta de Einstein explica elegantemente la dependencia de la frecuencia de la radiación observada en el efecto fotoeléctrico.

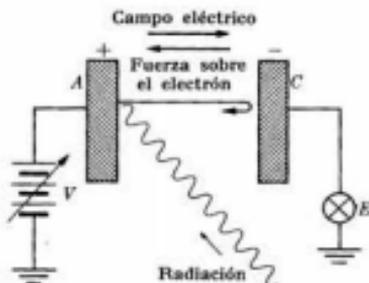


Fig. 1-7. Arreglo experimental para observar el efecto fotoeléctrico.

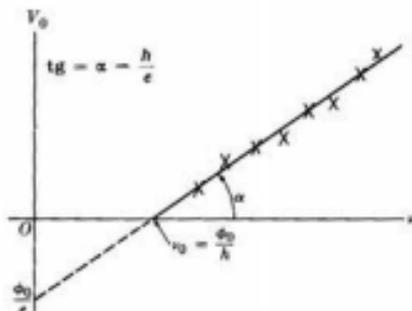


Fig. 1-8. Relación entre el potencial de detención y la frecuencia de radiación en el efecto fotoeléctrico.

Podemos medir la energía cinética máxima $E_{k,\max}$ usando el método indicado en la fig. 1-7. Aplicando una diferencia de potencial V entre las placas A y C , se retarda el movimiento de los fotoelectrones. Para un voltaje V_0 determinado, la corriente indicada por el electrómetro E cae súbitamente a cero, lo cual significa que ni aún los electrones más rápidos llegan a la placa C . Luego, $E_{k,\max} = eV_0$ y la ec. (1.15) se convierte en

$$eV_0 = h\nu - \phi_0 \quad (1.16)$$

Variando la frecuencia ν podemos obtener una serie de valores del potencial de detención V_0 . Si la ec. (1.16) es correcta, el gráfico de los valores de V_0 en función de ν debe ser una línea recta. Esto es exactamente lo que se obtiene, como se muestra en la fig. 1-8. La pendiente de la recta es $\text{tg } \alpha = h/e$. Midiendo α y usando el valor conocido de e podemos recalculer la constante h de Planck. El resultado es igual al hallado para la radiación de cuerpo negro. Se puede considerar este acuerdo como una justificación más de la hipótesis de Planck expresada por la ec. (1.6).

Del valor observado de ν_0 también se puede obtener la energía de arranque del metal, $\phi_0 = h\nu_0$ y compararla con los valores obtenidos por otros medios. Los resultados son compatibles.

1.5 Dispersión de la radiación por electrones libres

Hasta ahora, sólo hemos considerado la energía asociada con la radiación electromagnética. Sin embargo, una onda electromagnética también lleva *momentum* además de energía. (Esto no es sorprendente, ya que la energía y el momentum están estrechamente relacionados.) Teniendo en cuenta que la radiación electromagnética se propaga con velocidad c , podemos demostrar, usando las ecuaciones de Maxwell, que la relación entre energía y momentum para una onda electromagnética plana es

$$E = cp. \quad (1.17)$$

Pero según la teoría de la relatividad (ver la ec. A.11), la energía de una partícula de masa en reposo m_0 y momentum p es

$$E = c \sqrt{m_0^2 c^2 + p^2}. \quad (1.18)$$

Esta expresión coincide con la ec. (1.17) cuando $m_0 = 0$. Podemos entonces concluir que la relación entre energía y momentum es la misma para una onda electromagnética plana y para una partícula de masa en reposo nula.

Cuando se emite, absorbe o dispersa una onda electromagnética, se intercambia energía y momentum con las partículas que dan lugar al proceso. En consecuencia, cuando analicemos cualquier proceso en que la radiación electromagnética interactúa con partículas cargadas debemos aplicar las leyes de conservación de la energía y del momentum, cuidando de tener en cuenta la ec. (1.17) para la parte correspondiente a la onda electromagnética.

Este resultado origina ciertos problemas cuando consideramos la interacción de una onda electromagnética con una partícula cargada libre, tal como un electrón libre. Por ejemplo, si un electrón absorbe una energía E de una onda electromagnética, también debe absorber un momentum $p = E/c$. Ahora bien, si suponemos que el electrón libre estaba originalmente en reposo en el sistema de referencia del observador, la energía absorbida se transforma en energía cinética del electrón. Pero la energía cinética de un electrón está relacionada con su momentum p_e mediante

$$E_k = c \sqrt{m_e^2 c^2 + p_e^2} - m_e c^2,$$

y esta relación es incompatible con $p_e = E/c$ y $E_k = E$, como exigen los principios de conservación de la energía y del momentum. Podríamos concluir entonces que un electrón libre no puede interactuar con una onda electromagnética sin violar los principios de conservación de la energía y del momentum. El estudiante puede preguntarse entonces por qué, al estudiar el efecto fotoeléctrico en la sección precedente, no mencionamos este problema. La razón es que, en el caso de un electrón ligado a un átomo, a una molécula o a un sólido, la energía y el momentum absorbidos están compartidos por el electrón y el átomo, la molécula o la red del sólido a la cual el electrón está acoplado. En esas circunstancias siempre es posible separar la energía y el momentum en la proporción correcta para que ambas cantidades se conserven. Sin embargo, el átomo, la molécula o el sólido — que tienen masa mucho mayor que la del electrón — se llevan junto con algo de momentum sólo una pequeña parte de la energía disponible, tan pequeña que generalmente no se la considera. En el caso de un electrón libre, como no hay otra partícula con la cual pueda compartir la energía y el momentum, no sería posible absorción o dispersión sin violar la conservación de una de las dos cantidades.

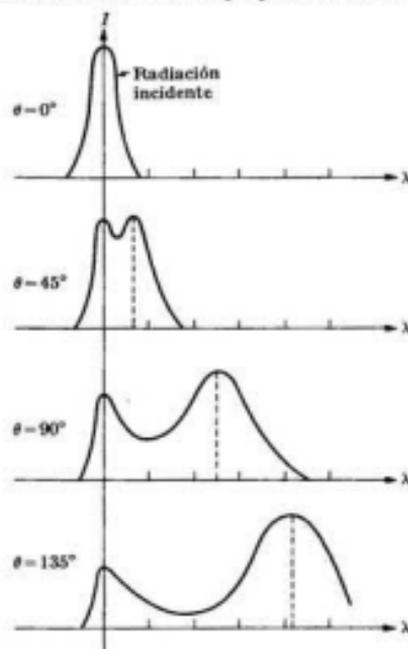


Fig. 1-9. Distribución de intensidad de la radiación dispersada por un electrón libre para diferentes ángulos de dispersión.

Los experimentos nos dicen, sin embargo, otra cosa. Cuando analizamos la radiación electromagnética que ha pasado por una región en la que hay electrones libres, observamos que, además de la radiación incidente, hay otra de frecuencia diferente. Esta nueva radiación se interpreta como la dispersada por los electrones libres. La frecuencia de la radiación dispersada es menor que la de la incidente y en consecuencia la longitud de onda de la radiación dispersada es mayor que la de la radiación incidente. La longitud de onda de la radiación

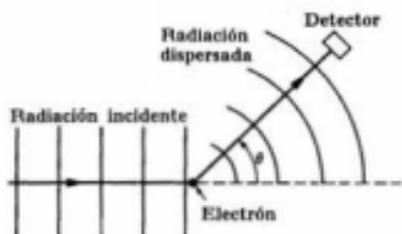


Fig. 1-10. Geometría de la dispersión Compton.

dispersada depende de la dirección de dispersión (fig. 1-9). Este fenómeno interesante se denomina *efecto Compton* en homenaje al físico norteamericano A. H. Compton, quien fue el primero en observarlo y analizarlo en los primeros años de la década del 20.

Sea λ la longitud de onda de la radiación incidente y λ' la de la dispersada; Compton encontró que $\lambda' - \lambda$ está determinada solamente por la dirección de dispersión. Es decir, si θ es el ángulo entre la dirección de las ondas incidentes

y la dirección en que se observa las ondas dispersadas, la longitud de onda λ' de la radiación dispersada queda determinada por la relación experimental

$$\lambda' - \lambda = \lambda_C(1 - \cos \theta), \quad (1.19)$$

donde λ_C es una constante cuyo valor es

$$\lambda_C = 2,4262 \times 10^{-12} \text{ m.}$$

Se denomina *longitud de onda Compton para electrones*. Recordando que $\lambda = c/\nu$, donde ν es la frecuencia de la onda, podemos escribir la ec. (1.19) en la forma

$$\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} = \frac{\lambda_C}{c} (1 - \cos \theta). \quad (1.20)$$

Ahora bien, la dispersión de una onda electromagnética por un electrón se puede imaginar como un "choque" entre la onda y el electrón, puesto que implica un intercambio de energía y de momentum. Además, como la onda se propaga con velocidad c y la relación $E = cp$ entre energía y momentum es similar a la correspondiente a una partícula de masa en reposo nula, esta dispersión se debe parecer a un choque en el que una de las partículas tiene masa en reposo nula y se mueve con velocidad c .

Esta colisión se puede analizar en forma muy simple. Llamemos E y E' a la energía de la partícula de masa en reposo nula antes y después del choque y $p = E/c$ y $p' = E'/c$ a los valores correspondientes del momentum. Si p_e es el momentum del electrón después del choque, los principios de conservación de la

energía y del momentum dan

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{p}_e, \quad (1.21)$$

$$E + m_e c^2 = E' + c \sqrt{m_e^2 c^2 + p_e^2}. \quad (1.22)$$

De la ec. (1.21) obtenemos $\mathbf{p}_e = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$. Elevando al cuadrado se tiene

$$p_e^2 = p^2 + p'^2 - 2\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' = \frac{1}{c^2} (E^2 + E'^2 - 2EE' \cos \theta),$$

donde θ es el ángulo en que se ha desviado o dispersado la partícula de masa en reposo nula. Despejando p_e^2 de la ec. (1.22) obtenemos

$$\begin{aligned} p_e^2 &= \frac{(E + m_e c^2 - E')^2}{c^2} - m_e^2 c^2 \\ &= \frac{1}{c^2} [E^2 + E'^2 + 2(E - E')m_e c^2 - 2EE']. \end{aligned}$$

Igualando las dos expresiones de p_e^2 y cancelando algunos términos comunes, obtenemos

$$E - E' = \frac{EE'}{m_e c^2} (1 - \cos \theta).$$

Dividiendo ambos miembros por EE' resulta

$$\frac{1}{E'} - \frac{1}{E} = \frac{1}{m_e c^2} (1 - \cos \theta). \quad (1.23)$$

La similitud entre las ecs. (1.20) y (1.23) es sorprendente; va más allá de una mera similitud algebraica. Ambas ecuaciones se aplican a un proceso de choque en su sentido más general. Además, como lo mencionamos anteriormente, la relación energía-momentum $E = cp$ para una onda electromagnética es similar a la correspondiente a una partícula de masa en reposo nula, a la cual se aplica la ec. (1.23). La conclusión evidente es ligar la frecuencia ν y la energía E escribiendo

$$E = h\nu, \quad (1.24)$$

y una expresión similar para E' , es decir, $E' = h\nu'$. En estas expresiones, h es una constante universal que describe la proporcionalidad entre la frecuencia de una onda electromagnética y la energía asociada con ella en el proceso de "choque". La ec. (1.23) se escribe entonces

$$\frac{1}{h\nu'} - \frac{1}{h\nu} = \frac{1}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)$$

o sea

$$\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} = \frac{h}{m_e c^2} (1 - \cos \theta), \quad (1.25)$$

que es formalmente idéntica a la ec. (1.20). Para obtener la equivalente de la ec. (1.19), multiplicamos la ec. (1.25) por c y usamos $\lambda = c/\nu$. El resultado es

$$\lambda' = \lambda = (h/m_e c)(1 - \cos \theta). \quad (1.26)$$

Por lo tanto, la longitud de onda Compton λ_C del electrón está relacionada con la masa del mismo por

$$\lambda_C = h/m_e c. \quad (1.27)$$

De los valores conocidos de λ_C , m_e y c podemos calcular el valor de la constante h , obteniendo el mismo valor encontrado antes para la constante de Planck en la radiación de cuerpo negro y en el efecto fotoeléctrico. Por lo tanto, la ec. (1.24) es esencialmente idéntica a la ec. (1.6).

Llegamos entonces a la conclusión de que podemos "explicar" la dispersión de la radiación electromagnética por un electrón libre si identificamos el proceso como una colisión entre un electrón libre y una partícula de masa en reposo nula que tiene una energía $E = h\nu$ antes de la colisión y una energía $E' = h\nu'$ después de la colisión.

1.6 Fotones

Nuestra explicación del efecto Compton requiere un análisis cuidadoso a causa de las consecuencias de largo alcance que puede tener. Recapitulemos primeramente nuestras suposiciones:

(a) la dispersión de la radiación electromagnética por un electrón libre se puede considerar como un choque entre el electrón y una partícula de masa en reposo nula;

(b) la radiación electromagnética hace las veces de una partícula de masa en reposo nula, que para abreviar llamaremos *fotón*;

(c) la energía y el momentum de la partícula de masa en reposo nula (o fotón) están relacionados con la frecuencia y la longitud de onda de la radiación electromagnética por

$$E = h\nu, \quad p = h/\lambda. \quad (1.28)$$

La segunda relación se debe al hecho de que $p = E/c$ y $\nu/c = 1/\lambda$. Podemos imaginar el efecto Compton como la colisión ilustrada en la fig. 1-11. En ella un fotón de frecuencia ν choca con un electrón en reposo, transfiriéndole cierta energía y cierto momentum. Como resultado de la interacción, la energía del fotón dispersado es menor, teniendo correspondientemente una frecuencia menor ν' . Después de la dispersión, el electrón tiene un momentum igual a la diferencia entre el momentum del fotón incidente y el del dispersado. Podemos verificar experimentalmente este hecho. Es un experimento difícil, pero ha sido llevado a cabo y los resultados concuerdan muy bien con la teoría.

¿Cuál es el significado físico del concepto de fotón y de las relaciones (1.28) que lo definen? No es una conclusión necesaria el que la radiación electromagnética sea un chorro de fotones, lo cual sería una explicación pictórica posible. Podemos interpretar la energía del fotón incidente $E = h\nu$ y su momentum $p = h/\lambda$ como la energía y el momentum absorbidos por el electrón libre de la onda electromagnética incidente. La energía $E' = h\nu'$ y el momentum $p' = h/\lambda'$ del fotón dispersado son entonces la energía y el momentum que el electrón vuelve a emitir como radiación dispersada. En otras palabras, podemos considerar que el efecto Compton ocurre en dos etapas: primero el electrón absorbe un fotón de energía $h\nu$ y luego emite un fotón de energía $h\nu'$. El electrón adquiere una energía cinética $E_k = E - E'$ y un momentum $p_e = p - p'$, que están relacionados por

$$E_k = c \sqrt{m_e^2 c^2 + p_e^2} - m_e c^2,$$

como exige la conservación de la energía y del momentum.

Sobre la base de esta interpretación del efecto Compton, junto con nuestro estudio anterior de la radiación de cuerpo negro y del efecto fotoeléctrico, podemos concluir que el fotón es el "cuanto" de energía y momentum electromagnéticos que una partícula cargada emite o absorbe en un solo proceso. Está determinado completamente por la frecuencia de la radiación. Por consiguiente podemos establecer el siguiente principio:

Cuando una onda electromagnética interactúa con una partícula cargada, las cantidades de energía y de momentum que se intercambian en el proceso son las correspondientes a un fotón.

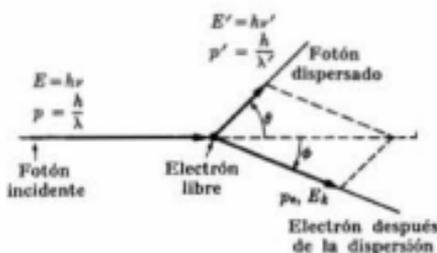


Fig. 1-11. Relaciones de energía y de momentum en la dispersión Compton.

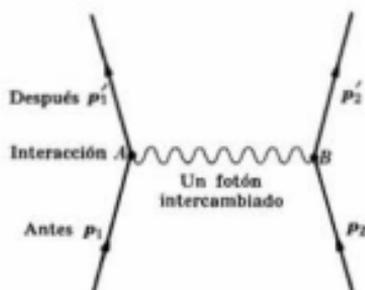


Fig. 1-12. La interacción electromagnética considerada como un intercambio de fotones. Los fotones transfieren energía y momentum de una carga a otra.

Este principio es una de las leyes fundamentales de la física. Se aplica a todos los procesos radiativos que involucran partículas cargadas y campos electromagnéticos. No se deduce de ninguna de las leyes que hemos establecido o estudiado previamente, sino que es un principio completamente nuevo a considerar

en pie de igualdad con otras leyes universales como la conservación de la energía y del momentum. El descubrimiento de esta ley en el primer cuarto de este siglo fue un hito en el desarrollo de la física.

El concepto de fotón sugiere una representación gráfica de la interacción electromagnética entre dos partículas cargadas, como se muestra en la fig. 1-12. La interacción corresponde a un intercambio de momentum y de energía; los momenta iniciales p_1 y p_2 de las partículas se convierten en p'_1 y p'_2 después de la interacción. Aunque la interacción no está localizada en un instante particular, la hemos indicado por simplicidad a un tiempo particular y en las posi-

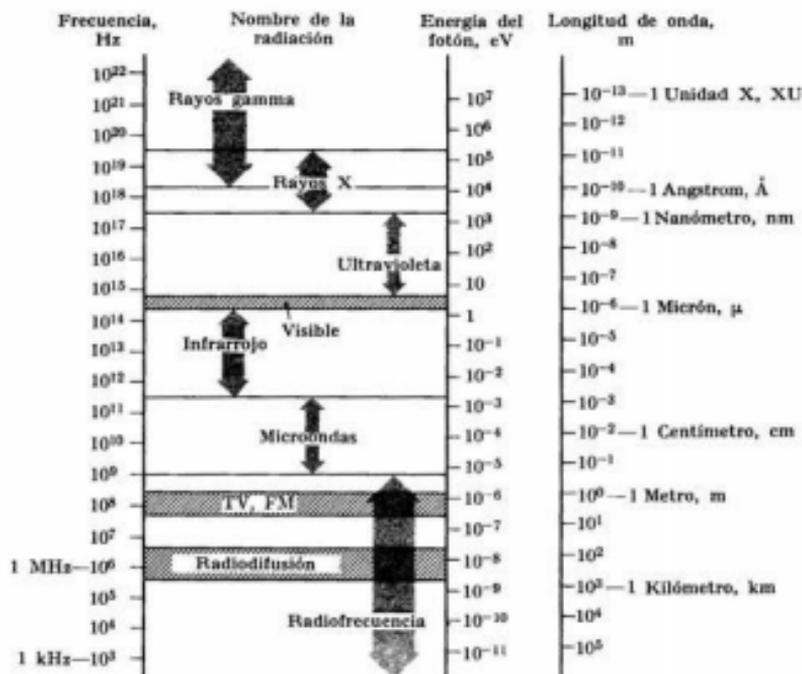


Fig. 1-13. El espectro electromagnético.

ciones *A* y *B*. La partícula 1 interactúa con la partícula 2 por medio de su campo electromagnético con el resultado de que la partícula 2 toma del campo cierta energía y cierto momentum, equivalente a un fotón, con el correspondiente cambio en su movimiento. El movimiento de la partícula 1 debe entonces ajustarse para corresponder al nuevo campo, que es el campo original menos un fotón. Por supuesto que el proceso inverso también es posible y la partícula 1 puede absorber un fotón del campo de la partícula 2. Podemos decir entonces que lo

que ha ocurrido es que ha habido un intercambio de fotones entre las partículas 1 y 2; en otras palabras,

se puede imaginar las interacciones electromagnéticas como el resultado de un intercambio de fotones entre las partículas cargadas interactuantes.

En cualquier instante el momentum total de un sistema de dos partículas cargadas es

$$P_1 + P_2 + P_{\text{campo}}$$

donde P_{campo} es el momentum asociado con el campo electromagnético de las partículas cargadas, siendo $E_1 + E_2 + E_{\text{campo}}$ la energía total.

La fig. 1-13 muestra las diversas regiones del espectro electromagnético, con el nombre que comúnmente se da a cada región. También se da la longitud de onda, la frecuencia y la energía de los fotones asociados con ellas.

EJEMPLO 1.5. Expresar la energía de un fotón en electronvolts en función de su longitud de onda dada en metros. Usar el resultado para obtener la longitud de onda de los rayos X en función del voltaje de aceleración aplicado a un tubo de rayos X.

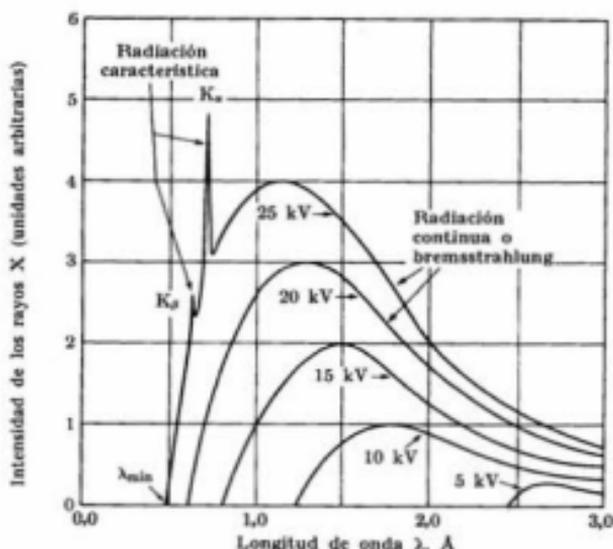


Fig. 1-14. Distribución de intensidad del espectro de rayos X del molibdeno en función del voltaje aplicado. El potencial de excitación de la serie K es 20,1 kV y aparece en forma de picos característicos sobre la curva de 25 kV.

Solución: De $E = h\nu$ y $\lambda\nu = c$ tenemos que $E = hc/\lambda$. Pero

$$hc = (6,6256 \times 10^{-34} \text{ J s}) (2,9979 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}) = 1,9863 \times 10^{-25} \text{ J m.}$$

Recordando que $1 \text{ eV} = 1,6021 \times 10^{-19} \text{ J}$, tenemos que $hc = 1,2397 \times 10^{-6} \text{ eV m}$. Por lo tanto

$$E = 1,2397 \times 10^{-6}/\lambda \approx 1,24 \times 10^{-6}/\lambda,$$

donde E se expresa en electrovolts y λ en metros.

Como explicamos en relación con la fig. 1-3, los rayos X se producen por el impacto de electrones rápidos con el material del ánodo de un tubo de rayos X. Un electrón puede radiar su energía como consecuencia de choques sucesivos dando lugar a varios fotones o puede radiarla como un solo fotón en una sola colisión. Evidentemente los fotones de mayor energía que emerjan del tubo de rayos X serán aquéllos emitidos en el último de los procesos nombrados, teniendo estos fotones la longitud de onda más corta. En otras palabras, si V es el voltaje de aceleración (en volts), que es numéricamente igual a la energía de los electrones (en eV), las longitudes de onda de los rayos X producidos son iguales o mayores que el umbral de longitud de onda que satisface la relación

$$\lambda_0 = \frac{1,24 \times 10^{-6}}{V} \text{ m.}$$

En un tubo de televisión, por ejemplo, los electrones se aceleran en una diferencia de potencial del orden de 18 000 V; cuando los electrones llegan a la pantalla del tubo, se detienen abruptamente emitiendo rayos X por la misma razón que en un tubo de rayos X (la intensidad es, sin embargo, muy baja). La mínima longitud de onda de los rayos X que se producen cuando los electrones se detienen en la pantalla es entonces $\lambda = 6,9 \times 10^{-11} \text{ m}$. La relación anterior ha sido confirmada experimentalmente. La fig. 1-14 muestra la intensidad de los rayos X de un tubo de rayos X en función de la longitud de onda de los fotones emitidos, para diferentes valores de V .

1.7 Estados estacionarios

Cuando una onda electromagnética interactúa con un sistema de cargas tal como un átomo, una molécula o un núcleo, los campos eléctrico y magnético de la onda perturban el movimiento de las cargas. En el lenguaje de la física clásica, podríamos decir que la onda imprime una oscilación forzada sobre el movimiento natural de las cargas. Un oscilador clásico responde más fácilmente cuando la frecuencia de las oscilaciones forzadas es igual a su frecuencia natural, situación que se denomina *resonancia*. Cuando hay resonancia, es máxima la rapidez con que el oscilador absorbe energía.

Se ha encontrado experimentalmente que los átomos, las moléculas, los núcleos — en general cualquier grupo de partículas cargadas — tiene una serie de frecuencias de resonancia $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \dots$ para las cuales es apreciable la absorción de radiación electromagnética. Para toda otra frecuencia la absorción es despreciable. Las frecuencias de resonancia $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \dots$ constituyen el *espectro de absorción* de la sustancia. Supongamos que inicialmente el sistema está en el estado más estable o de energía mínima, llamado *estado fundamental*. Cuando

el sistema absorbe radiación electromagnética, pasa a otro estado de energía más alta llamado *estado excitado*. En el caso de un dipolo eléctrico oscilante clásico, un estado excitado correspondería a una amplitud mayor de oscilación.

Evidentemente, un sistema de cargas en un estado excitado puede liberar su exceso de energía en forma de radiación electromagnética. Las frecuencias que se observan en la radiación emitida constituyen el *espectro de emisión* del sistema de cargas. Los experimentos han mostrado que

las frecuencias observadas en el espectro de absorción de un sistema de cargas se observan también en el espectro de emisión del sistema.

Por ejemplo, los átomos de sodio presentan absorción preferencial de luz de frecuencia igual a $5,09 \times 10^{14}$ Hz, o sea longitud de onda igual a $5,89 \times 10^{-7}$ m. Estos son precisamente los valores de la frecuencia y de la longitud de onda de la luz amarilla emitida por el vapor de sodio incandescente.

La existencia de un espectro compuesto de frecuencias bien definidas fue un problema que intrigó a los físicos al final del siglo pasado y principios del actual. Para resolver este problema, el físico danés Niels Bohr (1885-1962) propuso, en 1913, una idea revolucionaria. Bohr usó el concepto de fotón analizado en la sección precedente y extendió la hipótesis de Planck expresada por la ec. (1.6). Supongamos que un átomo que se encuentra en un estado de energía E absorbe radiación de frecuencia ν pasando así a otro estado de energía E' mayor. El cambio en la energía del átomo es $E' - E$. Por otra parte, la energía absorbida de la radiación en un solo proceso debe ser la de un fotón $h\nu$. La conservación de la energía exige que ambas cantidades sean iguales. En consecuencia

$$E' - E = h\nu, \quad (1.29)$$

que se denomina fórmula de Bohr. Análogamente, si el átomo pasa de un estado de energía E' a otro estado de energía E menor, la frecuencia de la radiación emitida debe estar dada por la ec. (1.29).

El hecho de que se observan solamente ciertas frecuencias $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \dots$ en la emisión y en la absorción, se puede explicar si suponemos que la energía del átomo sólo puede tener ciertos valores E_1, E_2, E_3, \dots . Cada valor permitido de energía se denomina *nivel de energía*. Luego, las únicas frecuencias posibles que aparecen en la emisión o en la absorción de la radiación son las correspondientes a transiciones entre dos niveles de energía permitidos, es decir $\nu = (E_i - E_j)/h$. La hipótesis de Bohr puede entonces enunciarse como sigue:

La energía de un sistema de cargas — un átomo, una molécula o un núcleo — sólo puede tener ciertos valores E_1, E_2, E_3, \dots ; esto es: la energía está cuantizada. Los estados correspondientes a estas energías se denominan estados estacionarios y los valores posibles de la energía se denominan niveles de energía.

La absorción de radiación electromagnética, o de cualquier otra energía, da lugar a una transición del átomo (o molécula o núcleo) de un estado estacionario

a otro de mayor energía; la emisión de radiación electromagnética da lugar al proceso inverso. La frecuencia de la radiación involucrada en el proceso está dada por la ec. (1.29). La fig. 1-15 muestra esquemáticamente algunas transiciones. Un proceso en el que un átomo en su estado fundamental, designado por A , absorbe un fotón y pasa a un estado excitado, designado por A^* , se representa por



El proceso inverso, emisión de un fotón, se puede expresar por



La idea de sistemas de cargas que tienen sólo un conjunto discreto de estados estacionarios es completamente extraña a la mecánica newtoniana. De acuerdo con las leyes de la mecánica newtoniana, el movimiento de una partícula está

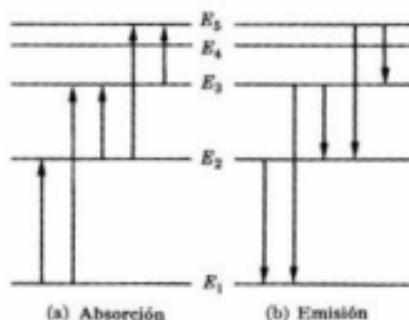


Fig. 1-15. Transiciones entre estados estacionarios. El espaciamiento de los niveles de energía y las transiciones posibles dependen de la naturaleza del sistema.

determinado por las condiciones iniciales de la partícula, que se consideran arbitrarias. De este modo, una partícula puede tener cualquier energía, determinada por las condiciones iniciales (posición y velocidad) arbitrariamente elegidas. Esto se aplica, por ejemplo, cuando se coloca un satélite artificial en una órbita estable. Un astronauta puede cambiar arbitrariamente la órbita, y por lo tanto la energía, de su nave espacial cambiando simplemente la velocidad en un instante determinado. Del mismo modo, la mecánica newtoniana permite que el electrón de un átomo de hidrógeno tenga cualquier energía, dependiendo esto de las condiciones cinemáticas existentes cuando el protón captura el electrón para formar el átomo, y el electrón podría cambiar su órbita absorbiendo una cantidad arbitraria de energía. Sin embargo, la naturaleza parece trabajar en forma diferente: sólo ciertos movimientos están permitidos, o son posibles. En otras palabras: se debe aceptar la existencia de estados estacionarios como un hecho fundamental de la naturaleza.

La aceptación de esta idea de estados estacionarios presenta otra dificultad dentro del marco de la física clásica. Cuando un electrón gira alrededor del núcleo de un átomo, su movimiento tiene aceleración tangencial y centrípeta, es un

movimiento acelerado. Podríamos pensar entonces que el electrón estaría radiando energía constantemente. En consecuencia, la energía del electrón estaría decreciendo continuamente y su órbita se estaría encogiendo. Esto imposibilitaría la existencia de estados estacionarios. Sin embargo, no se ha observado ni esta contracción de la materia ni la radiación continua de energía con ella asociada. Por lo tanto, como no se siguen las predicciones de la electrodinámica clásica, podemos concluir que un electrón (o una partícula cargada) que se mueve en un estado estacionario está gobernado por principios adicionales que aún no hemos considerado. En el capítulo 2 exploraremos estos nuevos principios.

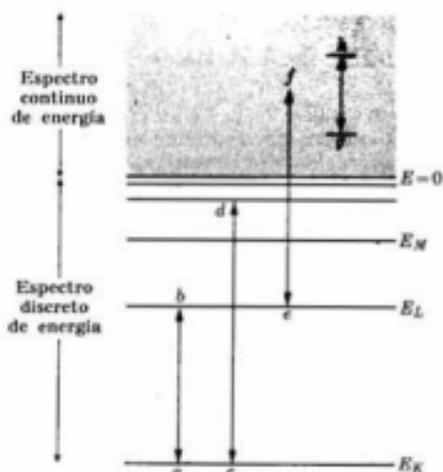


Fig. 1-16. Origen del espectro discreto y continuo de energía debido a estados estacionarios discretos.

La hipótesis de Bohr sobre los estados estacionarios fue una hipótesis *ad hoc*, sin justificación teórica sólida. Sin embargo, su éxito estimuló a otros físicos a realizar experimentos para poner a prueba la idea. Rápidamente se acumuló una gran cantidad de información que dio lugar al descubrimiento de nuevas e insospechadas propiedades atómicas. Es ésta una situación que se ha presentado varias veces en la física contemporánea. Un físico de gran intuición y osadía propone un concepto nuevo y atrevido; la idea provoca nuevas especulaciones y experimentos y pronto se abren horizontes nuevos e insospechados.

Los estados estacionarios no constituyen necesariamente un espectro discreto de energía. En muchos casos están permitidos todos los valores de energía en un cierto intervalo (o banda) resultando un espectro continuo. Consideremos por ejemplo, el caso de un electrón y un protón y tomemos el cero de la energía cuando ambos están en reposo a una distancia muy grande uno de otro. Todos los estados estacionarios de energía negativa, que corresponden a estados ligados en los que el electrón se mueve alrededor del protón formando un átomo de hidrógeno, están cuantizados y la energía de estos estados sólo puede tener ciertos valores E_K, E_L, E_M, \dots (fig. 1-16). Por el contrario, los estados de energía posi-

tiva no están cuantizados y su energía puede tener cualquier valor. Estos estados no son ligados y corresponden a la situación en que el electrón se lanza sobre el protón desde una gran distancia y con cierta energía cinética inicial; al pasar cerca del protón, el electrón se desvía de la dirección original de su movimiento y se aleja hacia el infinito sin formar un sistema ligado. En este caso, la energía del sistema está determinada por la energía cinética inicial del electrón, que se puede elegir en forma arbitraria.

Puede haber transiciones entre dos estados del espectro discreto de energía, tales como la *ab* y la *cd* (fig. 1-16), o entre un estado del espectro discreto y uno del espectro continuo, tal como *ef*, o entre dos estados del espectro continuo, como *gh*.

EJEMPLO 1.6. Conservación de la energía y del momentum en transiciones radiativas.

Solución: A primera vista, la ec. (1.29) es correcta en lo que respecta a la conservación de la energía. Sin embargo, un examen más detallado indica que necesita una ligera modificación. En la sección 1.6 hicimos notar que un fotón tiene un momentum $h/\lambda = h\nu/c$ además de la energía $h\nu$ y que tanto la energía como el momentum se deben conservar en transiciones radiativas de un estado a otro. Consideremos primero la emisión por un átomo en reposo. Inicialmente, antes de la transición, su momentum es nulo. Después de la transición un átomo debe retroceder con un momentum igual y opuesto al del fotón, es decir $0 = p_{\text{átomo}} + p_{\text{fotón}}$; en módulo

$$p_{\text{átomo}} = p_{\text{fotón}} = h\nu/c. \quad (1.30)$$

Consideremos ahora la conservación de la energía. Tenemos inicialmente un átomo en reposo en un estado estacionario de energía E_i y después de la transición un átomo en un estado estacionario de energía E_f con energía cinética $p_{\text{átomo}}^2/2M$ y un fotón de energía $h\nu$. La conservación de la energía exige en consecuencia que

$$E_i = E_f + \frac{p_{\text{átomo}}^2}{2M} + h\nu \quad (1.31)$$

o sea, utilizando la ec. (1.30),

$$E_i - E_f = h\nu \left(1 + \frac{h\nu}{2Mc^2} \right). \quad (1.32)$$

Cuando $h\nu$ es muy pequeña respecto a $2Mc^2$, el último término es despreciable y la ec. (1.32) se reduce a la ec. (1.29). Este es el caso de las transiciones atómicas y moleculares. En general, $h\nu$ es mucho menor que Mc^2 y podemos escribir la ec. (1.32) en la forma

$$h\nu = (E_i - E_f) \left(1 + \frac{h\nu}{2Mc^2} \right)^{-1} = (E_i - E_f) \left(1 - \frac{h\nu}{2Mc^2} \right),$$

donde hemos usado el desarrollo $(1+x)^{-1} = 1-x+\dots$, con $x = h\nu/2Mc^2$, que es una cantidad pequeña respecto a la unidad. En el último término podemos reemplazar $h\nu$ por $E_i - E_f$, resultando

$$h\nu = E_i - E_f - \frac{(E_i - E_f)^2}{2Mc^2}, \quad (1.33)$$

donde el último término es esencialmente la energía de retroceso del átomo. Por lo tanto, en el proceso de emisión la energía del fotón es ligeramente menor que la

diferencia entre los dos niveles de energía del emisor (átomo, molécula o núcleo). La diferencia es la energía de retroceso del emisor.

Por otro lado, para el proceso de absorción debemos modificar la ec. (1.31) escribiendo

$$E_i + h\nu = E_f + \frac{p_{\text{átomo}}^2}{2M}, \quad (1.34)$$

ya que ahora hay un fotón en el estado inicial y ninguno en el final. La conservación del momentum requiere que $p_{\text{átomo}} = p_{\text{fotón}}$ que es también equivalente a la ec. (1.30). Por lo tanto, usando las mismas aproximaciones que antes, la ec. (1.34) se transforma en

$$h\nu = (E_f - E_i) \left(1 - \frac{h\nu}{2Mc^2}\right)^{-1} = (E_f - E_i) \left(1 + \frac{h\nu}{2Mc^2}\right)$$

o sea

$$h\nu = E_f - E_i + \frac{(E_f - E_i)^2}{2Mc^2}. \quad (1.35)$$

En consecuencia, para que la absorción tenga lugar, la energía del fotón absorbido debe ser ligeramente mayor que la diferencia de energía entre los dos niveles del absorbente para compensar la energía cinética de retroceso del mismo.

Una consecuencia de este análisis es que un fotón emitido por un sistema (átomo, molécula o núcleo) en la transición $a \rightarrow b$ no puede ser absorbido por otro sistema idéntico para efectuar la transición inversa $b \rightarrow a$, por lo que el espectro de emisión no es idéntico al espectro de absorción. Volveremos nuevamente sobre este asunto en el ejemplo 1.10. Para las transiciones atómicas y las moleculares, en las cuales $E_f - E_i$ es del orden de unos pocos electronvolts y Mc^2 es del orden de 10^{11} eV, el término correctivo de las ecs. (1.33) y (1.35) es del orden de 10^{-10} eV siendo, por lo tanto, despreciable. Por otra parte, para las transiciones nucleares $E_f - E_i$ puede ser del orden de 10^6 eV. Como Mc^2 es del mismo orden que en las transiciones atómicas, el término correctivo es aproximadamente 10 eV, siendo relativamente más importante.

1.8 Evidencia experimental de los estados estacionarios

Hasta aquí hemos introducido la idea de estados estacionarios como un concepto conveniente para explicar el espectro discreto de los sistemas atómicos. Sin embargo, la existencia de transiciones entre estados estacionarios está profusamente corroborada por muchos experimentos. El más característico es el de colisiones inelásticas, en las que parte de la energía cinética del proyectil se transfiere al blanco como energía interna. Estas se denominan colisiones inelásticas de *primera especie*. Las colisiones inelásticas de *segunda especie* corresponden al proceso inverso.

Supongamos que una partícula rápida q choca con otro sistema A (que puede ser un átomo, una molécula o un núcleo) que se encuentra en su estado fundamental de energía E_1 . Como resultado de la interacción proyectil-sistema (que puede ser electromagnética o nuclear), hay un intercambio de energía. Sea E_2 la energía del primer estado excitado del sistema. La colisión será elástica (es decir que se conservará la energía cinética) a no ser que el proyectil tenga energía cinética suficiente para transferir al blanco la energía de excitación $E_2 - E_1$.

Cuando esto ocurre la colisión es inelástica y podemos representarla por



Cuando la masa del proyectil q es muy pequeña respecto a la del blanco A , como ocurre en el caso de un electrón que choca con un átomo, la condición para que haya colisión inelástica es (ver el ejemplo 1.7)

$$E_k \geq E_2 - E_1, \quad (1.36)$$

donde $E_k = \frac{1}{2}mv^2$ es la energía cinética del proyectil antes de la colisión. La energía cinética del proyectil después de la colisión es entonces $E'_k = E_k - (E_2 - E_1)$, ya que la energía que el proyectil pierde en la colisión es $E_2 - E_1$.

Para dar un ejemplo concreto, supongamos que un electrón de energía cinética E_k se mueve a través de una sustancia, digamos vapor de mercurio. Si E_k es menor que la primera energía de excitación del mercurio, $E_2 - E_1$, todas las colisiones son elásticas y el electrón se mueve a través del vapor perdiendo energía muy lentamente, ya que la máxima energía cinética perdida en cada colisión (ver el problema 1.55) es aproximadamente

$$\Delta E_k \approx -4(m_e/M)E_k \approx 5 \times 10^{-6}E_k.$$

Por el contrario, si E_k es mayor que $E_2 - E_1$, la colisión puede ser inelástica y el electrón puede perder la energía $E_2 - E_1$ en un solo choque. Si la energía cinética inicial del electrón no es mucho mayor que $E_2 - E_1$, la energía del electrón después de la colisión inelástica es insuficiente para excitar otros átomos; las siguientes colisiones del electrón serán elásticas. Pero si la energía cinética del electrón es inicialmente muy grande, el electrón puede experimentar otras colisiones inelásticas más, perdiendo una energía $E_2 - E_1$ en cada una y produciendo más átomos excitados antes de reducir su velocidad por debajo del umbral para colisiones inelásticas.

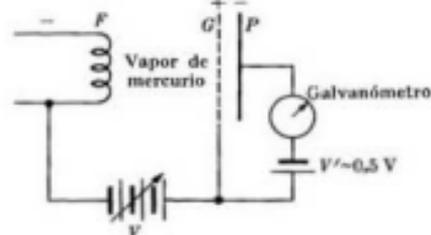


Fig. 1-17. Arreglo experimental de Franck y Hertz para analizar colisiones inelásticas de segunda especie.

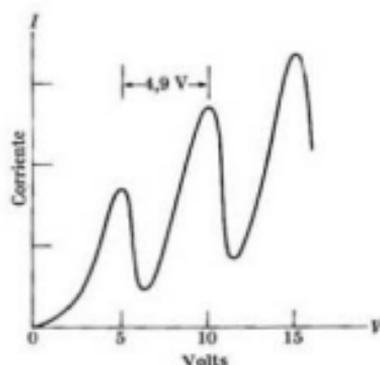


Fig. 1-18. La corriente electrónica en función del potencial acelerador en el experimento de Franck-Hertz.

Este proceso fue observado por primera vez en 1914 por Franck y Hertz. En la fig. 1-17 se indica esquemáticamente su arreglo experimental. Un filamento caliente F emite electrones que son acelerados hacia la rejilla G por medio de un potencial variable V . El espacio entre F y G está lleno de vapor de mercurio. Entre la rejilla G y la placa colectora P se aplica un pequeño potencial retardador V' , de 0,5 volt aproximadamente, de modo que los electrones, que quedan con muy poca energía cinética después de una o más colisiones inelásticas, no pueden alcanzar la placa y el galvanómetro no los registra. A medida que se aumenta V , la corriente de placa I fluctúa como se muestra en la fig. 1-18, apareciendo los picos a intervalos de alrededor de 4,9 volts. El primer valle corresponde a los electrones que pierden toda su energía cinética después de una colisión inelástica con un átomo de mercurio que queda entonces en un estado excitado. El segundo valle corresponde a los electrones que sufrieron dos colisiones inelásticas con dos átomos de mercurio, perdiendo toda su energía cinética, y así sucesivamente. Los átomos excitados de mercurio vuelven a su estado fundamental por emisión de un fotón, conforme a $\text{Hg}^* \rightarrow \text{Hg} + h\nu$ donde $h\nu = E_2 - E_1$. Sabemos por evidencia espectroscópica que el vapor de mercurio excitado emite radiación de longitud de onda $2,536 \times 10^{-7}$ m (ó 2,536 Å) y que corresponde a un fotón de energía $h\nu$ igual a 4,86 eV. Durante el pasaje del haz de electrones a través del vapor de mercurio se observa una radiación de esta longitud de onda viniendo del vapor. En consecuencia este experimento simple es una de las pruebas más directas de la existencia de estados estacionarios.

Otro experimento similar es la *excitación coulombiana* de núcleos. Por ejemplo, cuando un protón pasa cerca de un núcleo, la interacción eléctrica entre ambos puede dar lugar a una colisión inelástica, resultando la excitación del núcleo a uno de los estados excitados más bajos. El núcleo vuelve a su estado fundamental emitiendo fotones de rayos gamma que tienen energías del orden de varios keV. Es por esa razón que la excitación coulombiana es uno de los métodos experimentales más importantes para detectar y analizar los estados estacionarios bajos de los núcleos.

EJEMPLO 1.7. Cálculo del umbral de energía cinética necesaria para la excitación del blanco en una colisión inelástica de primera especie.

Solución: Designemos con m y M la masa del proyectil y la del blanco respectivamente. Suponemos que el blanco está inicialmente en reposo en el sistema de referencia del laboratorio o sistema L . Si \mathbf{p} es el momentum del proyectil antes de la colisión y \mathbf{p}' y \mathbf{P} los momenta del proyectil y del blanco después de la colisión, la conservación del momentum exige que

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{P}. \quad (1.37)$$

Análogamente, si E_1 es la energía del estado estacionario inicial del blanco y E_2 la del estado final, la conservación de la energía exige que

$$\frac{1}{2m} p^2 + E_1 = \frac{1}{2m} p'^2 + \frac{1}{2M} P^2 + E_2$$

o sea, poniendo $\Delta E = E_2 - E_1$,

$$\frac{1}{2m} p^2 = \frac{1}{2m} p'^2 + \frac{1}{2M} P^2 + \Delta E. \quad (1.38)$$

La mínima energía cinética del proyectil necesaria para el proceso es aquella en que tanto el proyectil como el blanco están en reposo en el sistema de referencia del centro de masa, o sistema C , después de la colisión de modo que toda la energía en el sistema C se utiliza en la excitación del blanco. En este caso, después de la colisión, el blanco y el proyectil se mueven en el sistema L con la misma velocidad v_{CM} del centro de masa del sistema. Por lo tanto $p' = mv_{CM}$ y $P = Mv_{CM}$. Pero si v es la velocidad del proyectil antes de la colisión, tenemos que

$$v_{CM} = \frac{mv}{m+M}.$$

Por consiguiente

$$p' = \frac{m^2v}{m+M} = \frac{mp}{m+M}, \quad P = \frac{mMv}{m+M} = \frac{Mp}{m+M},$$

que por supuesto son ecuaciones compatibles con la ec. (1.37). Sustituyendo estos valores en la ec. (1.38), obtenemos después de una simplificación directa

$$\frac{M}{m+M} \left(\frac{1}{2m} p^2 \right) = \Delta E$$

o sea

$$E_k = \frac{1}{2m} p^2 = \left(1 + \frac{m}{M} \right) \Delta E. \quad (1.39)$$

Esta ecuación da el umbral de energía cinética que debe tener el proyectil para llevar el blanco a su primer nivel excitado. Si el proyectil es mucho más liviano que el blanco, $m \ll M$, tenemos que $E_k \approx E = E_2 - E_1$. Esta es la condición para que haya colisión inelástica de un electrón con un átomo o molécula; la utilizamos en nuestro análisis del experimento de Franck-Hertz. Sin embargo, cuando los núcleos experimentan excitación coulombiana a causa de sus colisiones inelásticas con protones, debemos usar la ec. (1.39). La razón es que en general, especialmente en colisiones con núcleo livianos, m/M puede no ser pequeña respecto a la unidad.

1.9 Interacción de la radiación con la materia

La interacción de la radiación con la materia es uno de los procesos fundamentales responsables de muchos fenómenos que ocurren en el universo. Por ejemplo, la tierra está sujeta a un flujo continuo de radiación electromagnética proveniente del sol, que hace posible la vida a través del proceso de *fotosíntesis* (esto es, la formación de nuevos compuestos, principalmente carbohidratos, por síntesis del dióxido de carbono y el agua como resultado de la absorción de fotones; un compuesto llamado clorofila juega un papel importante en la reacción). El proceso se puede escribir en la forma



El número n de fotones no es fijo; la energía de los mismos corresponde principalmente a la región visible del espectro. El proceso es mucho más complicado que lo que la ecuación anterior pueda sugerir y aún se está realizando investigación activa sobre el mismo. La fotosíntesis es importante no sólo porque produce carbohidratos, que son la fuente última de alimento (y por lo tanto de

energía) para la mayoría de los organismos vivientes, sino también porque controla la cantidad de oxígeno que hay en la atmósfera liberando oxígeno que, por otra parte, se consume rápidamente en los muchos procesos de oxidación que ocurren en la tierra.

La fotosíntesis es sólo un ejemplo de muchas reacciones iniciadas por la absorción de radiación. El estudio de esas reacciones se denomina *fotoquímica*. Cada reacción fotoquímica requiere la intervención de fotones de una cierta energía. Otro ejemplo de procesos debidos a la absorción de radiación es la disociación de una molécula por absorción de un fotón, esto es,



Una reacción de este tipo, de gran importancia geofísica y biológica, es la disociación del oxígeno en la atmósfera por absorción de radiación ultravioleta de longitud de onda en el intervalo de 1600 Å a 2400 Å (o sea fotones con una energía entre 7,8 eV y 5,2 eV). Podemos expresar este proceso mediante la ecuación



El oxígeno atómico producido se combina con el oxígeno molecular para formar el ozono, O_3 , que a su vez se disocia fotoquímicamente por absorción de radiación ultravioleta de longitud de onda entre 2400 Å y 3600 Å (o sea fotones de energía entre 5,2 eV y 3,4 eV). La reacción es



Estas dos reacciones absorben radiación ultravioleta tan fuertemente que suprimen prácticamente toda la radiación ultravioleta que viene del sol antes de que alcance la superficie terrestre. Si esta radiación ultravioleta pudiese llegar a la superficie terrestre, destruiría muchos organismos por reacciones fotoquímicas con componentes de las células, enzimas, etc.

El proceso fotográfico es otro ejemplo de una reacción fotoquímica. Bajo la acción de la radiación, las moléculas de bromuro de plata se descomponen, formando los átomos de plata lo que se llama una imagen latente en una película sensibilizada. Más tarde, en el proceso de revelado, la película se trata de modo tal que se forme una imagen permanente.

Cuando el fotón tiene energía suficiente, su absorción por parte de un átomo o una molécula puede dar lugar a la emisión de un electrón. Lo que queda es un átomo o molécula ionizado. Podemos escribir este proceso en la forma



Este proceso, llamado *fotoionización*, es el equivalente del efecto fotoeléctrico en metales estudiado en la sección 1.3; es por esa razón que también se le llama *efecto fotoeléctrico atómico*. Como resultado de la fotoionización, cuando un haz de radiación ultravioleta, X o γ pasa a través de la materia, produce ionización a lo largo de su camino. Llamemos I a la energía necesaria para extraer un electrón de un átomo o de una molécula; la misma se denomina *energía de ionización*.

La energía cinética del electrón está dada entonces por

$$E_k = h\nu - I, \quad (1.40)$$

que es una ecuación análoga a la ec. (1.14). (En esta ecuación hemos despreciado la energía de retroceso del ion). La ec. (1.40) muestra que para que se produzca fotoionización, la energía del fotón debe ser igual o mayor que I . El valor de I depende del estado estacionario inicialmente ocupado por los electrones desalojados. Por ejemplo, si se quiere desalojar un electrón del estado fundamental de un átomo de hidrógeno, la energía mínima del fotón debe ser 13,6 eV. Pero si el electrón está en el primer estado excitado se necesita sólo 3,4 eV. Para los átomos de helio la energía de ionización necesaria para sacar un electrón del estado fundamental es 24,6 eV.

En la región de la alta atmósfera llamada *ionosfera*, la gran concentración de iones y de electrones libres (alrededor de 10^{23} por m^3) se debe principalmente al efecto fotoeléctrico sobre átomos y moléculas producido por la radiación ultravioleta y X proveniente del sol. Algunas de las reacciones que ocurren más frecuentemente son



Se indica entre paréntesis las energías de ionización. Como resultado de estas ionizaciones, muchas otras reacciones secundarias tienen lugar en la atmósfera.

La *captura radiativa* es un proceso inverso a la fotoionización. En la captura radiativa un ion captura un electrón libre de energía cinética E_k formando un estado ligado y emitiendo un fotón, es decir,



La energía del fotón es

$$h\nu = E_k + I. \quad (1.41)$$

Cuando la energía del fotón es mucho mayor que la energía de unión de un electrón en un átomo o molécula, se puede considerar que el electrón es libre. En este caso, la dispersión Compton (sección 1.5) es un proceso más probable que el efecto fotoeléctrico. Si la energía del fotón es mayor que $2m_0c^2$ ($= 1,02$ MeV, que es el doble de la energía en reposo del electrón), puede ocurrir otro proceso: la creación de un par electrón-positrón. (El positrón es una partícula que tiene la misma masa que el electrón, pero carga positiva.) La creación de un par electrón-positrón, llamada *producción de pares*, se puede escribir en la forma

$$h\nu \rightarrow e^+ + e^-. \quad (1.42)$$

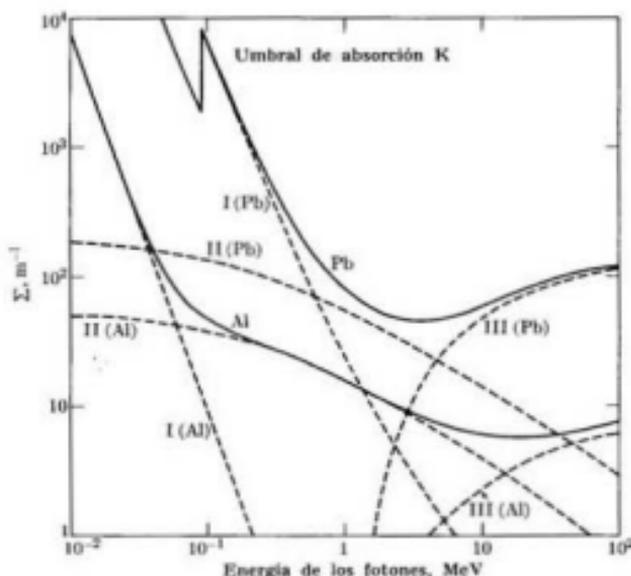


Fig. 1-19. Secciones eficaces macroscópicas para la absorción de fotones en aluminio y en plomo. Las curvas continuas son las secciones eficaces totales. Las señaladas con I son las secciones eficaces parciales debidas al efecto fotoeléctrico; las señaladas con II son las secciones eficaces parciales debidas al efecto Compton; las señaladas con III son las secciones eficaces parciales debidas a la producción de pares.

En la sección 9.3 se estudiará este proceso en detalle. Por ahora, digamos solamente que consiste en la transformación de un fotón en un electrón más un positrón. Como la energía asociada con la masa en reposo de un electrón o de un positrón es m_0c^2 , la energía mínima del fotón necesaria para producir un par electrón-positrón es $2m_0c^2$.

A energías altas, la radiación electromagnética también puede interactuar con los núcleos atómicos llevándolos a un estado excitado o desalojando una partícula nuclear (tal como un protón) en lo que se llama una *reacción fotonuclear*, o aún partir el núcleo. En el capítulo 8 se estudiarán estos procesos nucleares.

Cuando un haz de radiación pasa a través de la materia, su energía es absorbida gradualmente por los diversos procesos que hemos mencionado. Así, si I_0 es la intensidad de la radiación antes de entrar en la sustancia, su intensidad después de atravesar un espesor x de la sustancia está dada por

$$I = I_0 e^{-\Sigma x}, \quad (1.43)$$

donde Σ (expresada en m^{-1} si x se expresa en metros) es una cantidad característica de cada sustancia y de cada proceso; se denomina *coeficiente de absorción*

lineal o sección eficaz macroscópica. Es función de la energía de los fotones [ver el ejemplo 8.8 para la obtención de la ec. (1.43)].

En cada sustancia hay una sección eficaz macroscópica para cada proceso posible, tal como el efecto fotoeléctrico, la dispersión Compton, la producción de pares, etc. La sección eficaz total de una sustancia es la suma de todas las secciones eficaces parciales. La fig. 1-19 muestra las secciones eficaces macroscópicas individuales y total del aluminio y del plomo para los tres procesos mencionados. Obsérvese que a bajas energías el efecto fotoeléctrico es el más importante, a energías medias domina el efecto Compton y a energías altas la producción de pares es el proceso más importante.

1.10 *Partículas y campos*

Al final del primer cuarto de este siglo tuvo lugar otra revolución importante en los conceptos físicos que cambió fundamentalmente el modo de describir el movimiento de una partícula.

Nuestra experiencia sensorial nos dice que los objetos que tocamos y vemos tienen un tamaño y una forma bien definidos y que, por lo tanto, están localizados en el espacio. Tendemos entonces a extrapolar y pensamos que las partículas fundamentales (electrones, protones, neutrones, etc.) tienen forma y tamaño, tendiendo a imaginarlas como algo así como esferillas, con un radio característico además de su masa y su carga. Esta es, sin embargo, una extrapolación más allá de nuestra experiencia sensorial directa y debemos analizarla cuidadosamente antes de aceptarla.

Los experimentos han mostrado que esa imagen, sensorial y extrapolada, de los constituyentes básicos de la materia es errónea. El comportamiento dinámico de las partículas elementales exige que con cada partícula asociemos un campo — *campo de materia* — del mismo modo que, a la inversa, asociamos un fotón (que es equivalente a una partícula) con un campo electromagnético. Este campo de materia describe el estado dinámico de una partícula en el mismo sentido en que el campo electromagnético corresponde a fotones que tienen momentum y energía precisos. Para estudiar la conexión entre el campo de materia y las propiedades dinámicas de la partícula (es decir, su momentum y su energía), podemos guiarnos por las relaciones encontradas previamente para el fotón. Escribiendo las relaciones (1.28) a la inversa, podemos suponer que la longitud de onda λ y la frecuencia ν del campo monocromático asociado con una partícula de momentum p y energía E están dadas por

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad \nu = \frac{E}{h}, \quad (1.44)$$

donde, como antes, h es la constante de Planck. El físico francés Louis de Broglie (1892-) propuso estas relaciones por primera vez en 1924, y es por esta razón que $\lambda = h/p$ se denomina a veces *longitud de onda de de Broglie* de una partícula. Introduciendo el número de onda $k = 2\pi/\lambda$ y la frecuencia angular

$\omega = 2\pi\nu$, podemos escribir las relaciones (1.44) en la forma más simétrica

$$p = \frac{h}{2\pi} k, \quad E = \frac{h}{2\pi} \omega,$$

o, definiendo una nueva constante designada con \hbar y denominada *h cruzada*

$$\hbar = h/2\pi = 1,0544 \times 10^{-34} \text{ J s},$$

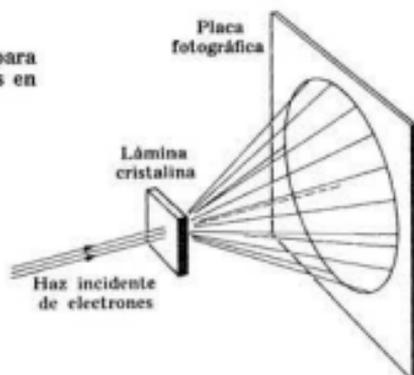
tenemos

$$p = \hbar k, \quad E = \hbar \omega. \quad (1.45)$$

Si nuestra suposición, expresada por las ecs. (1.44) o (1.45), es correcta, podemos esperar que cuando se perturba el movimiento de la partícula de tal modo que el campo asociado a ella no se puede propagar libremente, se deben observar fenómenos de interferencia y de difracción como en el caso de ondas elásticas y electromagnéticas. Esto es lo que ocurre realmente.

Antes de discutir los experimentos que revelan interferencia y difracción del campo de materia, tratemos de estimar el valor de la longitud de onda de de Bro-

Fig. 1-20. Arreglo experimental para observar la difracción de electrones en un material cristalino.



glie λ asociada con una partícula. Los electrones acelerados por un potencial eléctrico V ganan una energía eV ; su energía cinética es entonces $p^2/2m_e = eV$ por lo que $p = \sqrt{2m_e eV}$. Introduciendo los valores de e , m_e y h , obtenemos para la longitud de onda de de Broglie de esos electrones

$$\lambda = h/\sqrt{2m_e eV} = 1,23 \times 10^{-9}/\sqrt{V} \text{ m}, \quad (1.46)$$

donde V se expresa en volts. También se puede usar esta fórmula cuando la energía cinética del electrón se expresa en electronvolts. Para $V \sim 10^4$ V (que es del orden de los voltajes usados en los tubos de TV), la longitud de onda es aproximadamente 10^{-11} m, comparable a la longitud de onda de los rayos X. Esto significa que si lanzamos un haz de electrones rápidos a través de un cristal, debe-

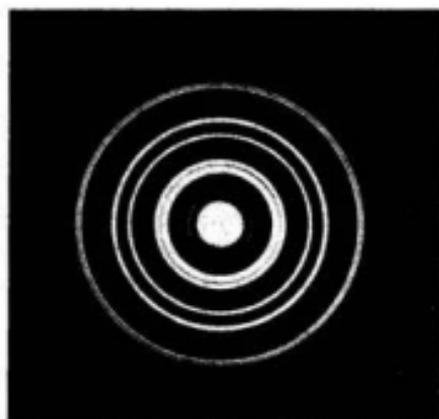


Fig. 1-21. Difracción de electrones en polvo cristalino (cortesía del Dr. Lester Germer).

mos obtener patrones de difracción que resultan de la dispersión del campo de materia. Estos diagramas de difracción correspondientes a electrones deben ser similares a los observados para rayos X.

En 1927, el científico británico G. P. Thomson (1892-) comenzó una serie de experimentos cuya finalidad era estudiar el pasaje de un haz de electrones a través de una fina lámina de material cristalino. Después que los electrones pasaban a través de la lámina, incidían sobre una placa fotográfica, como se muestra en la fig. 1-20. Si los electrones se hubieran comportado como partículas en el sentido macroscópico, se hubiera observado una imagen borrosa porque en general cada electrón habría experimentado una dispersión diferente por los átomos del cristal. Sin embargo, el resultado obtenido fue idéntico a los diagramas de Debye-Scherrer correspondientes a la difracción de rayos X por sustancias policristalinas, como se muestra en la fotografía de la fig. 1-21. Análogamente,



Fig. 1-22. Difracción de electrones de 80 kV en un monocristal de carbono (grafito) (cortesía de R. Heidenreich, Bell Telephone Laboratories).

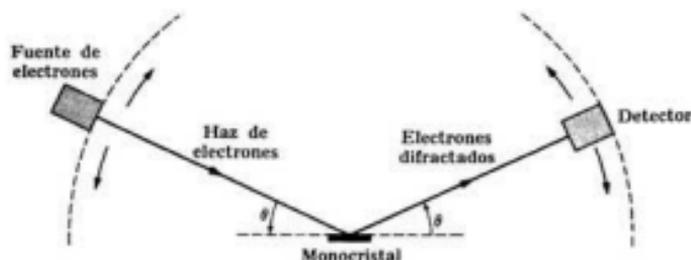


Fig. 1-23. Dispositivo de Davisson y Germer para observar dispersión electrónica de Bragg.

cuando un haz electrónico pasa a través de un monocristal, se obtienen los diagramas de manchas de Laue (también observados con rayos X) como se ve en la fotografía de la fig. 1-22. A partir de la estructura de estos diagramas se puede calcular la longitud de onda de de Broglie λ si se conoce el espaciamiento de los planos cristalinos y se aplican las fórmulas que se han deducido para rayos X. Se puede comparar los valores resultantes de λ con los obtenidos de la ec. (1.46). El resultado está en completo acuerdo dentro de los límites de error experimental.

En los celebrados experimentos de C. Davisson y L. Germer (realizados aproximadamente al mismo tiempo que los de Thomson), se envió un haz de electrones oblicuamente sobre la cara de un cristal. Se observaron los electrones difractados por medio de un detector colocado simétricamente, como se indica en la fig. 1-23. Esta disposición es similar a la de Bragg para observar la difrac-

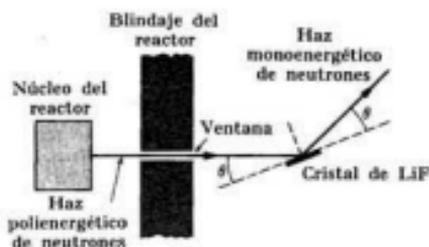


Fig. 1-24. Espectrómetro a cristal de neutrones.

ción de rayos X. Se encontró que la corriente de electrones registrada por el detector era máxima cada vez que se cumplía la condición de Bragg, deducida para rayos X. La condición de Bragg se expresa por*

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (1.47)$$

donde d es la separación de capas atómicas sucesivas en el cristal y λ está dada por la ec. (1.46).

* Ver, por ejemplo, el segundo volumen de esta serie, *Física: Campos y ondas*, sección 23.8.

También en experimentos con protones y neutrones se ha observado el mismo fenómeno de difracción de Bragg. La difracción de neutrones es particularmente útil, porque es uno de los medios más poderosos para estudiar la estructura cristalina. Los experimentadores usan haces monoenergéticos de neutrones y analizan su pasaje a través del cristal. Los neutrones que emergen de un reactor nuclear por una ventana (ver fig. 1-24) tienen un espectro de energía muy ancho (en otras palabras: tienen unos valores muy variados del momentum) o, lo que es equivalente, el haz de neutrones no es monocromático; contiene más bien un espectro compuesto de muchas longitudes de onda de de Broglie. Cuando el haz de neutrones proveniente del reactor incide sobre un cristal, LiF por ejemplo, los neutrones que se observan en la dirección simétrica corresponden sólo a la longitud de onda λ dada por la condición de Bragg (1.47). En consecuencia, tienen una energía y un momentum bien definidos. El cristal actúa entonces como *filtro de energía* o *monocromador*. A su vez, el haz monoenergético de neutrones se usa para estudiar otros materiales por difracción o para analizar reacciones nucleares que involucran neutrones de energía determinada.

EJEMPLO 1.8. ¿Cuál es la longitud de onda de de Broglie de neutrones térmicos a la temperatura de 25° C?

Solución: Por *neutrones térmicos* entendemos neutrones que están en equilibrio térmico con la materia a una temperatura dada. Los neutrones tienen entonces una energía cinética media igual a la de las moléculas de un gas ideal a la misma temperatura. Por lo tanto, la energía cinética media de los neutrones térmicos es $\bar{E} = \frac{1}{2}kT$, donde T es la temperatura absoluta y k es la constante de Boltzmann (ver ec. 10.41). Si la temperatura es 25° C, tenemos que $T = 298$ K, por consiguiente $\bar{E} = \frac{1}{2}kT = 6,17 \times 10^{-21}$ J = $3,85 \times 10^{-8}$ eV. El momentum correspondiente es $p = \sqrt{2m_n\bar{E}} = 4,55 \times 10^{-28}$ m Kg s⁻¹. Luego, usando la ec. (1.44), encontramos que en promedio la longitud de onda de de Broglie de neutrones térmicos es $\lambda = \frac{h}{p} = 1,85 \times 10^{-11}$ m. (De paso, teniendo en cuenta que la separación de los planos en un cristal de NaCl es $d = 2,82 \times 10^{-10}$ m, vemos que el primer máximo de difracción para neutrones de esta longitud de onda aparece a un ángulo $\theta = 19^\circ$.)

EJEMPLO 1.9. Se deja en libertad un electrón a una distancia muy grande de un protón. Hallar la longitud de onda del electrón cuando está (a) a 1 m del protón, (b) a $0,5 \times 10^{-10}$ m del protón (esta distancia es del orden de magnitud del radio de la órbita de un electrón en el estado fundamental de un átomo de hidrógeno).

Solución: El potencial a través del cual se ha movido el electrón cuando está a una distancia r del protón es

$$V = e/4\pi\epsilon_0 r = 1,44 \times 10^{-9}/r \text{ V,}$$

donde r está en metros. Sustituyendo este valor en la ec. (1.46) encontramos que la longitud de onda del electrón es

$$\lambda = 3,24 \times 10^{-9} \sqrt{r} \text{ m.}$$

Deducimos de este resultado que la longitud de onda disminuye a medida que el electrón se acerca al protón. La razón de esto es que el electrón se acelera hacia el protón y su momentum aumenta a medida que la distancia disminuye. Cuando el electrón está a 1 m del protón la longitud de onda es $3,24 \times 10^{-9}$ m. Cuando el electrón está a $0,5 \times 10^{-10}$ m del protón la longitud de onda es $2,27 \times 10^{-10}$ m.

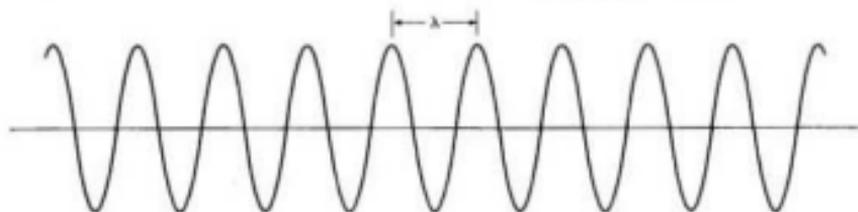


Fig. 1-25. Tren de ondas continuo correspondiente a una partícula no localizada.

Esta longitud de onda es del orden de magnitud de las dimensiones del átomo de hidrógeno. Sin embargo, para acomodar a un electrón en una órbita estable alrededor del protón en un átomo de hidrógeno, es necesario ajustar su longitud de onda a un valor apropiado (que es aproximadamente $3,14 \times 10^{-10}$ m). Esto exige, como se verá más adelante, que el electrón pierda cierta cantidad de energía que se emite como radiación.

1.11 Partículas y paquetes de ondas

Empleando las relaciones (1.44) podemos representar el campo correspondiente a una partícula libre que se mueve con un momentum p y una energía $E = p^2/2m$ definidos por medio de una onda armónica de amplitud constante, como se muestra en la fig. 1-25. La simetría exige que la amplitud de la onda sea la misma en todo el espacio, ya que no hay fuerzas actuando sobre la partícula que puedan distorsionar el campo de materia asociado en una región del espacio más que en otras. La velocidad de fase del campo de la partícula libre es

$$v_p = \lambda v = \frac{h}{p} \frac{E}{h} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{1}{2}v.$$

Esto es, la velocidad de fase del campo de materia es la mitad de la velocidad de la partícula. Esto no tiene, sin embargo, consecuencias experimentales, ya que no podemos medir directamente la velocidad de fase de una onda armónica pura. Sólo podemos medir la velocidad de grupo de las ondas. (Ver apéndice III.) El hecho de que la amplitud del campo de materia es la misma en todo el espacio sugiere que el campo de materia de una partícula libre no da información acerca de la localización en el espacio de una partícula libre de momentum bien definido. En otras palabras: el campo de materia es independiente de la posición de la partícula y una observación del campo por medio de algún método no revelaría la posición de la partícula.

Por intuición física y por el conocimiento de campos y ondas, sabemos que una partícula localizada dentro de una cierta región Δx del espacio debe corresponder a un campo de materia cuya amplitud o intensidad es grande en esa región y muy pequeña fuera de ella. Se puede aumentar un campo en cierta región y atenuarlo fuera de ella mediante el proceso de interferencia, superponiendo ondas de frecuencias y longitudes de onda diferentes. El resultado es un *paquete*

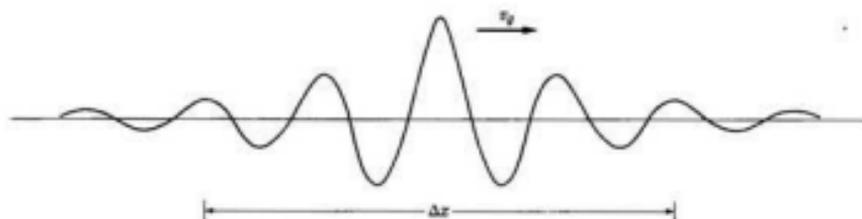


Fig. 1-26. Paquete de ondas correspondiente a una partícula localizada dentro del intervalo Δx .

de ondas, como el que se muestra en la fig. 1-26. La velocidad con que se propaga el paquete de ondas es la velocidad de grupo v_g dada por $v_g = d\omega/dk$ (ver ec. A.29). Utilizando las relaciones (1.45) y $E = p^2/2m$, podemos reescribir la velocidad de grupo del campo de materia correspondiente a una partícula libre en la forma

$$v_g = dE/dp = p/m = v.$$

En consecuencia, tal como la intuición física nos hacía suponer, la velocidad de grupo del campo de materia (es decir, la velocidad de propagación del paquete) es igual a la velocidad de la partícula. Concluimos entonces que una partícula localizada en una región determinada del espacio está asociada con un campo o paquete de ondas cuya amplitud es notable sólo en esa región; la velocidad de la partícula es la velocidad de grupo del campo o paquete de ondas.

1.12 El principio de indeterminación de Heisenberg para la posición y el momentum

Nos encontramos ahora con una situación especial que no se puede explicar con la mecánica clásica. Para que un paquete de ondas esté localizado en el espacio, es necesario superponer varios campos de longitudes de onda λ diferentes (o de números de onda k diferentes). Si el paquete de ondas ocupa una región Δx , los valores del número de onda de las ondas que interfieren para componer el paquete de ondas y que tienen una amplitud apreciable caen dentro de un intervalo Δk tal que, conforme a la teoría del análisis de Fourier,

$$\Delta x \Delta k \sim 2\pi.$$

Pero, según las ecs. (1.44) o (1.45), longitudes de onda λ o números de onda k diferentes significan que hay varios valores de p tales que $\Delta p = \hbar \Delta k$. Por lo tanto, teniendo en cuenta que $\hbar = 2\pi\hbar$, la expresión anterior se transforma en

$$\Delta x \Delta p \sim \hbar. \quad (1.48)$$

El significado físico de la relación (1.48) es el siguiente: si una partícula está dentro de la región $x - \frac{1}{2}\Delta x$ y $x + \frac{1}{2}\Delta x$ (o sea que Δx es la indeterminación en la posición de la partícula), su campo asociado está representado por ondas super-

puestas de momento entre $p - \frac{1}{2}\Delta p$ y $p + \frac{1}{2}\Delta p$, donde Δp está vinculado con Δx por la relación (1.48). Decimos que Δp es la indeterminación en el momentum de la partícula. La relación (1.48) implica que cuanto mayor es Δx menor es Δp e inversamente. En otras palabras: la información acerca de la localización de una partícula en el espacio se logra a expensas del conocimiento acerca de su momentum. Cuanto más preciso es nuestro conocimiento de la posición de una partícula, más imprecisa es nuestra información sobre su momentum, y viceversa. Esta es la razón por la cual una partícula de momentum bien determinado ($\Delta p = 0$) se representa con una onda de amplitud constante que se extiende a todo el espacio ($\Delta x \sim \infty$), de modo que nuestro conocimiento de la posición es nulo. No podemos determinar con exactitud la posición y el momentum de una partícula simultáneamente de modo que $\Delta x = 0$ y $\Delta p = 0$ al mismo tiempo. Tal conocimiento viola la relación (1.48). La relación (1.48) da la relación óptima entre las indeterminaciones Δx y Δp en la posición x y el momentum p de la partícula. En la mayoría de los casos, sin embargo, x y p se conocen con menor precisión de modo que debemos escribir, en vez de la relación (1.48), la expresión más general

$$\Delta x \Delta p \gtrsim \hbar.$$

El resultado expresado por la relación (1.48) se denomina *principio de indeterminación de Heisenberg* y se puede expresar en palabras como sigue:

Es imposible conocer simultáneamente y con exactitud la posición y el momentum de una partícula.

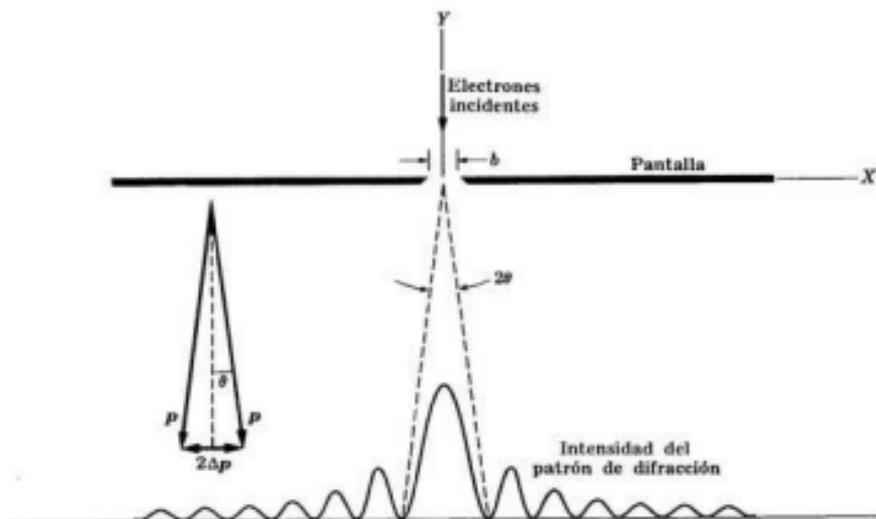


Fig. 1-27. Medición de la posición y del momentum de una partícula que pasa a través de una rendija.

Este principio expresa uno de los hechos fundamentales de la naturaleza y en cierta medida se puede considerar más fundamental que las relaciones (1.45), aunque aquí hayamos procedido en forma inversa. Para mejor comprender el principio de indeterminación consideremos algunas situaciones físicas posibles.

Decir que una partícula está en el punto x y tiene momentum p significa que debemos medir *simultáneamente* la coordenada x y el momentum p , ya que sin esa medida no tenemos información. Pero si analizamos el proceso de medida notamos que a escala atómica no podemos medir ni la posición ni el momentum sin perturbar apreciablemente el movimiento de la partícula. Para ilustrar esto, consideremos algunos experimentos simples. Supongamos por ejemplo que queremos determinar la coordenada x de una partícula observando si la misma pasa o no por un agujero (de ancho b) en una pantalla (fig. 1-27). La precisión con que conocemos la posición de la partícula está limitada por el tamaño del agujero, es decir que $\Delta x \sim b$. Pero el agujero perturba el campo asociado con la partícula dando lugar a un cambio en el movimiento de la partícula, como se deduce del diagrama de difracción que se produce. La indeterminación en el momentum de la partícula paralelo al eje X está determinada por el ángulo θ correspondiente

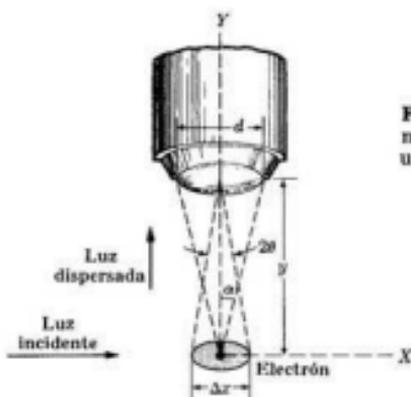


Fig. 1-28. Medición de la posición y del momentum de una partícula por medio de un microscopio.

al máximo central del diagrama de difracción, ya que la partícula, después de atravesar la rendija, se está moviendo con mayor probabilidad dentro del ángulo 2θ . De acuerdo con la teoría de la difracción producida por una rendija rectangular, el ángulo θ está dado por $\text{sen } \theta = \lambda/b$. Luego,

$$\Delta p \sim p \text{ sen } \theta = (h/\lambda)(\lambda/b) = h/b$$

es la indeterminación en el momentum paralelo al eje X . Por consiguiente, $\Delta x \Delta p \sim h$, que está de acuerdo con la relación (1.48). Nótese que para mejorar nuestra posibilidad de determinar la posición exacta de la partícula debemos usar una rendija muy estrecha. Pero una rendija muy estrecha produce un máximo central muy ancho en el diagrama de difracción, lo cual significa una inde-

terminación grande en nuestro conocimiento de la componente X del momentum de la partícula. Inversamente, para reducir la indeterminación en el conocimiento de la componente X del momentum, el máximo central del diagrama de difracción debe ser muy estrecho. Esto exige una rendija muy ancha, lo que da lugar a una indeterminación grande en la coordenada x de la partícula.

Otro experimento que indica la imposibilidad de observar una partícula sin perturbarla, es el caso en que tratamos de determinar la posición de un electrón por medio de un microscopio (fig. 1-28). Para observar el electrón debemos iluminarlo con luz de cierta longitud de onda λ . La luz que pasa por el microscopio es la que ha sido dispersada por el electrón en observación. El momentum de los fotones dispersados es $p_{\text{fotón}} = h/\lambda$ y para penetrar en el objetivo los fotones se deben mover dentro de un ángulo α de modo que la componente X de sus momenta tiene una indeterminación

$$\Delta p \sim p_{\text{fotón}} \text{ sen } \alpha \sim hd/2\lambda y,$$

ya que $\text{sen } \alpha \sim d/2y$. Esta es también la indeterminación en la componente X del momentum del electrón después de la dispersión de la luz, puesto que en el proceso de dispersión hay un intercambio de momentum entre el electrón y el fotón. Por otra parte la posición exacta del electrón es incierta a causa de la difracción de la luz cuando pasa por el objetivo del microscopio. La indeterminación en la posición del electrón es entonces igual al diámetro del disco central del diagrama de difracción. Este diámetro está dado por $2y \text{ sen } \theta$, con $\text{sen } \theta \sim \lambda/d$.^{*} En consecuencia

$$\Delta x \sim 2y \text{ sen } \theta \sim 2y\lambda/d.$$

Por consiguiente, nuevamente es $\Delta x \Delta p \sim h$. Obsérvese que para mejorar la precisión de nuestro conocimiento de la posición del electrón debemos usar radiación de longitud de onda muy pequeña, pero que produce una gran perturbación del momentum. Inversamente, para producir una pequeña perturbación del momentum debemos usar radiación de longitud de onda muy grande, lo que a su vez da lugar a una gran indeterminación en la posición.

Estos dos ejemplos muestran claramente que el principio de indeterminación es una consecuencia directa del proceso de medida. A nivel atómico, la medición introduce inevitablemente una perturbación significativa del sistema, debida a la interacción entre el dispositivo de medición y la cantidad que se mide.

El principio de indeterminación implica que nunca podemos definir la trayectoria de una partícula con la precisión absoluta postulada por la mecánica clásica. La mecánica clásica sigue siendo válida para cuerpos grandes, tales como los que interesan comúnmente al ingeniero, porque la indeterminación implícita en la relación (1.48) es, para un cuerpo macroscópico, mucho menor que los errores experimentales en los valores medidos de x y de p , debido a la pequeñez de la constante h de Planck. Por el contrario, *el concepto de trayectoria no tiene significado para partículas de dimensiones atómicas porque no se puede definir en forma precisa; se*

* No hemos considerado el factor 1,22 que aparece en la teoría de la difracción de una onda plana por una abertura circular.

necesita por consiguiente una descripción del movimiento que sea diferente a la de la física clásica. Por la misma razón, conceptos tales como velocidad, aceleración y fuerza son de uso limitado en la mecánica cuántica. En cambio, el concepto de energía sí es de importancia primordial, ya que está más relacionado con el "estado" del sistema que con su "trayectoria", como veremos en el próximo capítulo.

Para describir gráficamente el estado dinámico de una partícula, es decir, su posición y su momentum en cada instante, usamos un espacio representativo denominado *espacio de fase*. Para el caso de un movimiento unidimensional, el espacio de fase tiene dos dimensiones, correspondiendo la abscisa a la coordenada de posición x y la ordenada al momentum p (fig. 1-29). En la mecánica clásica, el estado de una partícula se representa en el espacio de fase con un punto de

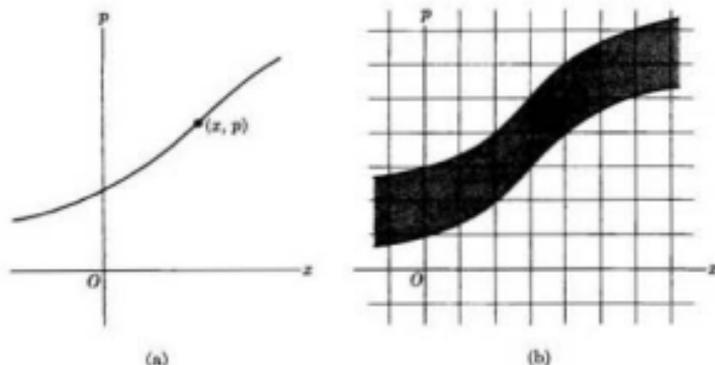


Fig. 1-29. Trayectorias clásica y cuántica de una partícula en el espacio de fase.

coordenadas (x, p) , puesto que en la mecánica clásica podemos determinar simultáneamente con precisión la posición y el momentum. Cuando la partícula se mueve, el punto representativo describe una línea en el espacio de fase (fig. 1-29a). En la mecánica cuántica la situación es diferente. Dividamos el espacio de fase en celdas, cada una de lados Δx y Δp de modo que $\Delta x \Delta p = h$. Luego, lo más que podemos decir es que en cada instante el punto representativo de la partícula está dentro de una de esas celdas. A medida que el tiempo transcurre, la trayectoria del punto representativo cae dentro de un camino en forma de cinta formado uniendo una serie de celdas (ver fig. 1-29b).

1.13 La relación de indeterminación para el tiempo y la energía

Además de la relación de indeterminación $\Delta x \Delta p \sim h$ entre una coordenada de una partícula en movimiento y el correspondiente momentum, hay una relación de indeterminación entre el tiempo y la energía. Supongamos que queremos medir no sólo la energía de una partícula sino también el instante en que la par-

ticula tiene esa energía. Si Δt y ΔE son las indeterminaciones de los valores de estas cantidades, se cumple la relación siguiente:

$$\Delta t \Delta E \sim h. \quad (1.49)$$

Podemos comprender esta relación del modo que sigue. Si queremos definir el instante en que una partícula pasa por un punto debemos representar la partícula mediante un pulso o paquete de ondas de duración Δt muy corta. Pero para construir este pulso es necesario superponer campos que tienen frecuencias diferentes, con una amplitud apreciable sólo en un intervalo de frecuencias $\Delta\omega$ centrado en la frecuencia ω y tal que, conforme a la teoría del análisis de Fourier,

$$\Delta t \Delta\omega \sim 2\pi.$$

Multiplicando por \hbar y recordando que según la ec. (1.45) $E = \hbar\omega$ y que $2\pi\hbar = h$, obtenemos la relación (1.49). Esta da la relación óptima entre las indeterminaciones Δt y ΔE . En la mayoría de los casos, se conocen t y E con menor precisión, por lo que en vez de la relación (1.49) debemos escribir la relación más general

$$\Delta t \Delta E \gtrsim h.$$

La relación de indeterminación (1.49) requiere que revisemos nuestro concepto de estados estacionarios. Consideremos un electrón en un estado estacionario

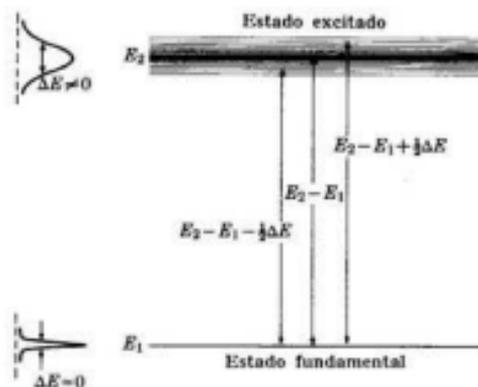


Fig. 1-30. Ancho de los niveles de energía.

excitado de un átomo. Después de cierto tiempo el electrón experimentará una transición radiativa a otro estado estacionario de energía menor. Sin embargo, no tenemos medios para predecir con certeza cuánto tiempo permanecerá el electrón en el estado estacionario antes de hacer la transición. Como se verá en el próximo capítulo, a lo sumo podemos hablar de la probabilidad por unidad de tiempo de que el electrón salte a un estado estacionario más bajo. Por lo tanto,

el intervalo promedio de tiempo durante el cual el electrón está en el estado estacionario, llamado también *vida media* del estado, y que es inversamente proporcional a la mencionada probabilidad de transición, se conoce con una indeterminación Δt . De aquí que la energía del estado estacionario del electrón no se conozca con precisión sino que tenga una indeterminación ΔE tal que se cumple la relación (1.49). La cantidad ΔE se denomina a menudo *ancho energético* del estado cuya energía está con mayor probabilidad entre $E - \frac{1}{2}\Delta E$ y $E + \frac{1}{2}\Delta E$ (fig. 1-30). Podemos suponer que Δt es del orden de magnitud de la vida media del estado. Por consiguiente, cuanto menor es la vida media de un estado excitado, mayor es la indeterminación de su energía. Para el estado fundamental, cuya vida media es infinita porque un sistema que está en su estado fundamental no puede realizar una transición a un estado estacionario de energía menor, tenemos $\Delta t \sim \infty$. Esto da $\Delta E = 0$ y se puede determinar exactamente la energía del estado fundamental.

A causa del ancho energético de los estados estacionarios, la energía liberada o absorbida en una transición no está bien definida. Así, en una transición entre estados de energía E_1 y E_2 , los fotones emitidos o absorbidos tienen energía en el intervalo

$$E_2 - E_1 \pm \frac{1}{2}\Delta E,$$

donde ΔE es el ancho energético total de los dos estados.

El corrimiento Doppler electromagnético da lugar a un ensanchamiento adicional en la energía de los estados estacionarios. Los átomos de una sustancia están en movimiento, algunos avanzando hacia el observador y otros alejándose de él, por lo que la frecuencia observada de la radiación emitida por el átomo difiere según sea la dirección del movimiento relativo. En la mayoría de las transiciones atómicas y moleculares, el ensanchamiento debido al efecto Doppler es mucho mayor que el ensanchamiento debido al principio de indeterminación, mientras que en general es menor en las transiciones nucleares.

EJEMPLO 1.10. Posibilidad de absorción resonante en transiciones atómicas y nucleares como resultado del ancho energético de los estados estacionarios.

Solución: Vimos en el ejemplo 1.6 que en una transición entre estados de energías E_1 y E_2 , el fotón emitido o absorbido tiene una energía que es menor o mayor, respectivamente, que $E_2 - E_1$ en una cantidad $(E_2 - E_1)^2/2Mc^2$. Por lo tanto, si el ancho energético ΔE es mayor que $(E_2 - E_1)^2/2Mc^2$, los fotones emitidos por un sistema pueden ser absorbidos por otro de la misma especie; si ΔE es menor no hay necesariamente absorción. La primera situación se presenta normalmente en sistemas atómicos y moleculares y la segunda es más común en los núcleos. Por ejemplo, en el caso atómico de la transición de 4,86 eV del vapor de mercurio, mencionada en la sección 1.8, la vida media del estado excitado del mercurio es aproximadamente 10^{-8} s. Un átomo de mercurio, cuya masa es de cerca de 200 una o $3,34 \times 10^{-28}$ kg, tiene una energía en reposo $Mc^2 = 1,86 \times 10^{11}$ eV. Por lo tanto el término que tiene en cuenta el retroceso atómico cuando $E_2 - E_1 = 4,86$ eV es

$$\frac{(E_2 - E_1)^2}{2Mc^2} = 7,15 \times 10^{-11} \text{ eV.}$$

La indeterminación en la energía del nivel excitado del átomo de mercurio, que tiene una vida media $\Delta t \sim 10^{-8}$ s, es $\Delta E \sim h/\Delta t = 4,14 \times 10^{-7}$ eV. Este valor es *mucho mayor* que el término de corrección (en un factor 10^6 aproximadamente). Podemos concluir de este ejemplo típico que los efectos de retroceso debidos a la conservación del momentum en transiciones atómicas y moleculares no entorpecen la absorción resonante.

Como ejemplo de una transición nuclear, consideremos el caso del rayo gamma de 1,3 MeV emitido por el ^{60}Ni . Un átomo de níquel, cuya masa es 60 uma ó $1,0 \times$

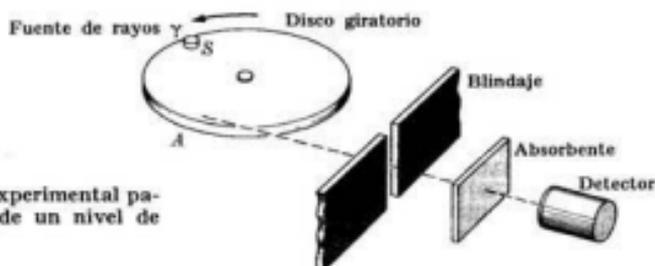


Fig. 1-31. Arreglo experimental para medir el ancho de un nivel de energía.

$\times 10^{-26}$ kg, tiene una energía en reposo $Mc^2 = 5,6 \times 10^{10}$ eV. Además $E_2 - E_1 = 1,3 \times 10^6$ eV. Por lo tanto el término correctivo que tiene en cuenta el retroceso nuclear es $(E_2 - E_1)^2/2Mc^2 = 15$ eV, que es relativamente mayor (comparado con $E_2 - E_1$) que en el caso atómico. La vida media del estado nuclear excitado es $\Delta t \sim 10^{-14}$ s. La indeterminación de la energía del nivel excitado es entonces $\Delta E \sim h/\Delta t = 0,41$ eV, que es *menor* que el término correctivo en un factor de 37. Por lo tanto los efectos de retroceso debidos a la conservación del momentum son importantes en las transiciones nucleares. Estos efectos hacen imposible, en muchos casos, que un núcleo absorba el fotón gamma emitido por otro núcleo similar.

EJEMPLO 1.11. Discusión del efecto Mössbauer.

Solución: Vimos en el ejemplo anterior que en las transiciones nucleares la indeterminación de la energía debida a la vida finita de un estado nuclear excitado es mucho menor que la energía de retroceso del núcleo, imposibilitando que un fotón emitido por un núcleo sea absorbido por otro núcleo idéntico. Sin embargo, en condiciones especiales, los efectos del retroceso se pueden reducir grandemente. Esto es posible cuando los núcleos que emiten y absorben están situados en una red cristalina y las condiciones son tales que todo el cristal retrocede en vez de un solo átomo.

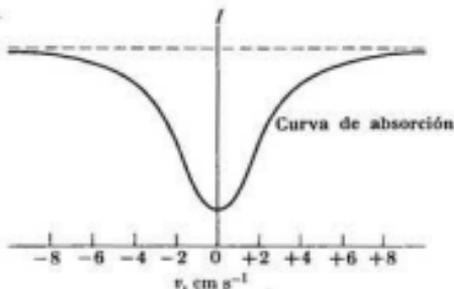


Fig. 1-32. Corriente en el detector en función de la velocidad del borde del disco giratorio.

En este caso la masa es tan grande que la energía de retroceso es muy pequeña respecto a $E_2 - E_1$. Entonces puede haber absorción resonante dándose lo que se llama efecto Mössbauer, que fue observado por primera vez en 1958 por el físico alemán R. L. Mössbauer.

El efecto Mössbauer ha sido utilizado para investigar varias propiedades físicas importantes. Por ejemplo, por medio del arreglo mostrado en la fig. 1-31, se puede determinar el ancho natural ΔE de un estado nuclear. Se monta una fuente de rayos γ en el borde de un disco giratorio de velocidad ajustable. Cuando la fuente está en A la radiación pasa a través del agujero en el blindaje e incide sobre un absorbente compuesto de átomos del mismo material que la fuente. Tanto el emisor como el absorbente están alojados en cristales, esencialmente para eliminar los efectos de retroceso. Cuando el emisor está en reposo respecto al observador se observa absorción resonante; pero cuando se pone en movimiento el disco es imposible la absorción resonante. Esto se debe al corrimiento Doppler de la frecuencia de los rayos γ emitidos, a consecuencia del movimiento de la fuente respecto al absorbente.

La fig. 1-32 muestra la intensidad de la radiación transmitida. Obsérvese que hay absorción máxima para velocidad relativa nula y que la absorción disminuye cuando la velocidad relativa aumenta en cualquiera de las dos direcciones. Para una velocidad relativa de alrededor de 4 cm s⁻¹, correspondiente a una variación Doppler de la frecuencia del orden de $\Delta\nu \sim v(\nu/c) = 1,33 \times 10^{-10} \nu$, o sea un cambio $\Delta E \sim \sim 1,33 \times 10^{-10} E$ en la energía, la absorción es prácticamente despreciable, lo cual indica que el ancho del estado es aproximadamente la mitad.

Bibliografía

1. "Early Work in Electron Diffraction", G. Thomson, *Am. J. Phys.* **29**, 821 (1961)
2. "The Scattering of X-rays as Particles", A. Compton, *Am. J. Phys.* **29**, 817 (1961)
3. "Einstein's Proposal of the Photon Concept", A. Arons y M. Peppard, *Am. J. Phys.* **33**, 367 (1965)
4. "60 Years of Quantum Physics", E. Condon, *Physics Today*, octubre de 1962, pág. 37
5. "Paths to Quantum Theory Historically Viewed", F. Hund, *Physics Today*, agosto de 1966, pág. 23
6. "The Mössbauer Effect", S. de Benedetti, *Sci. Am.*, abril de 1960, pág. 72
7. *Introduction to Modern Physics*, F. Richtmyer, E. Kennard y T. Lauritsen. McGraw-Hill, New York, 1955, cap. 3, secs. 43, 44, 49-55; cap. 4; cap. 5, secs. 86 y 87; cap. 6, secs. 90-95
8. *Great Experiments in Physics*, Morris Shamos, editor. Holt, Rinehart, and Winston, New York, 1959, cap. 17 (Einstein); apéndice 2 (Planck); apéndice 5 (Compton)
9. *The Feynman Lectures on Physics*, vol. I, R. Feynman, R. Leighton y M. Sands. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1963, cap. 37
10. *Foundations of Modern Physical Science*, G. Holton y D. H. D. Roller. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1958, caps. 31 y 32

Problemas

1.1 Cuando se acelera un electrón a través de una diferencia de potencial de 1 volt su ganancia de energía se denomina 1 electronvolt (eV). (a) Mostrar que $1 \text{ eV} = 1,602 \times 10^{-19} \text{ J}$. (b) ¿En cuánto aumenta la energía de un electrón cuando se le acelera a través de 10 V, 50 kV y 1 MV? (c) Suponiendo que el electrón parte del reposo, calcular la velocidad final.

1.2 Una fuente gaseosa emite luz de longitud de onda $5 \times 10^{-7} \text{ m}$. Suponer que cada molécula es un oscilador de carga e y amplitud 10^{-10} m . (a) Calcular la rapidez media de radiación de energía por molécula. (b) Si la rapidez total de radiación de energía de la fuente es 1 W, ¿cuántas moléculas está emitiendo simultáneamente?

1.3 Estimar el valor de (dE/dt) dado por la ec. (1.5) para un protón de un núcleo. Suponer que z_0 es del orden de 10^{-16} m y ω de alrededor de $5 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$ para rayos gamma de baja energía.

1.4 Se puede deducir de las ecuaciones de Maxwell que los campos eléctrico y magnético de una onda electromagnética plana están relacionados por $\mathcal{E} = c\mathcal{B}$. Mostrar que la densidad de energía de la onda se puede escribir en la forma $\epsilon = \epsilon_0 \mathcal{E}^2$. La intensidad I de la onda es igual a la energía que fluye en la unidad de tiempo a través de la unidad de área perpendicular a la dirección de propagación. Mostrar que $I = c\epsilon_0 \mathcal{E}^2$.

1.5 La densidad de momentum de una onda electromagnética se puede escribir $\mathbf{p} = \epsilon_0 \mathcal{E} \times \mathcal{B}$. Mostrar que esta expresión tiene unidades de momentum por unidad de volumen. Demostrar también que para una onda plana $\mathbf{E} = pc$. [Sugerencia: Recordar la relación entre \mathcal{E} y \mathcal{B} en una onda plana y la expresión de \mathbf{x} dada en el problema 1.4.]

1.6 La radiación electromagnética proveniente del sol incide sobre la superficie terrestre a razón de $1,4 \times 10^3 \text{ W m}^{-2}$. (a) Suponiendo que esta radiación se puede considerar como una onda plana, estimar el módulo de las amplitudes de los campos eléctrico y magnético de la onda y la densidad del momentum de

la misma. (b) Si la superficie de la tierra absorbe este momentum, calcular la presión de radiación sobre la tierra.

1.7 Las ondas de radio recibidas por un aparato de radio tienen un campo eléctrico de amplitud 10^{-1} V m^{-1} . Suponiendo que se puede considerar que la onda es plana, calcular: (a) la amplitud del campo magnético, (b) la intensidad media de la onda, (c) la densidad media de energía, (d) la densidad media de momentum. (e) Suponiendo que el aparato de radio está a 1 km de la estación radiodifusora y que la misma irradia energía en forma isotrópica, determinar la potencia de la estación. [Sugerencia: Recordar que si el campo eléctrico varía armónicamente con amplitud \mathcal{E}_0 , el promedio temporal del cuadrado del campo es $\frac{1}{2}\mathcal{E}_0^2$.]

1.8 Demostrar que la intensidad de la radiación proveniente de un pequeño agujero en las paredes de una cavidad que está en equilibrio térmico con la radiación (es decir, un cuerpo negro) está dada por $I = \frac{1}{4}c\epsilon$, donde ϵ es la densidad de la energía de radiación. Demostrar también que la constante de Stefan-Boltzmann es $\sigma = \frac{1}{4}ca$, donde $a = 7,56 \times 10^{-16} \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-4}$ (ver el ejemplo 1.4).

1.9 Escribir la forma asintótica de la ley de radiación de Planck (ec. 1.8) para los casos de frecuencia muy alta y de frecuencia muy baja. La primera relación se denomina *ley de radiación de Wien* y la segunda, *ley de radiación de Rayleigh-Jeans*.

1.10 ¿Cuál es la longitud de onda correspondiente al pico del espectro de la radiación del cuerpo negro a 300 K (temperatura ambiente)? Determinar la densidad de energía monocromática a esta longitud de onda.

1.11 Suponiendo que el sol es un cuerpo negro esférico de radio $7 \times 10^8 \text{ m}$, calcular la temperatura del sol y la densidad de energía de radiación dentro de él. La intensidad de la radiación del sol en la superficie terrestre (que está a $1,5 \times 10^{11} \text{ m}$ del sol) es $1,4 \times 10^3 \text{ W m}^{-2}$. ¿Son realistas los números obtenidos? Explicar.

1.12 La energía de arranque fotoeléctrico del potasio es 2,0 eV. Suponiendo

que sobre él incide luz de $3,6 \times 10^{-7}$ m de longitud de onda, hallar: (a) el potencial que detiene a los fotoelectrones, (b) la energía cinética y la velocidad de los más rápidos electrones liberados.

1.13 Un haz luminoso monocromático uniforme de $4,0 \times 10^{-7}$ m de longitud de onda incide sobre un material cuya energía de arranque es 2,0 eV. El haz tiene una intensidad de $3,0 \times 10^{-2}$ W m⁻². Hallar: (a) el número de electrones emitidos por m² y por s, (b) la energía absorbida por m² y por s, (c) la energía cinética de los fotoelectrones.

1.14 La energía de ligadura de un electrón interno del plomo es 9×10^4 eV. Cuando se irradia plomo con una cierta radiación electromagnética y los fotoelectrones entran en un campo magnético de 10^{-3} T, describen una circunferencia de 0,25 m de radio. Calcular: (a) el momentum y la energía de los electrones, (b) la energía de los fotones absorbidos.

1.15 Cuando se ilumina cierta superficie metálica con luz de diferentes longitudes de onda, se miden los potenciales de detención de los fotoelectrones que se muestran en la tabla.

$\lambda (\times 10^{-7} \text{ m})$	V, V	$\lambda (\times 10^{-7} \text{ m})$	V, V
3,66	1,48	4,92	0,62
4,05	1,15	5,46	0,36
4,36	0,93	5,79	0,24

Representar el potencial de detención en función de la frecuencia de la luz. Determinar del gráfico: (a) el umbral de frecuencia, (b) la energía de arranque fotoeléctrico del metal, (c) la razón h/e .

1.16 Un fotón cuya energía es de 10^4 eV choca con un electrón libre en reposo y se dispersa en un ángulo de 60° . Hallar: (a) las variaciones de energía, de frecuencia y de longitud de onda del fotón, (b) la energía cinética, el momentum y la dirección del electrón que retrocede.

1.17 Una radiación de 10^{-10} m (ó 1 Å) de longitud de onda experimenta dispersión de Compton en una muestra de

carbono. Se observa la radiación dispersada en dirección perpendicular a la de incidencia. Hallar: (a) la longitud de onda de la radiación dispersada, (b) la energía cinética y la dirección del movimiento de los electrones de retroceso.

1.18 Con referencia al problema precedente, si los electrones retroceden según un ángulo de 60° respecto a la radiación incidente, hallar (a) la longitud de onda y la dirección de la radiación dispersada, (b) la energía cinética del electrón.

1.19 Hallar la energía y la longitud de onda de un fotón que puede impartir un máximo de energía de 60 keV a un electrón libre.

1.20 Un haz monocromático de rayos X de una longitud de onda de 10^{-11} m incide sobre una lámina delgada de metal. Se observa la radiación dispersada a ángulos de (a) 90° y (b) 60° . ¿Qué dos frecuencias predominantes se detectan en cada caso?

1.21 Demostrar que cuando un electrón libre se dispersa en una dirección que forma un ángulo ϕ con el fotón incidente en la dispersión de Compton, la energía cinética del electrón es

$$E_k = h\nu(2\alpha \cos^2 \phi) / (1 + \alpha)^2 - \alpha^2 \cos^2 \phi,$$

donde $\alpha = h\nu/m_0c^2$.

1.22 Demostrar que en la dispersión de Compton la relación entre los ángulos que definen las direcciones del fotón dispersado y del retroceso es $\cotg \phi = (1 + \alpha) \tg \frac{1}{2}\theta$, donde $\alpha = h\nu/m_0c^2$.

1.23 Un haz monocromático de radiación electromagnética tiene una intensidad de 1 W m^{-2} . ¿Cuál es el número medio de fotones por m² para (a) ondas de radio de 1 kHz y (b) rayos gamma de 10 MeV?

1.24 La mínima intensidad de luz que puede percibir el ojo es aproximadamente $10^{-16} \text{ W m}^{-2}$. ¿Cuántos fotones (longitud de onda $5,6 \times 10^{-7}$ m) entran por segundo por la pupila del ojo a esta intensidad? Se puede tomar $0,5 \times 10^{-4} \text{ m}^2$ para el área de la pupila.

1.25 Determinar la frecuencia y la longitud de onda de los fotones absorbidos por los siguientes sistemas: (a) un núcleo

que absorbe 10^3 eV de energía, (b) un átomo que absorbe 1 eV, (c) una molécula que absorbe 10^{-3} eV.

1.26 Los átomos de sodio absorben o emiten radiación electromagnética de $5,9 \times 10^{-7}$ m, correspondiente a la zona amarilla del espectro visible. Determinar la energía de los fotones que se absorben o emiten.

1.27 (a) La longitud de onda más larga que puede producir radiación resonante en el mercurio es $2,536 \times 10^{-7}$ m. ¿Cuál es la primera energía de excitación del mercurio? (b) El espectro de emisión del mercurio presenta líneas intensas en las longitudes de onda: 1850 Å, 2536 Å, 3132 Å, 5460 Å y 5780 Å. Hay también líneas débiles en 1402 Å y 12 072 Å. Calcular la energía de estas transiciones y construir un gráfico de niveles similar al de la fig. 1-15b, sabiendo que la línea de 2536 Å está asociada con la excitación desde el estado fundamental al primer estado excitado.

1.28 Las líneas D del sodio (ver problema 1.26) aparecen cuando se bombardea sodio con electrones acelerados en una diferencia de potencial de 2,11 volts. Calcular el valor de h/e .

1.29 Para separar los átomos de carbono y oxígeno que forman la molécula de monóxido de carbono, se necesita una energía mínima de 11 eV. Hallar la frecuencia mínima y la longitud de onda máxima de la radiación electromagnética necesaria para disociar la molécula.

1.30 Un átomo de hidrógeno en reposo absorbe un fotón de 10^4 eV de energía. Como consecuencia, el electrón sale despedido en la misma dirección que la radiación incidente. Despreciando la energía necesaria para separar el electrón (13,6 eV), hallar el momentum y la energía del mismo y del protón.

1.31 ¿Cuál es la longitud de onda más corta del bremsstrahlung que se observa cuando un electrón acelerado en una diferencia de potencial de 40 kV se detiene repentinamente en el anticátodo de un tubo de rayos X? Refiriéndose a la fig. 1-13, determinar la región del espectro electromagnético en que está esta longitud de onda.

1.32 En la alta atmósfera, el oxígeno molecular está disociado en dos átomos de oxígeno por acción de los fotones provenientes del sol. La longitud de onda máxima de los fotones para originar este proceso es $1,75 \times 10^{-7}$ m. ¿Cuál es la energía de ligadura del O_2 ?

1.33 Corregir las ecs. (1.40) y (1.41) para tener en cuenta el efecto de retroceso del ion. Empleando las ecuaciones corregidas, calcular la energía mínima que debe tener un fotón para ionizar un átomo de hidrógeno.

1.34 Demostrar que el proceso de recombinación $A^+ + e \rightarrow A$ es imposible sin violar la conservación de la energía o la del momentum, a no ser que haya una tercera partícula.

1.35 Probar que en la ec. (1.42) la conservación del momentum y de la energía sería imposible si no hubiera materia presente (por lo menos un núcleo).

1.36 Al atravesar plomo, un fotón de 2,9 MeV crea un par electrón-positrón. Las partículas tienen la misma energía cinética. Hallar: (a) el momentum, (b) la energía y (c) la velocidad de cada una. Despreciar la energía de retroceso del átomo de plomo.

1.37 ¿Cuál es el mayor número posible de positrones que puede crear un fotón de 130 MeV al atravesar un material?

1.38 Sobre un absorbente de plomo inciden rayos gamma con energías de 0,05, 1,36 y 1 MeV, pero de igual intensidad. Los coeficientes de absorción lineal para estas energías son 8×10^4 m $^{-1}$, 5×10^4 m $^{-1}$ y 78 m $^{-1}$, respectivamente. (a) Calcular el espesor de plomo necesario para reducir la intensidad de cada haz a la décima parte de la intensidad original. (b) ¿Cuál es el cociente entre la intensidad total (de las tres energías fotónicas) a una profundidad de 5 mm, y la intensidad total incidente?

1.39 Se define el espesor *hemirreductor* $x_{1/2}$ como el espesor que debe tener un absorbente para reducir la intensidad de un haz incidente de rayos X a la mitad de su intensidad original. Demostrar que $x_{1/2} = \ln 2/E$. Hallar los espesores hemirreductores del plomo para rayos X de 0,1, 0,5 y 1 MeV. [Sugerencia: Usar

la fig. 1-19 para determinar los coeficientes de absorción lineal.]

1.40 Rayos X pasan a través de hojuelas de aluminio de 4×10^{-3} m de espesor. La rapidez de conteo de un contador Geiger en función del número de láminas es 8×10^3 , $4,7 \times 10^3$, $2,8 \times 10^3$, $1,65 \times 10^3$, $9,7 \times 10^2$ cuentas/min para 0, 1, 2, 3 y 4 láminas respectivamente. Calcular el coeficiente de absorción lineal del aluminio. Utilizando la fig. 1-19, estimar la energía de los rayos X.

1.41 ¿Cuántas capas de espesor hemisfero de un material se necesitan para reducir la intensidad de un haz de rayos X a (a) $\frac{1}{4}$, (b) $\frac{1}{8}$ y (c) $\frac{1}{16}$ de su valor incidente?

1.42 Calcular la longitud de onda de de Broglie de un electrón cuando su energía es 1 eV, 100 eV, 1000 eV. ¿Qué longitudes de onda se difratarían notablemente en un cristal de níquel, donde la separación atómica es aproximadamente 2,15 Å? Calcular la energía de los electrones que experimentan difracción de Bragg a un ángulo de 30° .

1.43 Rayos X monocromáticos ($\lambda = \frac{1}{2}$ Å) inciden sobre una muestra de KCl pulverizado. Se coloca una placa fotográfica plana perpendicularmente al haz incidente y a una distancia de 1,0 m del polvo. Determinar los radios de Bragg de primero y segundo orden si la separación de los planos de Bragg es 3,14 Å.

1.44 Un haz estrecho de neutrones térmicos producidos en un reactor nuclear incide sobre un cristal cuya red tiene un espaciado de 1,6 Å. Determinar el ángulo de Bragg para el cual se difractan fuertemente neutrones de 2 eV.

1.45 Demostrar que el cociente entre la longitud de onda de de Broglie y la de Compton para una misma partícula es igual a

$$\sqrt{(c/v)^2 - 1}.$$

1.46 Verificar que la velocidad de grupo de un paquete de ondas es igual a la velocidad de la partícula, aún en condiciones relativistas. Demostrar también que la velocidad de fase de un campo de materia a velocidades relativistas es igual a c^2/v .

1.47 Suponiendo que un haz de electrones con longitud de onda de de Broglie igual a 10^{-4} m pasa a través de una rendija de 10^{-4} de espesor, ¿qué dispersión angular se introduce a causa de la difracción en la rendija?

1.48 Una sonda siempre debe ser menor (por lo menos en un factor 10) que el objeto que se estudia: de lo contrario habrá una perturbación notable de la posición y de la velocidad del objeto. Calcular la energía mínima de las partículas si se usa (a) fotones, (b) electrones, (c) neutrones para sondear un núcleo de 10^{-14} m de diámetro.

1.49 Se mide la velocidad de un protón en la dirección X con una precisión de 10^{-7} m s⁻¹. Calcular el límite de precisión con que se puede localizar simultáneamente el protón (a) según el eje X, (b) según el eje Y. Repetir para el caso en que la partícula es un electrón.

1.50 Se determina la posición de un electrón con una indeterminación de 0,1 Å. Hallar la indeterminación en su momentum. Si la energía del electrón es del orden de 1 keV, estimar la indeterminación en la energía. Repetir para un protón confinado a un diámetro nuclear ($\approx 10^{-14}$ m) con una energía del orden de 2 MeV.

1.51 Demostrar que la trayectoria de fase del punto representativo de un oscilador armónico de frecuencia angular ω es una elipse de semiejes A y $m\omega A$, donde m es la masa del oscilador y A la amplitud de su movimiento. Hallar el área de la elipse y demostrar que es igual a $2\pi E/\omega$, donde E es la energía total del oscilador. Comparando este valor con la ec. (1.7), verificar que el área de una elipse permitida es $n\hbar$ y que, por lo tanto, las áreas de dos elipses sucesivas difieren en la cantidad constante \hbar . Relacionar esto con la explicación asociada con la fig. 1-29.

1.52 Hallar el ancho de línea y la dispersión de frecuencias para un pulso de 1 nanosegundo (10^{-9} s) proveniente de un láser de rubí ($\lambda = 6,3 \times 10^{-7}$ m).

1.53 Si una fuente se mueve con velocidad v respecto a un observador, la frecuencia de la radiación que mide el

observador experimenta un corrimiento $\Delta\nu = \nu u/c$, donde u es positiva (negativa) cuando el movimiento es hacia (alejándose de) el observador y donde ν es la frecuencia para cuando la fuente es estática. Esto se denomina *corrimiento Doppler electromagnético*. Como las moléculas de un gas están en movimiento al azar, el corrimiento Doppler es diferente para cada molécula. Esto introduce un ensanchamiento de línea dado por $\delta = 2(\nu/c) \sqrt{2kT \ln 2/m}$, donde m es la masa de la molécula y T es la temperatura absoluta del gas. Calcular el *ensanchamiento Doppler* a temperatura ambiente (300 K) para la transición atómica de 4,86 eV en el mercurio y para la transición nuclear de 1,33 MeV en el ^{60}Ni . Discutir en cada caso el efecto sobre la absorción resonante.

1.54 La línea gamma emitida por el ^{137}I tiene una energía media de 129 keV y el ancho de la misma medido a la mitad de la intensidad máxima es $4,6 \times 10^{-4}$ eV. Estimar (a) la vida promedio del estado excitado que emite esta línea, (b) la velocidad relativa fuente-observador necesaria para dar un corrimiento Doppler de primer orden igual al ancho de línea medido.

1.55 Demostrar que la variación máxima de energía cinética de una partícula de masa m y con energía cinética inicial E_k , cuando choca con una partícula de masa M inicialmente en reposo en el sistema de referencia L , es $\Delta E_k = -4AE_k/(1+A)^2$, donde $A = M/m$. (a) Hallar el valor límite cuando $M \gg m$. (b) Representar gráficamente ΔE_k en función de A .

MECANICA CUANTICA

- 2.1 *Introducción*
- 2.2 *Función de onda y densidad de probabilidad*
- 2.3 *Ecuación de Schrödinger*
- 2.4 *Escalón de potencial*
- 2.5 *Partícula en una caja de potencial*
- 2.6 *El oscilador armónico*
- 2.7 *Niveles de energía y funciones de onda en general*
- 2.8 *Penetración a través de una barrera de potencial*
- 2.9 *Simetría, funciones de onda y paridad*
- 2.10 *La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo*
- 2.11 *Probabilidades de transición y reglas de selección*
- 2.12 *Teoría formal de la mecánica cuántica*

2.1 Introducción

El movimiento de los cuerpos que observamos a nuestro alrededor se puede describir (independientemente de la interacción entre ellos) en función de reglas generales basadas en evidencias experimentales. Estas reglas o principios son: (1) la conservación del momentum, (2) la conservación del momentum angular, y (3) la conservación de la energía. Basándose en estas leyes de conservación, fue desarrollado un formalismo llamado *mecánica clásica*, que describe en detalle el movimiento de las partículas bajo las hipótesis de que éstas están localizadas en el espacio y podemos observarlas sin perturbar apreciablemente sus movimientos. En general, tales hipótesis están implícitas, antes que establecidas de un modo preciso. Este formalismo se ha usado para describir y analizar los movimientos de diversos cuerpos, desde aquéllos del tamaño de un planeta hasta un electrón. Sin embargo, cuando se aplica al movimiento de los constituyentes básicos de la materia, la mecánica clásica da sólo resultados aproximados, totalmente inadecuados en algunos casos.

Hemos visto en el capítulo anterior que, como resultado de evidencia experimental, nos hemos visto obligados a introducir varios conceptos nuevos y revolucionarios en nuestros métodos para describir el comportamiento de la materia. Aunque las leyes de conservación del momentum, del momentum angular y de la energía permanecen válidas, el principio de indeterminación nos obliga a renunciar a una descripción detallada del movimiento de las partículas atómicas según el punto de vista de la mecánica clásica. La cuantización de la energía (y quizá de otras cantidades físicas) es otra idea nueva que no aparece en la mecánica clásica. Una teoría satisfactoria debe contener información acerca de los niveles de energía permitidos. La interacción de la radiación y la materia por medio de la absorción o emisión de fotones es otro concepto nuevo que debe ser incorporado.

Por consiguiente, esta situación ha exigido que se desarrolle un nuevo formalismo, llamado *mecánica cuántica*, que ha producido una profunda revolución en la física. La mecánica cuántica en su estado actual es el resultado del trabajo de Louis de Broglie, Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg, Paul Dirac, Max Born y otros, quienes la desarrollaron a fines de la década del 20. La mecánica cuántica es esencial para comprender el comportamiento de los constituyentes fundamentales de la materia. La teoría es matemáticamente elaborada, pero sus ideas básicas son relativamente simples. En esta capítulo estudiaremos brevemente algunos aspectos fundamentales de la mecánica cuántica, los suficientes para capacitarnos en la aplicación de la teoría al análisis de la estructura atómica, molecular y nuclear, que será considerada en los capítulos que siguen.

2.2 Función de onda y densidad de probabilidad

En la sección 1-12 concluimos que no podemos hablar de la trayectoria de una partícula atómica en el sentido clásico. No podemos, por ejemplo, preguntar si los electrones se mueven o no en una órbita elíptica alrededor del núcleo de un

átomo. Esta pregunta carecería de significado aún cuando las fuerzas que actúan sobre las partículas produjesen tales órbitas clásicas. Ahora bien, si no podemos hablar acerca de la trayectoria de un electrón o de cualquiera otra partícula atómica, ¿cómo podemos describir su movimiento?

Es el campo de materia, introducido en la sección 1.10, el que suministra la información para responder a esta pregunta. Para obtener esa información tomaremos como guía el conocimiento que tenemos de las ondas estacionarias, esto es, ondas confinadas a una cierta región tal como una cuerda vibrante fija en sus extremos, una columna de aire oscilante cerrada en ambos extremos o una radiación electromagnética atrapada en una cavidad de paredes perfectamente conductoras. Recordemos que en las ondas estacionarias la *amplitud* de la onda es fija en cada punto del espacio. En los puntos donde la amplitud es mayor, la onda es más intensa.

Una situación similar ocurre en el caso de las partículas atómicas. Consideremos, por ejemplo, un electrón en un átomo. Este nunca se aparta mucho del núcleo y se encuentra confinado en una pequeña región de dimensiones del orden de 10^{-8} m. Por ello se puede expresar el campo de materia asociado al electrón mediante ondas estacionarias localizadas en dicha región, con amplitud variable de punto a punto en el interior de la región y prácticamente cero fuera de la misma. Designemos la amplitud del campo de materia por $\psi(x)$. Por razones históricas, esta amplitud $\psi(x)$ se denomina corrientemente *función de onda*, aunque el nombre es impropio. Quizá hubiera sido mejor llamarla *amplitud del campo de materia*.

Sabemos que la intensidad de un movimiento ondulatorio es proporcional al cuadrado de la amplitud. Por lo tanto la *intensidad del campo de materia está dada por $|\psi(x)|^2$* . La función de onda $\psi(x)$ se expresa algunas veces por una fun-

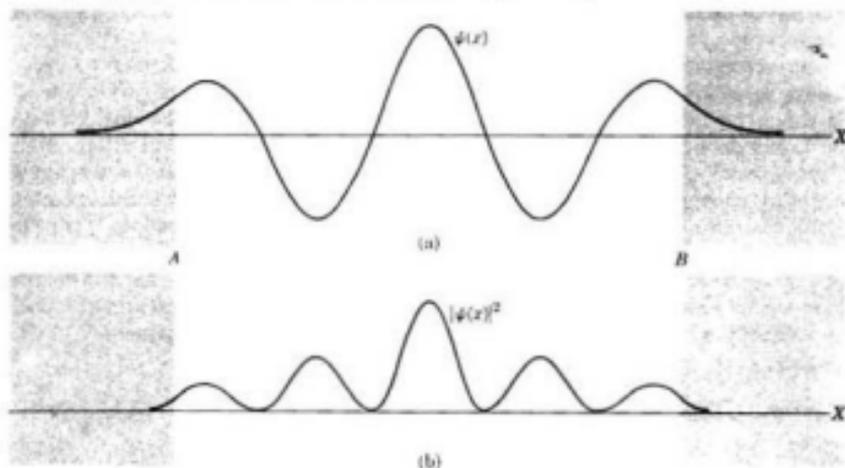


Fig. 2-1. (a) Función de onda de una partícula que se mueve entre A y B. (b) Distribución de probabilidad correspondiente a la función de onda que se muestra en (a).

ción compleja, esto es, una función que contiene $i = \sqrt{-1}$. El complejo conjugado de una función compleja se obtiene reemplazando cada i por $-i$. El complejo conjugado de una función se designa por ψ^* . Entonces $|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$. Para una función real $\psi = \psi^*$. A continuación consideraremos qué significado físico se da a la intensidad del campo de materia. Como el campo de materia describe el movimiento de una partícula podemos decir que *las regiones del espacio en las cuales es más probable que la partícula se encuentre son aquellas en las que $|\psi(x)|^2$ es grande.*

Por ejemplo, en la fig. 2-1 se muestra la función de onda $\psi(x)$ para una partícula confinada principalmente en la región entre A y B (a). Obsérvese que $\psi(x)$ disminuye muy rápidamente fuera de la región AB donde la partícula probablemente se encuentre mientras que la función de onda está oscilando en tal región. La intensidad del campo de materia, dado por $|\psi(x)|^2$, se indica en la figura 2-1(b). O más cuantitativamente digamos que

la probabilidad de encontrar la partícula descrita por la función de onda $\psi(x)$ en el intervalo dx alrededor del punto x es $|\psi(x)|^2 dx$.

En otras palabras, la probabilidad por unidad de longitud (o *densidad de probabilidad*) de encontrar la partícula en x es

$$P(x) = |\psi(x)|^2.$$

Estamos suponiendo, para simplificar, que el movimiento es unidireccional. Pero en el caso general del movimiento en el espacio, la función de onda (o la amplitud del campo de materia) depende de las tres coordenadas x, y, z esto es, $\psi(x, y, z)$. Entonces $|\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz$ es la probabilidad de encontrar la partícula en el volumen $dx dy dz$ alrededor del punto de coordenadas x, y, z , o

$$P = |\psi(x, y, z)|^2 \quad (2.1)$$

es la probabilidad por unidad de volumen, o la *densidad de probabilidad*, de encontrar la partícula en el punto (x, y, z) . Por ejemplo, supongamos que calculamos $\psi(x, y, z)$ para un electrón de un átomo y hacemos el gráfico de $|\psi|^2$ como en la fig. 2-2, donde N es el núcleo y la intensidad de sombreado es proporcional al valor de $|\psi(x, y, z)|^2$. De este modo las zonas más oscuras representan las regiones en las cuales la probabilidad de encontrar el electrón es máxima. Esto es todo lo que podemos decir acerca de la localización del electrón en el átomo, siendo imposible hablar de órbitas precisas del electrón. Evidentemente, la probabilidad de encontrar el electrón dentro de un volumen finito V es

$$P_V = \int_V |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz.$$

Ahora bien, el electrón debe encontrarse en algún lugar del espacio, y por consiguiente si extendemos la integral anterior a todo el espacio, la probabilidad se convierte en certeza o 1. Entonces debemos tener

$$\int_{\text{Todo al espacio}} |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1. \quad (2.2)$$

Esta expresión se denomina *condición de normalización*. Ella impone una limitación severa en las formas posibles de la función de onda $\psi(x, y, z)$, ya que no siempre es posible satisfacer la ec. (2.2) para una función arbitraria. En particular, $\psi(x, y, z)$ debe disminuir muy rápidamente cuando las coordenadas x, y, z se hacen muy grandes, para que la integral extendida a todo el espacio exista.

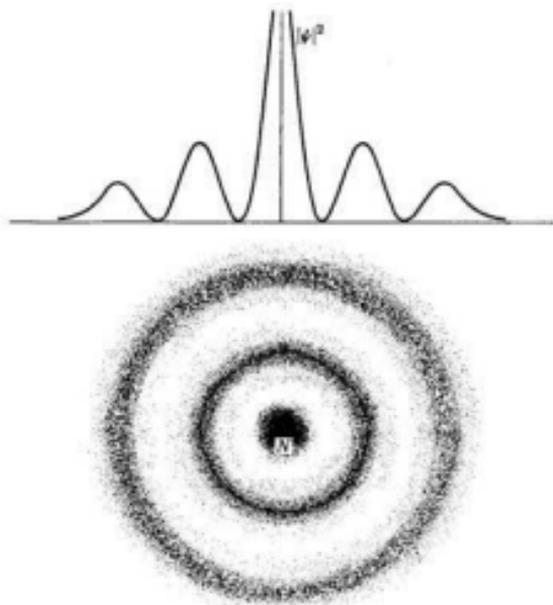


Fig. 2-2. Distribución de probabilidad para un electrón en un átomo.

2.3 Ecuación de Schrödinger

Nuestro próximo paso debe ser encontrar una regla mediante la cual se pueda obtener la amplitud de campo o función de onda ψ para cada problema dinámico. Evidentemente la función de onda $\psi(x)$ debe depender del estado dinámico de la partícula. Este estado dinámico está caracterizado por las fuerzas que actúan sobre la partícula y por la energía total de la misma. Pero si las fuerzas son conservativas, la energía potencial $E_p(x)$ de la partícula determina su movimiento. Por consiguiente, debemos esperar que la función de onda $\psi(x)$ dependa en algún modo de la energía potencial y de la energía total,

$$E = p^2/2m + E_p(x),$$

de la partícula. En efecto, la regla para encontrar $\psi(x)$ se expresa en la forma de una ecuación diferencial, llamada *ecuación de Schrödinger*, la cual fue formulada en 1926 por el físico alemán Erwin Schrödinger (1887-1961). Esta ecuación (para problemas en una sola dimensión) es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + E_p(x)\psi = E\psi, \quad (2.3)$$

donde m es la masa de la partícula. La ecuación de Schrödinger es tan fundamental para la mecánica cuántica como la ecuación de Newton $F = dp/dt$ lo es para la mecánica clásica o las ecuaciones de Maxwell para el electromagnetismo. Evidentemente las soluciones de la ec. (2.3) dependen de la forma de la energía potencial $E_p(x)$.

No haremos una deducción detallada de la ecuación de Schrödinger, porque eso está fuera del objetivo de este libro. Empero, la justificaremos en el ejemplo 2.1 de una manera intuitiva y por analogía con otros campos más familiares al estudiante. También en la sección 2.12 indicaremos, dentro del contenido formal de la mecánica cuántica, cómo se obtiene la ecuación.

En el caso de una partícula libre la energía potencial es cero (esto es, $E_p(x) = 0$), y la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi,$$

que puede escribirse en la forma

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (2.4)$$

Pero para una partícula libre, $E = p^2/2m$. Haciendo $p = \hbar k$, de acuerdo con la ec. (1.45), donde k es el número de onda, tenemos $E = \hbar^2 k^2/2m$. Entonces la ec. (2.4) se convierte en

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad (2.5)$$

que es idéntica a la ecuación de la amplitud de ondas estacionarias con una longitud de onda $\lambda = 2\pi/k = h/p$, como lo requiere la ec. (1.44). Esta ecuación se verifica, por ejemplo, para la amplitud de las ondas estacionarias en una cuerda o en una columna gaseosa, o la de las ondas electromagnéticas atrapadas en una cavidad.*

Recordando que $i = \sqrt{-1}$ e $i^2 = -1$, vemos por sustitución directa que la ecuación diferencial (2.5) admite como soluciones las funciones de onda

$$\psi(x) = e^{ikx} \quad \text{y} \quad \psi(x) = e^{-ikx}. \quad (2.6)$$

Como veremos en la sección 2.10, la función de onda $\psi = e^{ikx}$ representa una partícula libre de momento $p = \hbar k$ y energía $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$ moviéndose

* Ver el segundo volumen de esta serie, *Física: Campos y ondas*, secciones 22.4 a 22.9.

en la dirección $+X$ y la función de onda $\psi = e^{-ikx}$ representa una partícula libre con el mismo momentum y energía pero moviéndose en la dirección opuesta $-X$.

La solución general de la ec. (2.5) se puede escribir como una combinación lineal de las dos soluciones dadas en la ec. (2.6), esto es,

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (2.7)$$

Esta función de onda no corresponde a una dirección preferencial del movimiento, sino que es la superposición de las soluciones para el movimiento en las direcciones $+X$ y $-X$. Esta es la misma situación ya encontrada para las ondas estacionarias. (Recuérdese, por ejemplo, que las ondas estacionarias en una cuerda resultan de la superposición de ondas que se propagan en *ambas* direcciones y se reflejan en los extremos fijos.)

Obsérvese que la ec. (2.6) da

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) = e^{-ikx} \cdot e^{ikx} = 1.$$

El hecho de que $|\psi(x)|^2 = 1$, o sea una constante, significa que la probabilidad de encontrar la partícula es la misma en cualquier punto. En otras palabras, $\psi = e^{\pm ikx}$ describe una situación en la cual carecemos por completo de información acerca de la posición. Esto está de acuerdo con el principio de indeterminación, porque $\psi = e^{\pm ikx}$ describe una partícula cuyo momentum $p = \hbar k$ conocemos con precisión, esto es, $\Delta p = 0$, lo cual requiere que $\Delta x \rightarrow \infty$. Por lo tanto, para obtener información acerca de la posición de una partícula localizada dentro de una región Δx , debemos superponer varias soluciones de la forma Ae^{ikx} con valores diferentes de k (o p), y con amplitud apreciable A en un intervalo Δk (o Δp); esto es: debemos formar un paquete de ondas (ver fig. 1-26). Este paquete de ondas se puede expresar en la forma

$$\psi(x) = \int A(k)e^{ikx} dk, \quad (2.8)$$

donde $A(k)$ es la amplitud correspondiente al momentum $p = \hbar k$.

La ecuación de Schrödinger (2.3) describe una partícula que se mueve en línea recta (movimiento en una sola dimensión). Para una partícula que se mueve en el espacio, la ecuación se convierte en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + E_p(x, y, z)\psi = E\psi, \quad (2.9)$$

que es obviamente una generalización de la ec. (2.3), apareciendo las tres coordenadas en forma simétrica. En el caso de una partícula libre, $E_p(x, y, z) = 0$, y la ecuación se transforma en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = E\psi.$$

La solución de esta ecuación, que describe a una partícula libre con momentum $p = \hbar k$ y energía $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, es

$$\psi = e^{ik \cdot \mathbf{r}}.$$

Dejamos la verificación de esto al estudiante, quien debe recordar que

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = k_x x + k_y y + k_z z \quad \text{y} \quad k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2.$$

EJEMPLO 2.1. Justificación intuitiva de la ecuación de Schrödinger.

Solución: Hemos dicho que en la mecánica cuántica, la función de onda $\psi(x)$ tiene un papel semejante al de la amplitud $\xi(x)$ en una onda estacionaria. Para un movimiento ondulatorio en una sola dirección la amplitud de una onda estacionaria de longitud de onda λ satisface la ecuación diferencial,

$$\frac{d^2 \xi}{dx^2} + k^2 \xi = 0,$$

donde $k = 2\pi/\lambda$ es el número de onda de la onda estacionaria. Recordemos ahora que en la mecánica cuántica $p = \hbar k$, según la ec. (1.45), de modo que podemos esperar que la función de onda $\psi(x)$ satisfaga una ecuación similar de la forma

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{p^2}{\hbar^2} \psi = 0.$$

Cuando escribimos la ecuación de la onda estacionaria suponemos que k es constante y que por consiguiente p deberá ser constante. Esto no es generalmente cierto para una partícula sometida a una fuerza. Sin embargo, usaremos la ecuación anterior aun cuando p no sea constante. Entonces, recordando que la energía total es $E = p^2/2m + E_p(x)$, podemos escribir

$$p^2 = 2m[E - E_p(x)],$$

y de este modo la ecuación anterior se convierte en

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - E_p(x)] \psi = 0,$$

la cual, si hacemos un ligero reagrupamiento de términos, es precisamente la ecuación de Schrödinger (2.3). Debemos enfatizar, sin embargo, que no hemos derivado tal ecuación, sino que, por procedimientos de analogía, hemos dilucidado sus orígenes remontándonos a las relaciones (1.44) ó (1.45).

2.4 Escalón de potencial

Como una primera ilustración del uso de la ec. de Schrödinger, vamos a determinar la función de onda $\psi(x)$ para una partícula que se mueve en una región donde la energía potencial está distribuida como se ilustra en la fig. 2-3; esta distribución se denomina escalón de potencial. Esto es, la energía potencial es cero para $x < 0$ y tiene el valor constante E_0 para $x > 0$. Desde el punto de vista físico ningún potencial presenta tal cambio abrupto o rápido; es más razonable esperar que el cambio sea suave, como se muestra en la línea de trazos.

Por ejemplo, los electrones libres en un metal experimentan este cambio suave de potencial en las vecindades de la superficie del mismo. Sin embargo, el escalón de potencial no físico es matemáticamente más simple y sus resultados son aplicables a los casos reales como una indicación de la situación física. Es necesario considerar separadamente los casos en los cuales $E < E_0$ y $E > E_0$.

(a) $E < E_0$. En este caso, la mecánica clásica nos dice que la partícula no puede estar a la derecha de O , porque entonces la energía cinética $E_k = E - E_0$ sería negativa, lo que es imposible. De este modo $x > 0$ es una región clásicamente prohibida si $E < E_0$. En el caso de los electrones libres en un metal, esto

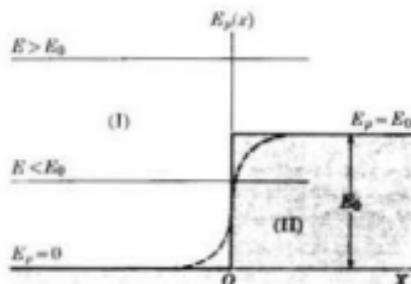


Fig. 2-3. Escalón de potencial. (En ésta y en todas las figuras que siguen las regiones clásicamente prohibidas están sombreadas.)

significa que aquellos electrones con $E < E_0$ no pueden escapar del metal sino que cuando llegan a su superficie son devueltos al interior.

Para obtener $\psi(x)$ para un escalón de potencial debemos escribir la ecuación de Schrödinger para las regiones $x < 0$ (o I) y para $x > 0$ (o II). Para la región (I) en la cual $E_p = 0$, la ec. (2.3) se convierte en

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1 = 0,$$

que es idéntica a la ec. (2.4) para una partícula libre. Su solución general es del tipo dado en la ec. (2.7), o

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (2.10)$$

Tal como está escrita, esta ecuación representa una partícula incidente (e^{ikx}) y una reflejada (e^{-ikx}). Estamos asignando una amplitud diferente a la partícula reflejada para tomar en cuenta cualquier posible cambio del haz incidente como consecuencia de la reflexión en $x = 0$. Para la región (II), en la cual $E_p(x) = E_0$, la ecuación de Schrödinger es

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E - E_0)}{\hbar^2} \psi_2 = 0. \quad (2.11)$$

Cuando $E < E_0$, podemos definir la cantidad positiva $\alpha^2 = 2m(E_0 - E)\hbar^2$, de modo que la ecuación diferencial (2.11) se convierta en

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \alpha^2\psi_2 = 0.$$

La solución de esta ecuación diferencial es una combinación de las funciones $e^{\alpha x}$ y $e^{-\alpha x}$, como podemos verificar por sustitución directa. Pero la función creciente $e^{\alpha x}$ no es aceptable porque sabemos que la amplitud del campo es muy pequeña en la región (II); experimentalmente sabemos que no es probable encontrar una partícula en esa región (recordar nuestra proposición de que, desde el punto de vista clásico, eso es imposible). Por consiguiente, debemos usar sólo la función exponencial decreciente $e^{-\alpha x}$, ó

$$\psi_2(x) = Ce^{-\alpha x}.$$

El hecho de que $\psi_2(x)$ sea diferente de cero significa que hay alguna probabilidad de encontrar la partícula en la región (II). Esto constituye una de las más interesantes peculiaridades que distinguen la mecánica cuántica de la mecánica clásica: en la mecánica cuántica, la región en la cual una partícula puede moverse no tiene por qué ser, en general, de fronteras bien definidas. Sin embargo, como $\psi(x)$ está dada por una exponencial negativa (o decreciente) la probabilidad de encontrar la partícula con $E < E_0$ a la derecha del escalón de potencial (esto es, donde $x > 0$), disminuye rápidamente cuando x crece. En general, por lo tanto, la partícula no puede penetrar mucho dentro de la región prohibida clásicamente.

Podemos determinar las constantes A , B y C aplicando la condición de continuidad del campo de materia o función de onda para $x = 0$, que obviamente es un requisito físico. Esto es, la función de onda debe cambiar suavemente al cruzar el escalón de potencial. Esto requiere que

$$\psi_1 = \psi_2 \quad \text{y} \quad \frac{d\psi_1}{dx} = \frac{d\psi_2}{dx} \quad \text{para } x = 0.$$

Estas condiciones dan $A + B = C$, $ik(A - B) = -\alpha C$, las cuales, a su vez, dan

$$B = \frac{(ik + \alpha)A}{ik - \alpha} \quad \text{y} \quad C = \frac{2ikA}{ik - \alpha},$$

de modo que

$$\psi_1(x) = A \left(e^{ikx} + \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} e^{-ikx} \right), \quad \psi_2(x) = \frac{2ik}{ik - \alpha} A e^{-\alpha x}.$$

En la forma que hemos escrito ψ_1 , la intensidad del campo incidente es $|A|^2$. La intensidad del campo reflejado es

$$|B|^2 = \left| \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} A \right|^2 = \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} \cdot \frac{-ik + \alpha}{-ik - \alpha} |A|^2 = |A|^2.$$

Por consiguiente, ambos campos, el incidente y el reflejado, tienen la misma intensidad. Podemos interpretar este resultado diciendo que todas las partículas que alcanzan el escalón de potencial con $E < E_0$ rebotan, incluyendo aquellas que penetran ligeramente en la región (II). Esta interpretación está de acuerdo con la descripción física del proceso.

La función $\psi_1(x)$ se puede también escribir en la forma equivalente

$$\psi_1(x) = \frac{A}{ik - \alpha} [(ik - \alpha)e^{ikx} + (ik + \alpha)e^{-ikx}]$$

y, recordando que $e^{\pm ikx} = \cos kx + i \sin kx$, obtenemos después de efectuar la multiplicación,

$$\psi_1(x) = \frac{2ik}{ik - \alpha} A \left(\cos kx - \frac{\alpha}{k} \sin kx \right).$$

De este modo, no tomando en cuenta el factor complejo $2ik/(ik - \alpha)$ que multiplica ψ_1 y ψ_2 , podemos representar ambas funciones por las curvas de la fig. 2-4. A mayor energía potencial E_0 , mayor valor para α y más rápido la función ψ_2 tiende a cero para $x > 0$ y para una energía dada E . En el límite en que E_0 se hace muy grande, de modo que α también es muy grande, la función ψ_2 es idé-

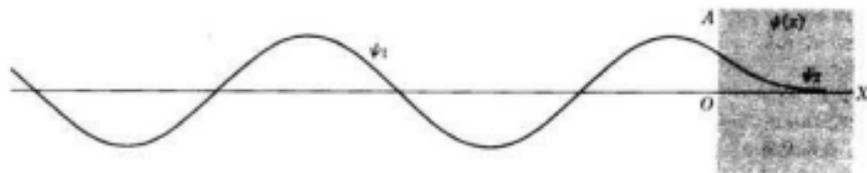


Fig. 2-4. Función de onda para un escalón de potencial de altura E_0 , cuando la energía E de la partícula es menor que E_0 .

ticamente igual a cero ($\psi_2 = 0$), y ninguna partícula puede penetrar en la región clásicamente prohibida de la derecha ($x > 0$). En otras palabras, todas las partículas se reflejan en $x = 0$. En este caso, la expresión anterior para ψ_1 se convierte en

$$\psi_1 = 2iA \sin kx = C \sin kx,$$

como se ilustra en la fig. 2-5. (El estudiante debe comparar esta situación con la de las ondas en una cuerda con un extremo fijo).

(b) $E > E_0$. En este caso, si de nuevo suponemos que las partículas proceden de la izquierda, la descripción clásica sería que todas ellas prosiguen dentro de la región (II), aunque moviéndose con velocidad menor que en la región (I). En $x = 0$ experimentan una repentina desaceleración, porque la energía cinética es menor en (II) que en (I). La situación según la mecánica cuántica es diferente. Para la región (I) la solución está dada también por la ec. (2.10), $\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$,

si suponemos que es posible que algunas partículas se reflejen (hipótesis que verificaremos más adelante). Sin embargo, para la región (II) la solución es diferente, porque ahora $E > E_0$ y debemos definir la cantidad $k'^2 = 2m(E - E_0)\hbar^2$ de modo que la ec. (2.11) se transforma en

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k'^2\psi_2 = 0.$$

La solución es ahora también similar a la solución de la ec. (2.7). En este caso una cosa es cierta: en la región (II) sólo tenemos partículas viajando hacia la derecha, por lo que debemos escribir

$$\psi_2(x) = C e^{ik'x}. \quad (2.12)$$

Aplicando las condiciones de contorno en $x = 0$ para las funciones dadas por las ecs. (2.10) y (2.12), tenemos entonces

$$A + B = C, \quad k(A - B) = k'C,$$

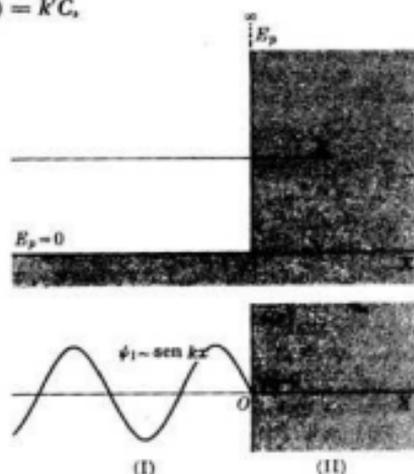


Fig. 2-5. (a) Pared de potencial. La partícula no puede penetrar en la región $x > 0$. (b) Función de onda para una pared de potencial.

cuyas soluciones son $B = (k - k')A/(k + k')$ y $C = 2kA/(k + k')$, de modo que

$$\psi_1(x) = A \left(e^{ikx} + \frac{k - k'}{k + k'} e^{-ikx} \right), \quad \psi_2(x) = \frac{2k}{k + k'} A e^{ik'x}.$$

El hecho de que B no sea cero es una indicación de que algunas partículas se reflejan en $x = 0$, que es otro resultado diferente del predicho por la mecánica clásica. Esta reflexión es una propiedad característica de todos los campos cuando al propagarse encuentran una zona de discontinuidad de las propiedades físicas

del medio. Este comportamiento es bien conocido para el caso de las ondas clásicas y electromagnéticas.

EJEMPLO 2.2. Determinar los coeficientes de reflexión y de transmisión del escalón de potencial para $E > E_0$.

Solución: Llamemos $v = p/m = \hbar k/m$ la velocidad de la partícula en la región (I) y $v' = \hbar k'/m$ la velocidad en la región (II). Recordar que la intensidad de las partículas incidentes (esto es, el número de partículas por unidad de volumen en el haz incidente) está dado por $|A|^2$. Entonces el "flujo" del haz incidente o densidad de corriente de partículas (esto es, el número de partículas que pasan a través de la unidad de área por unidad de tiempo) es $v|A|^2$. El "flujo" del campo reflejado es $v|B|^2$, ya que la velocidad es la misma para el campo reflejado, y el del campo transmitido es $v'|C|^2$. Por consiguiente, los coeficientes de reflexión y de transmisión son

$$R = \frac{v|B|^2}{v|A|^2} = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2,$$

$$T = \frac{v'|C|^2}{v|A|^2} = \frac{k'}{k} \left(\frac{2k}{k + k'} \right)^2 = \frac{4kk'}{(k + k')^2}.$$

R y T son ambos menores que 1, ya que el haz incidente de partículas se divide en los haces reflejado y transmitido. El estudiante debe verificar que $R + T = 1$, según se requiere para la conservación del número de partículas, puesto que el flujo entrante de partículas debe ser igual a la suma del reflejado y el transmitido.

2.5 Partícula en una caja de potencial

Consideremos, como segundo ejemplo, el caso de una partícula obligada a moverse en la región entre $x = 0$ y $x = a$, tal como una molécula de gas en una caja. La molécula se mueve libremente hasta que choca con la pared, que la fuerza a rebotar. Una situación similar existe para un electrón libre en un pedazo de metal, si despreciamos las interacciones del electrón con los iones positivos y si la altura de la barrera de potencial es más grande que la energía cinética del electrón. El electrón puede moverse libremente a través del metal pero no puede escapar de él.

Podemos representar cada una de estas situaciones físicas por el potencial rectangular de la fig. 2-6, que, al igual que el diagrama de energía potencial de la fig. 2-3, es una ilustración muy simplificada de las energías potenciales que ocurren realmente en la naturaleza. Este diagrama simplificado de la energía potencial se denomina *caja de potencial*. Tenemos $E_p(x) = 0$ para $0 < x < a$, ya que la partícula se mueve libremente en esa región. Pero la energía potencial aumenta rápidamente hasta el infinito en $x = 0$ y $x = a$. Esto significa que actúan fuerzas muy intensas sobre la partícula en esos dos puntos, obligándola a invertir su movimiento. Entonces, cualquiera que sea el valor de la energía E , la partícula no puede estar a la izquierda de $x = 0$ o a la derecha de $x = a$. (Recordar la fig. 2-5 y la discusión de la sección 2.4 concerniente a un valor E_0 muy grande). En consecuencia, en estas dos regiones ($x < 0$ y $x > a$), la función de onda es idénticamente igual a cero; esto es, $\psi(x) = 0$. En la región $0 < x < a$ el problema es esencialmente el de una partícula libre. La ecuación de Schrödinger

para la función de onda de una partícula libre es la ec. (2.5). Esto es,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad k^2 = 2mE/\hbar^2.$$

Como la partícula está oscilando entre $x = 0$ y $x = a$, la función de onda (como en el caso del escalón de potencial) está dada por la ec. (2.7), es decir,

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx},$$

la cual indica movimiento en ambas direcciones. Las condiciones de contorno requieren que $\psi(x) = 0$ en $x = 0$ y $x = a$. Entonces $\psi(x=0) = A + B = 0$ o $B = -A$. De modo que

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \operatorname{sen} kx = C \operatorname{sen} kx,$$

donde $C = 2iA$. La condición de contorno en $x = a$ da $\psi(x=a) = C \operatorname{sen} ka = 0$. Como C no puede ser cero, porque no tendríamos entonces función de onda, concluimos que $\operatorname{sen} ka = 0$ o $ka = n\pi$, donde n es un número entero. Despejando k , tenemos

$$k = n\pi/a \quad \text{ó} \quad p = \hbar k = n\pi\hbar/a, \quad (2.13)$$

las cuales dan los posibles valores del momentum $p = \hbar k$ de la partícula.*

La energía de la partícula correspondiente a los valores de k dados por la ec. (2.13) es

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (2.14)$$

o, si $E_1 = \hbar^2 \pi^2 / 2ma^2$ es la energía para $n = 1$, entonces $E = E_1, 4E_1, 9E_1, \dots$. Concluimos entonces que la partícula no puede tener una energía arbitraria, sino sólo aquellos valores dados por la ec. (2.14) y que se muestran en la fig. 2-7; es decir, la energía de la partícula está cuantizada. Esta situación es nueva, ya que en el ejemplo anterior del escalón de potencial no tuvimos que imponer ninguna limitación a la energía.

Esta situación en la cual sólo se permiten ciertos valores de la energía no es una peculiaridad de este problema particular, sino que en general se presenta cada vez que se resuelve la ecuación de Schrödinger (2.3) para una energía potencial que confina a la partícula en una región limitada. (Recordar que en el caso del escalón de potencial la partícula no estaba confinada a una región limitada y por lo tanto la energía no estaba cuantizada). La cuantización de la energía

* El estudiante puede reconocer la extraordinaria similitud entre los métodos matemáticos usados en diferentes problemas de física, tales como la cuerda en vibración con los extremos fijos y el problema que estamos considerando de una partícula en una caja de potencial. La situación física cambia, pero la técnica matemática es la misma. (Esta es la razón por la cual es tan importante dominar algunos conocimientos matemáticos básicos antes de comenzar a estudiar física). Debemos alertar al estudiante, sin embargo, para que no vaya a pensar que siendo el formalismo matemático el mismo, la situación física es semejante. No se debe pensar, por ejemplo, que las ondas de materia son similares a las ondas que se propagan a lo largo de una cuerda.

resulta de que la función de onda está determinada por la energía potencial y las condiciones de contorno. En general, sólo para ciertos valores $E_1, E_2, E_3, \dots, E_n, \dots$ de la energía existe una función de onda $\psi(x)$ aceptable, que satisface las condiciones de contorno del problema físico. Por consiguiente, el formalismo matemático de la mecánica cuántica, como se expresa en la ecuación de Schrödinger, incorpora de un modo natural la cuantización de la energía y la existencia de un conjunto discreto de niveles de energía permitidos. En el problema que esta-

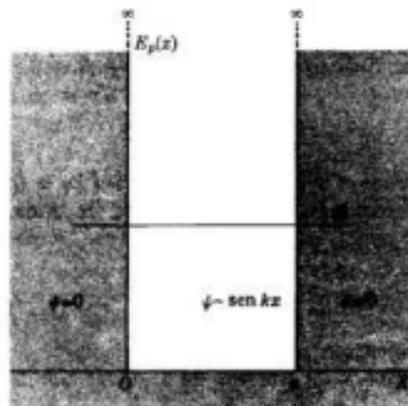


Fig. 2-6. Caja de potencial unidimensional de ancho a .

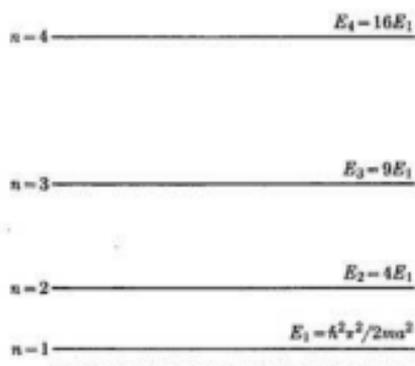


Fig. 2-7. Niveles de energía para una caja de potencial unidimensional.

mos considerando, encontramos que además del hecho de que la energía de la partícula está cuantizada, el momentum de la misma también está cuantizado, con los valores posibles dados por la ec. (2.13). Sin embargo, éste no es el caso general.

Las funciones de onda correspondientes a los valores de k dados por la ec. (2.13) son

$$\psi_n(x) = C \sin(n\pi x/a), \quad (2.15)$$

las cuales, en efecto, son idénticas a las amplitudes permitidas para ondas en una cuerda vibrante con los extremos fijos. Las funciones de onda para los primeros tres niveles de energía están representados en la fig. 2-8(a). En la fig. 2-8(b) la densidad de probabilidad $|\psi_n|^2$ está indicada para los mismos niveles de energía.

Notemos de paso que en este caso simple podríamos haber derivado los valores de la energía dados por la ec. (2.14) usando la analogía con la cuerda vibrante. El estudiante debe recordar que para obtener ondas estacionarias en una cuerda con sus extremos fijos y separados una distancia a , la longitud de onda λ debe tener los valores

$$\frac{1}{2}\lambda = a, \frac{1}{2}a, \frac{1}{3}a, \dots, \frac{1}{n}a \quad \text{ó} \quad \lambda = \frac{2a}{n}.$$

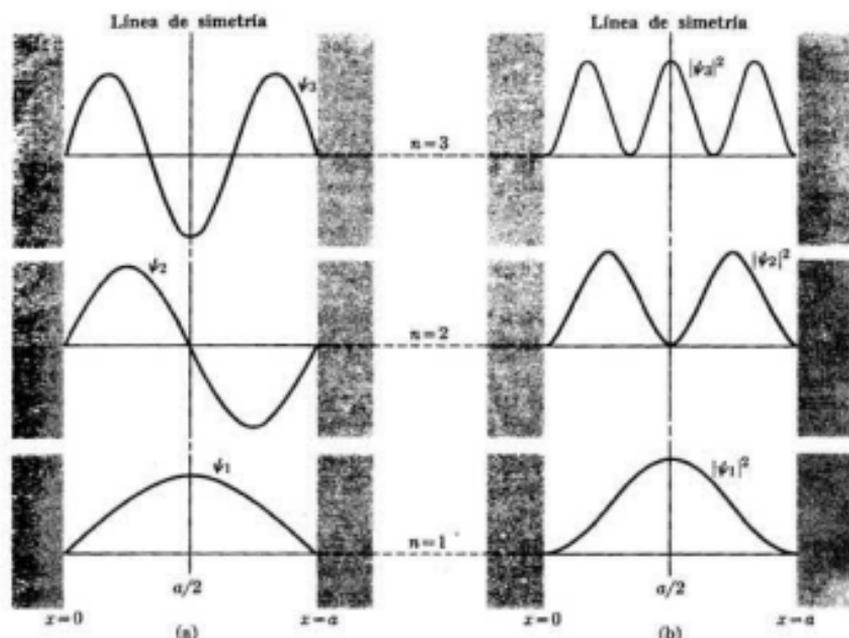


Fig. 2-8. (a) Las tres primeras funciones de onda para una partícula en una caja de potencial. (b) Densidades de probabilidad correspondientes.

Luego, $p = h/\lambda = nh/2a = n\pi\hbar/a$ son los valores posibles del momentum, de acuerdo con la ec. (2.13); por consiguiente, la energía está dada por la ec. (2.14). Sin embargo, para potenciales más complejos, esta analogía no resulta y se requiere una solución de la ecuación de Schrödinger.

Es interesante observar que la energía mínima de una partícula en una caja de potencial es $E_1 = \hbar^2\pi^2/2ma^2$ y no cero, como uno pudiera sospechar. La indeterminación en la posición de la partícula es, evidentemente, $\Delta x \sim a$. La partícula está oscilando con un momentum p ; la indeterminación en el momentum es entonces $\Delta p \sim 2p$. El principio de indeterminación requiere que $\Delta x \Delta p \geq \hbar$. Por consiguiente, $a(2p) \geq \hbar$ o $p \geq \pi\hbar/a$, dando $E \geq E_1$. La existencia de una energía mínima o en el punto cero, como se llama algunas veces a E_1 , es típico de todos los problemas en los cuales una partícula está obligada a moverse en una región limitada.

Para completar nuestra discusión, determinaremos la constante C que aparece en la ec. (2.15). La condición de normalización es en este caso,

$$\int_0^a |\psi_n|^2 dx = 1 \quad \text{ó} \quad C^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = 1$$

porque el alcance de la función va desde 0 hasta a . El valor de la integral es $\frac{1}{2}a$. Luego $C^2(\frac{1}{2}a) = 1$ o $C = \sqrt{2/a}$. Por lo tanto, las funciones de onda normalizadas son

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/a} \operatorname{sen}(n\pi x/a).$$

Otra propiedad interesante de las funciones de onda es que son *ortogonales*; esto es,

$$\int_{\text{Todo el espacio}} \psi_n^* \psi_{n'} dx = 0, \quad n \neq n'. \quad (2.16)$$

Podemos verificar esto en el presente caso como sigue: observando que las funciones $\psi_n(x)$ son reales y por lo tanto $\psi_n^*(x) = \psi_n(x)$, podemos escribir

$$\begin{aligned} \int_0^a \psi_n^* \psi_{n'} dx &= \frac{2}{a} \int_0^a \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{n'\pi x}{a} dx \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a \left[\cos \frac{(n-n')\pi x}{a} - \cos \frac{(n+n')\pi x}{a} \right] dx = 0, \end{aligned}$$

donde hemos usado identidades trigonométricas para $\cos(\alpha \pm \beta)$.

Se puede probar que la propiedad de ortogonalidad es una propiedad general de las soluciones de la ecuación de Schrödinger y no una peculiaridad de las funciones de una caja de potencial (ver sección 2.12).

EJEMPLO 2.3. Obtener los niveles de energía y las funciones de onda para una partícula en el interior de una caja de potencial de lados a , b y c (fig. 2-9).

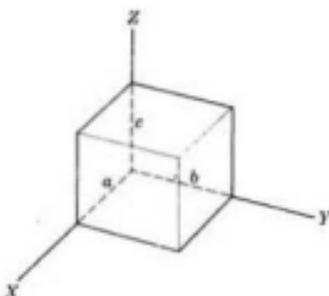


Fig. 2-9. Caja de potencial tridimensional.

Solución: Extendiendo nuestro razonamiento anterior, notamos que las tres componentes p_x , p_y y p_z del momentum de la partícula deben satisfacer relaciones similares a la ec. (2.13) para una caja unidimensional. Luego

$$p_x = \frac{\pi \hbar n_1}{a}, \quad p_y = \frac{\pi \hbar n_2}{b}, \quad p_z = \frac{\pi \hbar n_3}{c},$$

donde n_x , n_y y n_z son números enteros. Por lo tanto

$$E = \frac{1}{2m} p^2 = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \\ = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right). \quad (2.17)$$

Esta expresión da los niveles de energía de una partícula en una caja de potencial tridimensional. Comparando la ec. (2.17) con la ec. (2.15), encontramos que la función de onda se puede expresar por

$$\psi = C \operatorname{sen} \frac{n_x \pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{n_y \pi y}{b} \operatorname{sen} \frac{n_z \pi z}{c}. \quad (2.18)$$

El estudiante verificará, por sustitución directa de la ec. (2.18) en la ecuación de Schrödinger (2.9), con $E_p = 0$, que también resulta el valor dado por la ec. (2.17) para la energía y que $\psi = 0$ en las seis caras de la caja de potencial; ésta fue la misma condición impuesta para una caja de potencial unidimensional. Obsérvese además que la ec. (2.18) es formalmente idéntica a la ecuación de la función amplitud para ondas estacionarias en una cavidad rectangular.

Se presenta una situación importante cuando la caja de potencial es cúbica, esto es, cuando $a = b = c$. Entonces las energías posibles están dadas por

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \kappa^2$$

donde $\kappa^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$ y las correspondientes funciones de onda son

$$\psi = C \operatorname{sen} \frac{\pi n_x x}{a} \operatorname{sen} \frac{\pi n_y y}{a} \operatorname{sen} \frac{\pi n_z z}{a}.$$

Observar que la energía depende sólo de $\kappa^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$. Esto significa que todos los estados correspondientes a los enteros n_x , n_y , n_z que dan el mismo valor para κ tienen la misma energía. Sin embargo, cuando se alteran los números n_x , n_y , n_z sin cambiar el valor de κ , la función de onda también cambia. De este modo un cierto nivel de energía puede estar asociado con varias funciones de onda o estados dinámicos. Cuando sucede esto se dice que existe *degeneración*. El orden de degeneración de un nivel de energía, designado por g , es igual al número de funciones de onda diferentes (o independientes) para dicha energía. Estas están ilustradas para los primeros seis niveles de energía de una caja de potencial cúbica en la tabla 2-1, donde E_1 es igual a $\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$.

TABLA 2-1 Niveles de energía y degeneración en una caja cúbica ($E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$)

Energía	Combinaciones de n_x , n_y , n_z	Degeneración, g
$3E_1$	(1, 1, 1)	1
$6E_1$	(2, 1, 1) (1, 2, 1) (1, 1, 2)	3
$9E_1$	(2, 2, 1) (2, 1, 2) (1, 2, 2)	3
$11E_1$	(3, 1, 1) (1, 3, 1) (1, 1, 3)	3
$12E_1$	(2, 2, 2)	1
$14E_1$	(1, 2, 3) (3, 2, 1) (2, 3, 1) (1, 3, 2) (2, 1, 3) (3, 1, 2)	6

EJEMPLO 2.4. Hallar el número de niveles de energía en un intervalo pequeño de energía dE para una partícula situada en una caja de potencial muy grande.

Solución: Para simplificar consideremos una caja de potencial cúbica de lado a . Entonces, como vimos en el problema anterior, los niveles de energía de una partícula en la caja están dados por

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2),$$

donde n_1, n_2, n_3 son enteros. Notemos que para una caja pequeña (esto es, valores pequeños de a) los niveles de energía están muy espaciados, como se muestra en la fig. 2-10(a). Pero para una caja muy grande, como es el caso de las moléculas de un gas contenidas en un recipiente o los electrones de un metal, los niveles de energía sucesivos están tan juntos que prácticamente forman un espectro continuo, como se ilustra en la fig. 2-10(b). Nuestro problema es encontrar cuántos niveles de

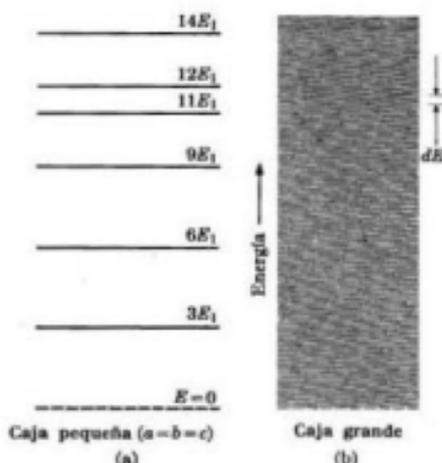


Fig. 2-10. Niveles de energía para (a) una caja de potencial pequeña, (b) una caja de potencial grande.

energía hay en un pequeño intervalo dE de energía cuando la caja de potencial es muy grande. Este problema es muy semejante al de encontrar los modos de oscilación de las ondas encerradas en una cavidad de dimensiones mucho mayores que la longitud de onda.

Introduzcamos las coordenadas ξ, η, ζ en un cierto espacio de representación (fig. 2-11); cada punto de coordenadas $\xi = n_1, \eta = n_2$ y $\zeta = n_3$, representa un nivel de energía y a cada uno de esos puntos corresponden, en este espacio, una celda de volumen unitario. Definamos $k^2 = \xi^2 + \eta^2 + \zeta^2$; entonces el número de puntos que tienen coordenadas enteras y positivas y que yacen sobre la superficie de una esfera de radio k dan los diferentes estados asociados con la energía

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} k^2.$$

Para hallar el número de estados $N(E)$ con energía entre cero y E , debemos determinar el volumen de un octante de la esfera de radio k , ya que sólo se permiten valo-

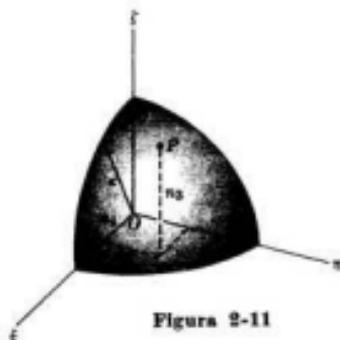


Figura 2-11

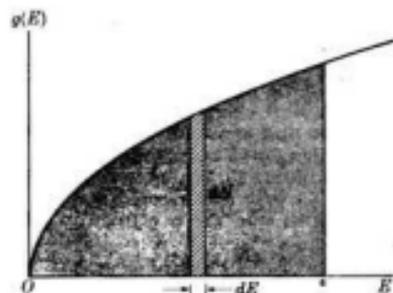


Fig. 2-12. Densidad de niveles de energía para una caja de potencial cúbica grande.

res positivos para n_x , n_y y n_z . Luego, recordando que $\hbar = h/2\pi$, obtenemos

$$N(E) = \frac{1}{8} \pi k^3 = \frac{\pi}{6} V \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{3/2} = \frac{8\pi V}{3\hbar^3} (2m^3)^{1/2} E^{3/2},$$

donde $V = a^3$ es el volumen de la caja de potencial. El número de estados con energía entre E y $E + dE$ se obtiene diferenciando la expresión anterior, lo cual da

$$dN(E) = \frac{4\pi V(2m^3)^{1/2}}{\hbar^3} E^{1/2} dE.$$

Es conveniente escribir $dN(E) = g(E) dE$, de modo que

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{4\pi V(2m^3)^{1/2}}{\hbar^3} E^{1/2} \quad (2.19)$$

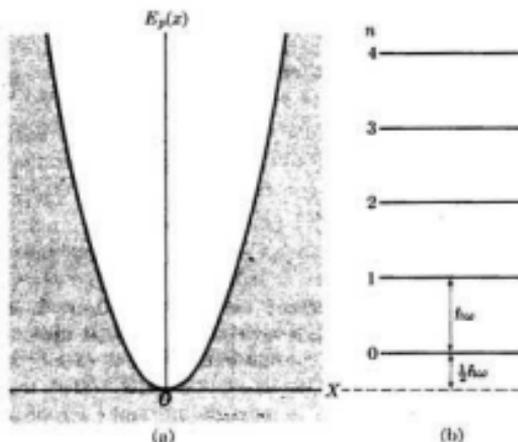


Fig. 2-13. (a) Energía potencial de un oscilador armónico. (b) Niveles de energía.

es el número de estados por unidad de intervalo de energía alrededor del valor E de la energía. El gráfico de $g(E)$ aparece en la fig. 2-12. El área de la cinta de ancho dE da el número correspondiente $dN = g(E) dE$ de estados en tal intervalo de energía. El área bajo la curva desde $E = 0$ hasta $E = \epsilon$ da el número total de estados en ese intervalo de energía. Tendremos oportunidad de usar la ec. (2.19) en varios problemas que aparecen más adelante en este libro.

En algunos casos es más conveniente usar el número de estados que se encuentran dentro del intervalo dp entre p y $p + dp$. Si recordamos que la partícula que está dentro de la caja actúa como una partícula libre, tenemos $E = p^2/2m$. Definiendo $g(p)$ de modo que $dN = g(p) dp = g(E) dE$, tenemos

$$\frac{dN}{dp} = g(p) = g(E) \frac{dE}{dp} = \frac{4\pi V}{h^2} p^2.$$

Esta expresión se aplica igualmente para determinar el número de modos de las ondas longitudinales encerradas en una cavidad de volumen V . En tales casos es más conveniente usar la frecuencia ν . Recordemos que $p = h/\lambda$ y que $\nu = c/\lambda$, donde c es la velocidad de fase de las ondas. En consecuencia si definimos $g(\nu)$ de modo que $g(\nu) d\nu = g(p) dp$, tenemos

$$g(\nu) = g(p) \frac{dp}{d\nu} = \frac{4\pi V}{c^2} \nu^2, \quad (2.20)$$

que es una relación muy útil.

2.6 El oscilador armónico

Un problema físico importante es el del oscilador armónico, para el cual la energía potencial es $E_p = \frac{1}{2}kx^2$, ilustrada en la fig. 2.13. Este problema suministra importante información acerca de las vibraciones atómicas en las moléculas y los sólidos, ya que en primera aproximación, debemos suponer que el movimiento relativo de los átomos en las moléculas y en los sólidos es oscilatorio armónico. La ecuación de Schrödinger es ahora

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi = E\psi.$$

No intentaremos resolver esta ecuación de un modo formal; antes bien daremos sólo los principales resultados. Recordando que para un oscilador armónico la frecuencia angular es $\omega = \sqrt{k/m}$, encontramos que los valores posibles de la energía para los estados estacionarios son

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad (2.21)$$

donde n es cero o un entero positivo; esto es, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Entonces $E_n = \frac{1}{2}\hbar\omega, 3\hbar\omega/2, 5\hbar\omega/2$, etc. Los niveles de energía que se indican en la fig. 2-13 están igualmente separados entre sí por la cantidad $\hbar\omega$ (o $h\nu$, ya que $\hbar = h/2\pi$ y $\omega = 2\pi\nu$).

Un resultado interesante es que la energía mínima del oscilador armónico es $\frac{1}{2}\hbar\omega$ ó $\frac{1}{2}h\nu$. Esta se llama *energía en el punto cero* del oscilador porque corresponde a $n = 0$. Este resultado, así como el análogo obtenido para la caja de

potencial, está íntimamente relacionado con el principio de indeterminación. La energía mínima, desde el punto de vista clásico, corresponde al punto O al fondo de la curva de la energía potencial. Sin embargo, en este punto tenemos $x = 0$ y también $p = 0$. Debido a que no habría oscilaciones en tal situación, podríamos conocer simultáneamente y con absoluta precisión la posición y el momentum de la partícula, lo cual contradice el principio de indeterminación. Por consiguiente, el primer nivel de energía o estado fundamental deberá ser el nivel de mínima energía compatible con el principio de indeterminación. Para ver esto, observemos que para este nivel particular, la amplitud x_0 de las oscilaciones es muy pequeña, y podemos hacer $x_0 \sim \frac{1}{2} \Delta x$. También la amplitud p_0 del cambio de momentum es muy pequeño y podemos poner $p_0 \sim \frac{1}{2} \Delta p$. La energía de un oscilador clásico de amplitud x_0 es $E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2$; notando que $p_0 = m \omega x_0$, tenemos

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 = \frac{1}{2} \omega (x_0) (m \omega x_0) = \frac{1}{2} \omega x_0 p_0 \sim \frac{1}{2} \omega \Delta x \Delta p \sim \frac{1}{2} \hbar \omega \sim \frac{1}{2} \hbar \omega.$$

No se dará aquí la expresión general de las funciones de onda para el oscilador armónico simple (ver problema 2.16). La tabla 2-2 presenta las primeras funciones de onda, correspondiendo ψ_0 al estado fundamental. Estas funciones se ilustran en la fig. 2-14. Obsérvese que ellas no se anulan abruptamente en los límites clásicos de oscilación, indicados por el segmento vertical en cada caso. Antes

TABLA 2-2 Funciones de onda de un oscilador armónico ($\alpha^2 = m\omega/\hbar$)

n	E_n	$\psi_n(x)$
0	$\frac{1}{2}\hbar\omega$	$\psi_0(x) = (\alpha/\sqrt{\pi})^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2}$
1	$\frac{3}{2}\hbar\omega$	$\psi_1(x) = (\alpha/2\sqrt{\pi})^{1/2} 2\alpha x e^{-\alpha^2 x^2/2}$
2	$\frac{5}{2}\hbar\omega$	$\psi_2(x) = (\alpha/8\sqrt{\pi})^{1/2} (4\alpha^2 x^2 - 2) e^{-\alpha^2 x^2/2}$
3	$\frac{7}{2}\hbar\omega$	$\psi_3(x) = (\alpha/48\sqrt{\pi})^{1/2} (8\alpha^2 x^3 - 12\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2}$

bien, se extienden más allá de estos límites, aunque decreciendo muy rápidamente, como encontramos previamente para el caso del escalón de potencial en la sección 2.4 cuando $E < E_0$ (fig. 2-4). Esto significa que la amplitud de un oscilador no está definida precisamente en la mecánica cuántica, como lo está en el caso clásico. En la mecánica cuántica la partícula se puede encontrar en un instante dado en una región en la cual, según el formalismo más rígido de la mecánica clásica, su movimiento se considera imposible. Existen, sin embargo, muchos experimentos que apoyan esta conclusión. (Los discutiremos más adelante). En la fig. 2-15 se indica la densidad de probabilidad $P = |\psi(x)|^2$ para los estados correspondientes a las funciones de onda que se muestra en la fig. 2-14. Nótese que, aunque existe una probabilidad finita de observar la partícula fuera de los límites clásicos de oscilación, esta partícula está principalmente confinada a la región clásica.

Hasta aquí hemos estudiado un oscilador lineal, es decir, un oscilador en una sola dimensión. En el caso general de tres dimensiones, como es el de un átomo

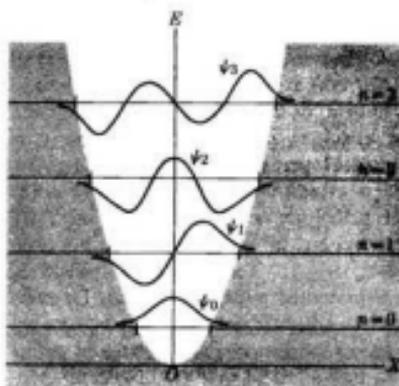


Fig. 2-14. Funciones de onda correspondientes a los cuatro primeros niveles de energía de un oscilador armónico.

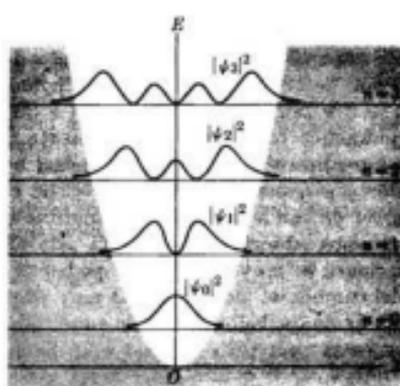


Fig. 2-15. Densidades de probabilidad correspondientes a los cuatro primeros niveles de energía de un oscilador armónico.

en un sólido, los niveles de energía están dados por

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega. \quad (2.22)$$

La sola diferencia es que ahora la energía en el punto cero es $\frac{1}{2}\hbar\omega$ en lugar de $\frac{1}{4}\hbar\omega$, porque debemos agregar las energías en el punto cero para las oscilaciones según los ejes X , Y , Z , que corresponden a una energía de $\frac{1}{2}\hbar\omega$ para cada coordenada.

EJEMPLO 2.5. Discutir los posibles estados estacionarios para la energía potencial que se ilustra en la fig. 2-16, denominada *pozo de potencial*. Esta energía potencial se define por $E_p = -E_0$ para $|x| \leq a/2$ y $E_p = 0$ para $|x| \geq a/2$. Esta forma de energía potencial tiene muchas aplicaciones importantes, especialmente cuando se trata de fuerzas llamadas de corto alcance, lo cual significa que el potencial es constante para distancias mayores que el alcance. Esta situación parece aplicable a las fuerzas nucleares.

Solución: Este problema es equivalente a tener dos escalones de potencial, imagen especular uno de otro, separados la distancia a . Clásicamente hablando, para una energía negativa E (esto es, $E < 0$) la partícula deberá estar confinada dentro del pozo; es decir, la partícula deberá permanecer entre $x = -a/2$ y $x = +a/2$. Sin embargo, teniendo en cuenta nuestros ejemplos previos sospechamos que en mecánica cuántica esto no es cierto. Para la región (I), en la cual $-a/2 \leq x \leq +a/2$, la energía potencial es constante y la partícula es esencialmente libre aunque esté obligada a moverse hacia delante y hacia atrás. De este modo, su amplitud de campo $\psi_0(x)$ debe ser una función armónica del tipo (2.7). En las regiones prohibidas (II) y (III), las amplitudes $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$ del campo deben decrecer exponencialmente, como queda indicado en la fig. 2-4 para un solo escalón de potencial. Por consiguiente, la condición de contorno que se usó para obtener la función de onda de la fig. 2-4 debe aplicarse dos veces, una en $x = -a/2$ y otra en $x = a/2$. Debido

a que estamos imponiendo dos conjuntos de condiciones de contorno, se las puede satisfacer sólo para ciertos valores de la energía. De este modo la energía E de una partícula en un pozo de potencial está cuantizada. No es posible expresar los valores posibles de E en forma cerrada y no serán dados aquí (ver caso similar en el ejemplo 2.6). El número de niveles de energía está limitado, siendo sólo uno, o dos, o tres, etc., dependiendo de la profundidad E_0 y del alcance a del potencial. Esto es, para el caso en el cual $E_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2 / 2m$, hay solamente un nivel posible de energía; para

$$\pi^2 \hbar^2 / 2m < E_0 a^2 < 4\pi^2 \hbar^2 / 2m,$$

hay dos niveles de energía; para

$$4\pi^2 \hbar^2 / 2m < E_0 a^2 < 9\pi^2 \hbar^2 / 2m,$$

hay tres y así sucesivamente.

Las funciones de onda para el estado fundamental y los dos primeros estados excitados están representadas en la fig. 2-17 para el caso en el cual se permiten tres niveles

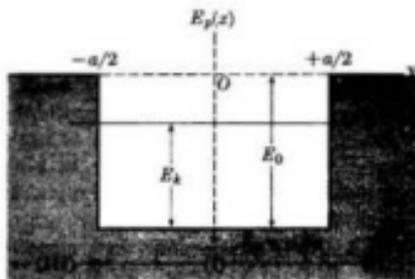


Fig. 2-16. Pozo de potencial rectangular unidimensional de ancho a y profundidad E_0 .

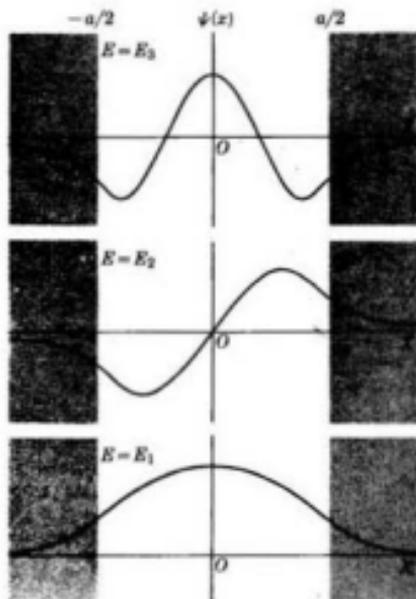


Fig. 2-17. Las tres primeras funciones de onda en un pozo de potencial unidimensional.

de energía. Obsérvese la similitud con las funciones de onda para el oscilador armónico. El estudiante deberá hacer el gráfico de la densidad de probabilidad $P = |\psi|^2$ correspondiente a estos estados; también deberá pensar acerca de lo que ocurre cuando $E > E_0$ y hacer un esquema de las funciones de onda y de las densidades de probabilidad. En este caso, todos los valores de la energía son aceptables y ésta no está cuantizada.

2.7 Niveles de energía y funciones de onda en general

La discusión sobre el escalón de potencial, la caja de potencial, el oscilador armónico y el pozo de potencial sugiere la naturaleza general de los estados y funciones de onda estacionarios. La fig. 2-18(a) muestra una energía potencial $E_p(x)$ similar a la que se encuentra en un problema de fuerza central o en una molécula diatómica. A valores grandes de x , la energía potencial se hace constante e igual a un valor escogido como cero de la energía, que es la convención más usual. La energía potencial disminuye al disminuir la distancia, indicando una fuerza atractiva. En M la energía potencial es mínima e igual a $-E_0$; la distancia correspondiente r_0 desde O es la separación clásica de equilibrio. Si disminuimos aún más la distancia, la energía potencial aumenta rápidamente, indicando una fuerza de repulsión.

Para valores negativos de la energía el movimiento es clásicamente limitado. Por ejemplo, cuando la partícula tiene una energía E , el movimiento clásico es

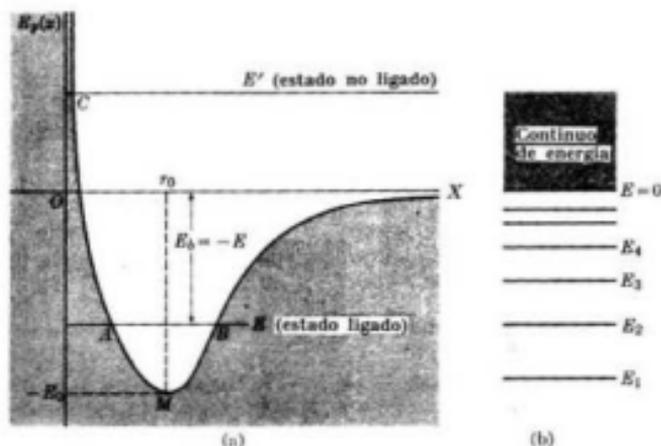


Fig. 2-18. (a) Curva general de energía potencial correspondiente a repulsión fuerte para pequeños valores de x e interacción despreciable para valores grandes de x . (b) Niveles de energía correspondientes a la energía potencial ilustrada en (a).

oscilatorio entre A y B . Estos puntos se denominan *límites clásicos de oscilación*. Para valores positivos de la energía ($E > 0$) tales como E' , una partícula proveniente de la derecha, al llegar a C es detenida y rebota, retrocediendo al infinito. Esta es la razón por la cual C se denomina *punto clásico de retorno*.

En la mecánica cuántica la descripción es fundamentalmente la misma, aunque aparecen ciertas características nuevas: (a) Los estados ligados ocurren sólo para ciertos valores negativos de la energía, de modo que para $E < 0$ hay un *espectro discreto* de niveles o estados de energía. Esto es cierto porque para $E < 0$, el

movimiento está determinado por los límites clásicos de oscilación, imponiendo así dos condiciones de contorno sobre las funciones de onda. Por lo tanto, sólo existen soluciones apropiadas de la ecuación de Schrödinger para ciertas energías. Esta es la misma situación encontrada, por ejemplo, en el caso de una caja de potencial. (b) Existen estados no ligados para todos los valores positivos de la energía; decimos entonces que para $E > 0$ hay un *espectro continuo* de niveles o estados de energía. La razón de esto es que cuando $E > 0$, el movimiento está limitado sólo en un punto, el punto clásico de retorno, de modo que sólo se requiere una condición de contorno. Existe entonces suficiente flexibilidad para permitir una solución de la ecuación de Schrödinger con una constante arbitraria: la energía. Esta situación se ha presentado ya en el caso de un escalón de potencial. Físicamente, la situación ocurre porque podemos siempre fijar arbitrariamente la energía de la partícula cuando ésta se encuentra a gran distancia, como hacemos, por ejemplo, cuando una partícula cargada se acelera en una máquina y se lanza contra un núcleo que sirve de blanco; o cuando un átomo choca con otro en un gas. En la fig. 2-18b se muestra esquemáticamente los espectros de energía continuo y discreto. Sin embargo, en el caso de un potencial como el que se muestra en la fig. 2-13, correspondiente al oscilador armónico, no hay un espectro continuo de energía y todos los niveles son discretos.

Cuando la partícula se encuentra en un estado ligado de energía negativa E , la mínima energía que se debe suministrar a la misma para llevarla a una gran distancia es $E_0 = -E$. Esta se llama *energía de enlace* o *de ligadura* de la partícula en aquel estado. (Algunas veces, cuando nos estamos refiriendo al estado fundamental de una molécula diatómica, la llamamos *energía de disociación*, porque es la energía mínima necesaria para separar los dos átomos cuando la molécula está en el estado fundamental. En el caso de un electrón en un átomo o molécula, la llamamos también *energía de ionización*.)

Para $E < 0$, las funciones de onda se asemejan a las del oscilador armónico, excepto que sus formas exactas dependen de la energía potencial $E_p(x)$. La fig. 2-19 muestra la función de onda para un nivel negativo de energía ($E < 0$) del espectro discreto (un estado ligado) y la función de onda para un nivel positivo de energía ($E > 0$) del espectro continuo (un estado no ligado). En ambos casos las funciones de onda se extienden más allá de los límites clásicos del movimiento, pero disminuyen muy rápidamente fuera de esos límites. En particular, para valores grandes de x , la función de onda de un estado de energía positiva o estado no ligado se parece a la de una partícula libre y tiene la forma asintótica dada por la ec. (2.7)

$$\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} Ae^{ikx} + Be^{-ikx},$$

ya que debe representar ambas partículas: la entrante y la saliente o reflejada.

EJEMPLO 2.6. Estudiar los niveles de energía y funciones de onda para la energía potencial descrita por la curva que se ilustra en la fig. 2-20. En $x = 0$ la energía potencial se hace infinita. Para $0 < x < a$, la energía potencial tiene el valor constante $E = -E_0$ y para $x > a$, $E = 0$. Resulta así una idealización rectangular de la curva de energía potencial de la fig. 2-18.

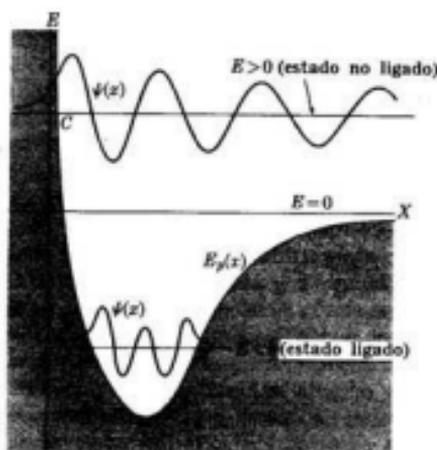


Fig. 2-19. Forma de las funciones de onda para estados ligados y no ligados correspondientes a la energía potencial que se muestra en la fig. 2-18(a).

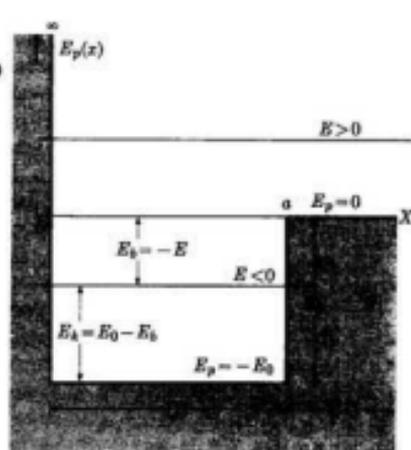


Fig. 2-20. Pozo de potencial rectangular limitado en $x = 0$ por una pared de potencial.

Solución: Consideremos primero el caso $E < 0$, que corresponde a estados ligados. En tal caso la partícula está obligada a moverse clásicamente en la región entre $x = 0$ y $x = a$, o región (I). La energía $E_0 = -E$ es entonces la energía de disociación o de enlace; esto es, la energía mínima requerida para sacar la partícula del pozo de potencial. La ecuación de Schrödinger (2.3) para esa región, ya que $E_p(x) = -E_0$, se convierte en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - E_0\psi = E\psi \quad \text{ó} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + k_1^2\psi = 0,$$

donde $k_1^2 = 2m(E_0 + E)/\hbar^2 = 2m(E_0 - E_0)/\hbar^2$, y $p_1 = \hbar k_1$ es el momentum en el interior del pozo. La solución de esta ecuación está dada por la ec. (2.7) ó

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}.$$

Recordando el caso de la caja de potencial, debemos imponer que $\psi_1 = 0$ para $x = 0$; esto significa que $A + B = 0$ o $B = -A$. Luego

$$\psi_1(x) = A(e^{ik_1x} - e^{-ik_1x}) = C \sin k_1x,$$

donde $C = 2iA$. En la región (II), correspondiente a $x > a$, la ecuación de Schrödinger con $E_p(x) = 0$ es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \text{ó} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha^2\psi = 0,$$

donde

$$\alpha^2 = -2mE/\hbar^2 = 2mE_0/\hbar^2.$$

Si recordamos la discusión del escalón de potencial hecha en la sección 2.4, vemos que la solución de esta ecuación es

$$\psi_2(x) = De^{-\alpha x}.$$

A continuación debemos satisfacer las condiciones de continuidad de la función de onda en $x = a$; esto es,

$$\psi_1 = \psi_2 \quad \text{y} \quad d\psi_1/dx = d\psi_2/dx.$$

las cuales dan

$$C \operatorname{sen} k_1 a = D e^{-\alpha a} \quad \text{y} \quad k_1 C \cos k_1 a = -\alpha D e^{-\alpha a}.$$

Dividiendo miembro a miembro estas dos ecuaciones para eliminar las constantes C y D , resulta

$$k_1 \cotg k_1 a = -\alpha \quad (2.23)$$

o, introduciendo las expresiones para k_1 y α , tenemos

$$[2m(E_0 - E_b)/\hbar]^2 \cotg [2m(E_0 - E_b)/\hbar]^2 a = -[2mE_b/\hbar]^2.$$

En esta ecuación la única cantidad arbitraria es la energía E_b . Expresa entonces una condición para los posibles niveles de energía en el interior del pozo. Sin embargo, como esta ecuación es trascendente, es difícil obtener E_b en una forma cerrada, como se hizo para la caja de potencial. La situación es muy similar a la descrita anteriormente en relación con el pozo cuadrado (ejemplo 2.5). Luego, pueden existir ninguno, uno, dos, tres, etc., niveles posibles de energía. Se puede verificar que si

$$E_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2 / 8m,$$

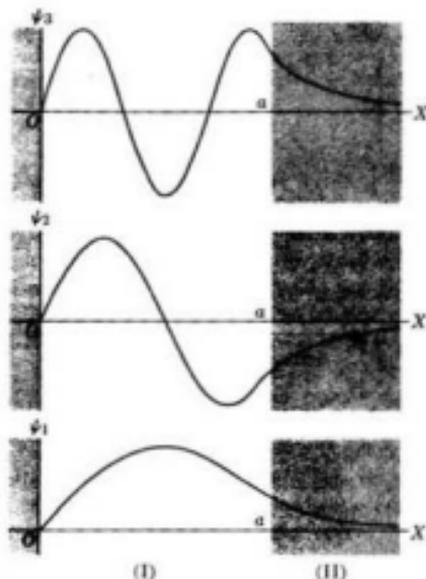
no hay estado ligado; si

$$\pi^2 \hbar^2 / 8m < E_0 a^2 < 9\pi^2 \hbar^2 / 8m,$$

hay un solo estado ligado; si

$$9\pi^2 \hbar^2 / 8m < E_0 a^2 < 25\pi^2 \hbar^2 / 8m,$$

Fig. 2-21. Funciones de onda correspondientes al pozo de potencial que se ilustra en la fig. 2-20.



(I)

(II)

hay dos estados ligados, y así sucesivamente. Por lo tanto, el número de niveles de energía ligados depende del valor del producto $E_0 a^2$ o energía \times (alcance)².

Las funciones de onda para el caso en el cual hay tres estados ligados se ilustra en la fig. 2-21. El estudiante debe comparar estas funciones de onda con las dadas para la energía potencial que se muestra en la fig. 2-18. Este ejemplo, relativamente simple, puede ayudarle entonces a comprender mejor lo que hemos discutido en relación con la energía potencial más realista de la fig. 2-18.

Consideremos a continuación los estados positivos de energía (esto es cuando $E > 0$). Observamos que éstos no corresponden a estados ligados, ya que una partícula puede ahora moverse entre $x = 0$ y $x = \infty$. Usando de nuevo $k_1^2 = 2m(E_0 +$

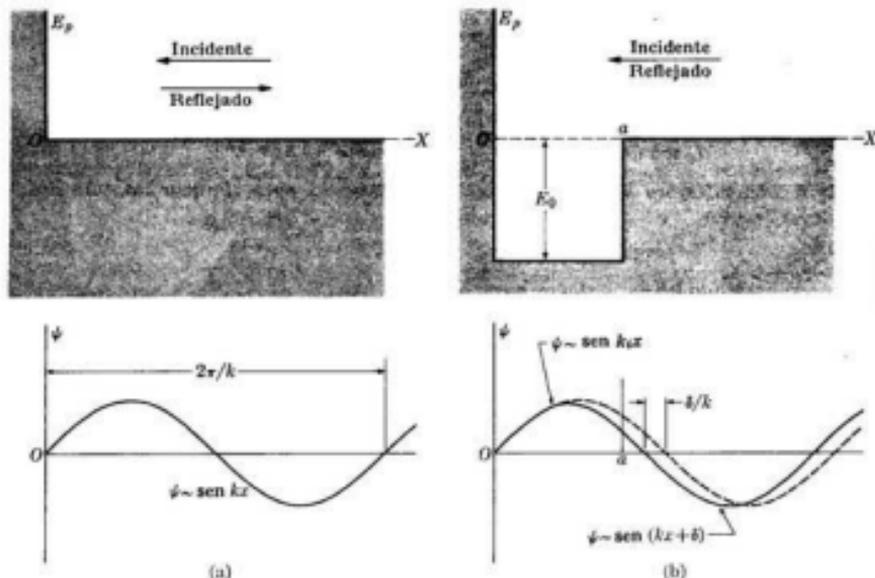
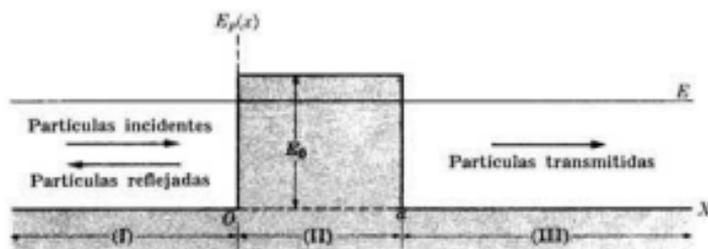


Fig. 2-22. Origen del desfasaje.

Fig. 2-25. Barrera de potencial rectangular de ancho a y altura E_p .

$+ E)/\hbar^2$, de modo que $p_1 = \hbar k_1$ es el momentum en el interior del pozo, podemos escribir la solución para $x < a$ como anteriormente, esto es,

$$\psi_1(x) = C \operatorname{sen} k_1 x.$$

Para $x > a$, donde $E_p = 0$, la ecuación de Schrödinger es ahora

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi \quad \text{ó} \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0,$$

donde $k^2 = 2mE/\hbar^2$ y $p = \hbar k$ es el momentum de la partícula libre fuera del pozo. La solución de esta ecuación es del tipo dado por la ec. (2.7). Sin embargo, en este

caso conviene más escribirla en la forma equivalente *

$$\psi_2(x) = D \operatorname{sen}(kx + \delta).$$

La cantidad δ se llama *defasaje*; su significado físico será explicado en breve. Aplicando las condiciones de continuidad de la función de onda en $x = a$, obtenemos

$$k_i \cotg ka = k \cotg(ka + \delta). \quad (2.24)$$

Esta ecuación difiere de la (2.23) en que ésta contiene, entre otras cosas, una cantidad arbitraria δ , el defasaje. Por lo tanto, podemos satisfacer siempre la ecuación (2.24) para cualquier energía E (o momentum $\hbar k$) escogiendo apropiadamente el defasaje δ ; en consecuencia, el espectro de la energía positiva es continuo, como era de esperar.

Podemos comprender el origen del defasaje de la siguiente manera. Si la energía potencial fuera del tipo considerado en la fig. 2-5, y que se muestra (invertido) en la fig. 2-22(a), la función de onda habría sido $\psi \sim \operatorname{sen} kx \sim e^{ikx} - e^{-ikx}$ que contiene el haz de partículas incidente y el reflejado, ambos con una longitud de onda $\lambda = 2\pi/k$. Pero cuando introducimos el pozo de potencial (fig. 2-22b), la función de onda se distorsiona en la región $0 \leq x \leq a$, y aunque la longitud de onda para $x > a$ es todavía $2\pi/k$, la curva $\operatorname{sen} kx$ debe moverse a lo largo del eje X la distancia δ/k de modo que en $x = a$ se una suavemente con la función de onda en el interior del pozo (que tiene una longitud de onda diferente $\lambda_1 = 2\pi/k_1$). En otras palabras, una modificación local de la energía potencial entre $x = 0$ y $x = a$ afecta la función entera. Esto se expresa mediante el defasaje δ para $x > a$.

2.8 Penetración a través de una barrera de potencial

El hecho de que una función de onda pueda extenderse más allá de los límites clásicos del movimiento da lugar a un importante fenómeno llamado *penetración de una barrera de potencial*. Consideremos el potencial representado en la fig. 2-23. Este consta de dos escalones de potencial, pero en el orden inverso al pozo de potencial de la fig. 2-16. Se le denomina *barrera de potencial*. Consideraremos, como anteriormente, los casos $E < E_0$ y $E > E_0$ por separado. La mecánica clásica requiere que una partícula proveniente de la izquierda con una energía $E < E_0$ se refleje en $x = 0$, tal como se discutió en la sección 2.4. Sin embargo, al considerar el problema de acuerdo con la mecánica cuántica para obtener la solución de la ecuación de Schrödinger en las regiones (I), (II) y (III), encontramos que la función de onda tiene, en general, el aspecto que se ilustra en la fig. 2-24. Sus componentes son de la forma

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \psi_2 = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}, \quad \psi_3 = A'e^{ikx},$$

donde k y α son las mismas que las de la sección 2.4, esto es, $k^2 = 2mE/\hbar^2$ y $\alpha^2 = 2m(E_0 - E)/\hbar^2$. La función de onda ψ_1 , como en el caso anterior, contiene

* Podemos ver que las dos formas son equivalentes si recordamos que

$$e^{\pm ikx} = \cos kx \pm i \operatorname{sen} kx.$$

Entonces

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = (A + B) \cos kx + i(A - B) \operatorname{sen} kx \\ = C \operatorname{sen}(kx + \delta),$$

donde $\operatorname{tg} \delta = (A + B)/i(A - B)$.

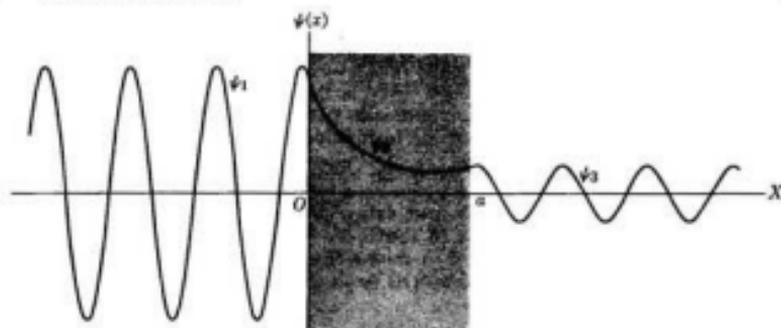


Fig. 2-24. Función de onda correspondiente a la barrera de potencial de la fig. 2-23 para una energía menor que la altura de la barrera.

las partículas incidentes y reflejadas; ψ_2 decrece exponencialmente, pero además debe contener la exponencial positiva, ya que el potencial se extiende solamente a valores por encima de $x = a$ y la exponencial positiva no está necesariamente excluida, como lo fue en el caso del potencial escalonado. Debido a que ψ_2 no ha alcanzado el valor cero en $x = a$, la función continúa en la región (III) con la forma oscilante ψ_3 , que representa las partículas transmitidas, que tienen la misma energía que las incidentes, pero una amplitud A' que, en general, es diferente de A . Como ψ_3 no es cero, hay una probabilidad finita de encontrar la partícula en la región (III). En otras palabras, *es posible que una partícula atraviese la barrera de potencial aún cuando su energía cinética sea menor que la altura de la barrera.*

Cuando $E > E_0$, la descripción clásica del proceso indica que todas las partículas deberán cruzar la barrera de potencial y alcanzar el lado derecho. Sin embargo, en mecánica cuántica, por la misma razón que en el caso del escalón de

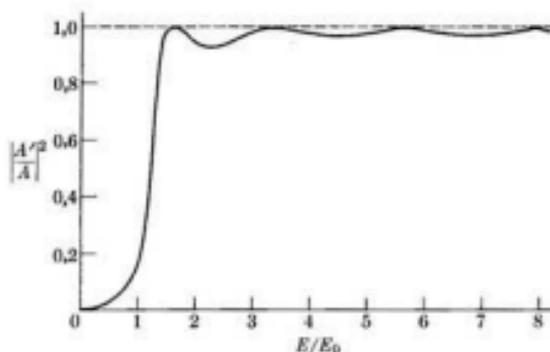


Fig. 2-25. Coeficiente de transmisión de una barrera de potencial rectangular.

potencial, algunas partículas se reflejan en $x = 0$ y $x = a$. Por consiguiente, las funciones de onda en las tres regiones son ahora

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \psi_2 = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}, \quad \psi_3 = A'e^{ikx},$$

donde $k'^2 = 2m(E - E_0)/\hbar^2$ y $\hbar k$ es el momentum de las partículas mientras están cruzando la barrera de potencial.

Aplicando las condiciones de contorno en $x = 0$ y $x = a$, podemos determinar los coeficientes B , C , D y A' en función de A en los casos $E < E_0$ y $E > E_0$. La transparencia de la barrera se define como $T = |A'|^2/|A|^2$. Esta varía con la energía E , como se muestra en la fig. 2.25. Obsérvese que para $E > E_0$ hay transmisión perfecta ($T = 1$) para ciertos valores de E/E_0 , que corresponde a una longitud de onda de la partícula mientras está cruzando la barrera de potencial, dada por $\lambda' = 2\pi/k'$, que es igual a un múltiplo de $2a$. Esto puede considerarse como un efecto de resonancia.

La fig. 2-26 ilustra un caso más general. De acuerdo a la mecánica clásica si la partícula tiene una energía E , puede moverse entre A y B o entre C y D . Si la partícula estaba inicialmente entre A y B , nunca se encontrará entre C

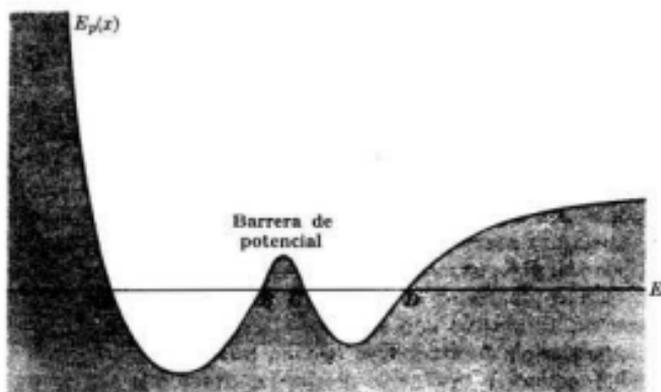


Fig. 2-26. Caso general de una barrera de potencial.

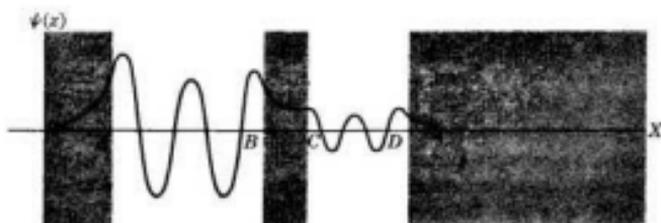


Fig. 2-27. Forma de la función de onda en el caso general de una barrera de potencial.

y D , y reciprocamente. Pero una vez más en mecánica cuántica la lógica es diferente. Cuando resolvemos la ecuación de Schrödinger para este potencial, obtenemos una función de onda ψ , como se muestra en la fig. 2-27. Esperamos, teniendo en cuenta nuestros ejemplos previos, que entre A y B la función de onda sea oscilatoria, pero a la derecha de B debe variar exponencialmente. Sin embargo en C la función de onda tiene aún un valor finito. Entre C y D , que es clásicamente una región permitida, la función de onda se hace oscilatoria nuevamente. A la derecha de D ésta decrece una vez más exponencialmente. Por lo tanto concluimos que hay una probabilidad finita de que la partícula se encuentre entre A y B o entre C y D . En otras palabras, si la partícula está inicialmente entre A y B , un poco más tarde puede hallarse entre C y D , y reciprocamente. Para que esto suceda, la partícula debe penetrar la barrera de potencial entre B y C .

La penetración de una barrera de potencial no tiene analogía en mecánica clásica porque esto corresponde a una situación en la cual la partícula tiene energía cinética negativa o momentum imaginario. En mecánica cuántica, sin embargo, esto no debe presentar ninguna dificultad, ya que no hay que insistir en usar la lógica de la mecánica clásica en los dominios del átomo. La penetración de una barrera se observa en muchas situaciones, de las cuales discutiremos dos.

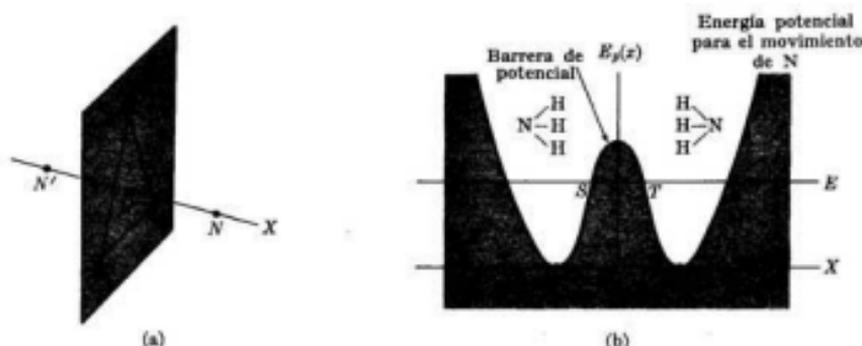


Fig. 2-28. (a) Movimiento de inversión del átomo de nitrógeno en la molécula de amoníaco. (b) Energía potencial para el movimiento de inversión.

La molécula de amoníaco, NH_3 , es una pirámide con el átomo N en el vértice y los tres átomos H en la base, como se muestra en la fig. 2-28(a). Obviamente el átomo N puede estar en una de las dos posiciones simétricas de equilibrio N y N' a cada lado de la base de la pirámide. Como ambas posiciones N y N' deben ser de equilibrio, la energía potencial para el movimiento del átomo de N según el eje de la pirámide debe tener dos mínimos y la forma simétrica que se indica en la fig. 2-28(b), con una barrera de potencial entre N y N' . Si el átomo de N está inicialmente en N , puede eventualmente colarse a través de la barrera de potencial y aparecer en N' . Si la energía de este movimiento es menor que la altura de la barrera de potencial, tal como el nivel de energía E en la figura,

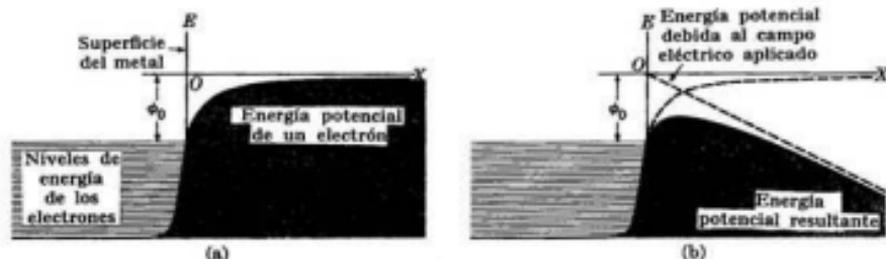


Fig. 2-29. (a) Energía potencial de un electrón en un metal en ausencia de un campo eléctrico externo. (b) Energía potencial resultante cuando se aplica un campo eléctrico externo.

el movimiento del átomo N está compuesto de un movimiento oscilatorio entre R y S o entre T y U , dependiendo del lado del plano sobre el cual se encuentra, y de un movimiento oscilatorio más lento entre las dos regiones clásicas pasando a través de la barrera de potencial. La frecuencia de este segundo movimiento es $2,3786 \times 10^{16}$ Hz para el estado fundamental del NH_3 . Este segundo tipo de movimiento es el que se usa para definir un patrón de tiempo con relojes atómicos.

Como otro ejemplo, consideremos el caso de los electrones en un metal. La energía potencial de uno de éstos se muestra en la fig. 2-29(a). Para que un electrón que está en el máximo nivel de energía escape del metal, se le debe suministrar una cantidad de energía por lo menos igual a ϕ_0 . Esta cantidad de energía puede ser provista por calentamiento del metal o por la absorción de un fotón (como ocurre en el efecto fotoeléctrico). Pero el electrón también puede escapar si se aplica un campo eléctrico externo cuyo potencial se indica con la línea recta de trazos en la fig. 2-29(b). La energía potencial resultante se ilustra con la línea continua de la fig. 2-29(b) y es equivalente a una barrera de potencial. Los electrones más energéticos del metal pueden salir a través de la barrera, resultando lo que se conoce con el nombre de *emisión electrónica de campo*. En la sección 8.3 discutiremos otro efecto de penetración de barreras, la emisión de partículas alfa por los núcleos.

EJEMPLO 2.7. Análisis de las funciones de onda y de los niveles de energía en el movimiento de inversión del nitrógeno en la molécula de NH_3 .

Solución: Para mostrar cuánta información útil podemos deducir de un análisis cualitativo de las funciones de onda, estudiaremos con más detalle el movimiento de inversión del nitrógeno en la molécula de NH_3 . La fig. 2-30 reproduce la energía potencial que se mostró en la fig. 2-28(b). Miremos esta energía potencial como si fuera la energía potencial de un oscilador armónico simple con una giba o barrera en el centro. El efecto de esta barrera central es una perturbación que afecta el movimiento de la partícula, sobre todo cuando pasa por el centro. Como se indicó anteriormente, este efecto — para partículas con energía tal como E , menor que la altura de la barrera de potencial — hace que disminuya la probabilidad de encontrar la partícula en la región central. Podemos traducir esto al lenguaje de la mecánica

Fig. 2-30. Energía potencial para el movimiento de inversión en el NH_3 .

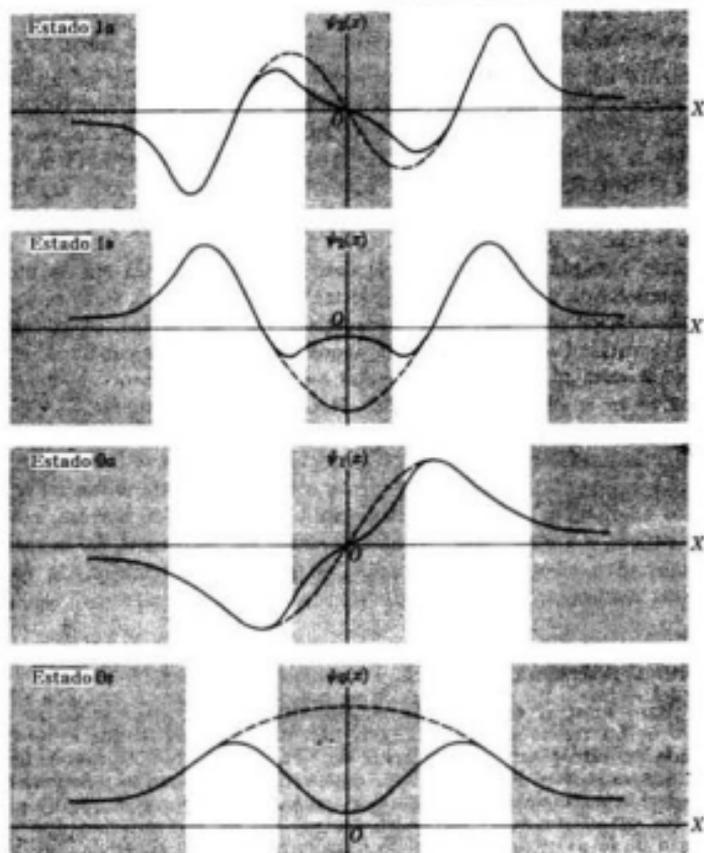
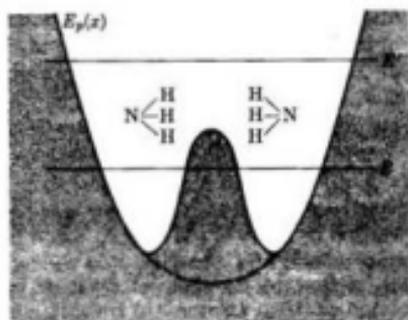


Fig. 2-31. Funciones de onda correspondientes a los cuatro niveles de energía más bajos del movimiento de inversión en el NH_3 .

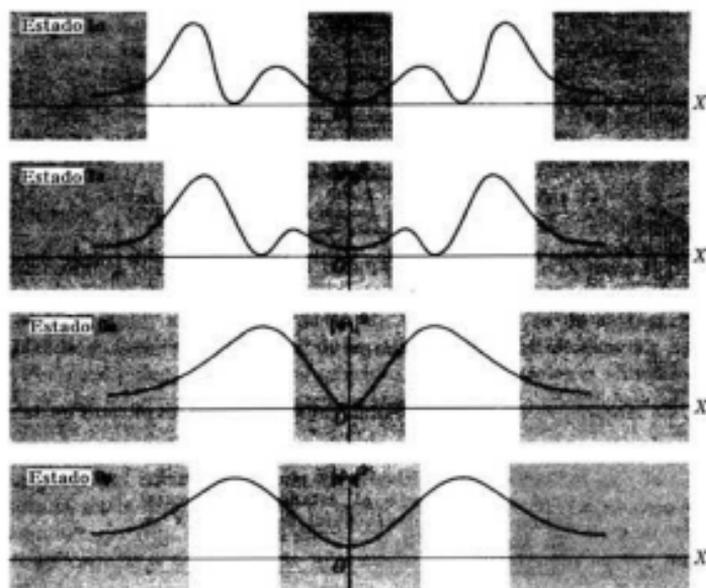


Fig. 2-32. Densidades de probabilidad correspondientes a las funciones de onda que se muestran en la fig. 2-31.

cuántica diciendo que la barrera distorsiona las funciones de onda del potencial del oscilador armónico en la región central, disminuyendo sus amplitudes en esa región. En la fig. 2-31 se muestra con líneas de trazos las primeras cuatro funciones de onda para el potencial oscilador armónico sin la barrera. Las funciones de onda reales, cuando se toma en consideración el efecto de la barrera central, están representadas por medio de líneas llenas. La fig. 2-32 indica las correspondientes densidades de probabilidad, $|\psi(x)|^2$.

Un análisis de estas densidades de probabilidad muestra que $|\psi_0|^2$ y $|\psi_1|^2$ son casi idénticas. La diferencia principal es que $|\psi_0|^2$ representa una probabilidad de encontrar la partícula en el interior de la barrera de potencial, ligeramente mayor que $|\psi_1|^2$. Por consiguiente, las energías E_0 y E_1 de los correspondientes estados estacionarios deben ser casi iguales. Lo mismo sucede para $|\psi_2|^2$ y $|\psi_3|^2$, aunque la similitud de estas dos funciones de onda no es tan estrecha como en el caso de ψ_0 y ψ_1 . De este modo los niveles de energía E_2 y E_3 deben ser también muy parecidos, pero no tanto como lo son E_0 y E_1 . No obstante, para energías mayores que la altura de la barrera central (tal como E' en la fig. 2-30), el efecto de la barrera se reduce grandemente y las funciones de onda y los niveles de energía son esencialmente los mismos de los del oscilador armónico. La fig. 2-33 muestra los niveles de energía; los números corresponden a los niveles de energía de la molécula de NH_3 . La altura de la barrera de potencial en el NH_3 es aproximadamente 0,254 eV. La figura muestra además que la separación entre el par de niveles $0s$ y $0a$, correspondientes a las funciones de onda ψ_0 y ψ_1 , o entre el par de niveles $1s$ y $1a$, correspondientes a las funciones de onda ψ_2 y ψ_3 , es muy pequeña comparada con la separación entre los dos pares de niveles de energía. La tabla 2-3 da los primeros ocho niveles de energía

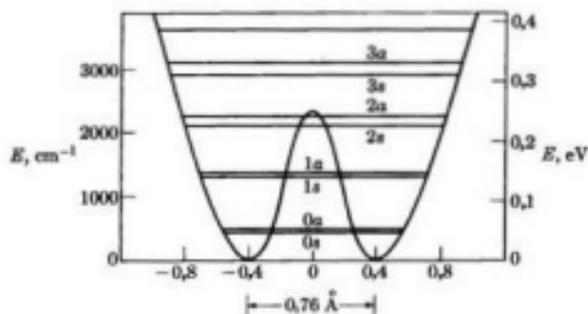


Fig. 2-33. Niveles de energía para el movimiento de inversión en el NH_3 .

del NH_3 . El símbolo usado para designar cada nivel será explicado en la próxima sección.

TABLA 2-3 Niveles de energía vibracional con respecto al estado fundamental para el movimiento axial del átomo N en la molécula NH_3

Nivel	cm^{-1} *	eV
3a	2861	0,3547
3s	2380	0,2950
2a	1910	0,2367
2s	1597,4	0,1980
1a	986,00	0,1222
1s	950,16	0,1178
0a	0,79	$9,84 \times 10^{-4}$
0s	0,00	0,

* La unidad cm^{-1} se definirá en la sección 3.3. Es equivalente a $1 \text{ eV} = 8067,5 \text{ cm}^{-1}$.

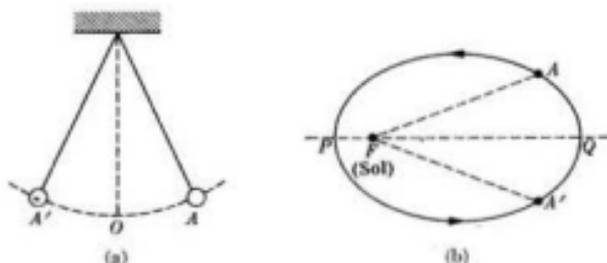


Fig. 2-34. Movimientos simétricos: (a) péndulo, (b) órbita planetaria.

El resultado más importante que se debe deducir de este ejemplo es que si tenemos dos pozos de potencial separados por una barrera de potencial, los niveles de energía más bajos se agrupan en pares estrechamente relacionados, o *dobletes*. Si tenemos tres pozos en lugar de dos, tendremos tripletes de niveles de energía asociados íntimamente, y así sucesivamente. Como veremos más adelante (en los capítulos 5 y 6) esto es muy importante en el estudio de moléculas y sólidos.

2.9 Simetría, funciones de onda y paridad

Las consideraciones de simetría son a menudo una gran ayuda para el físico que desea obtener cierta clase de información útil sin tener que recurrir a un cálculo efectivo. Por ejemplo, en el movimiento de un péndulo (o en cualquier movimiento armónico simple), la posición de equilibrio O (fig. 2-34a) es un centro de simetría. Por consiguiente, cuando el péndulo está en posiciones simétricas tales como A y A' , su velocidad y aceleración deben ser iguales en módulo; el tiempo que se requiere para moverse entre A y O debe ser el mismo que el que emplea para moverse entre A' y O ; la variación de velocidad, o de energía cinética, o de energía potencial en ir desde A hasta O deberá ser la misma que la variación experimentada en ir desde A' hasta O , y así sucesivamente. En el caso del movimiento planetario (fig. 2-34b), la línea PQ es un eje de simetría de la órbita y por consiguiente la velocidad y la aceleración de un planeta en las posiciones

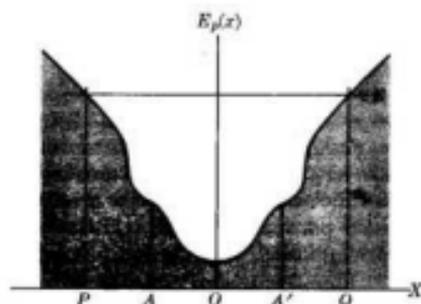


Fig. 2-35. Energía potencial simétrica.

simétricas A y A' deben ser las mismas en módulo; el tiempo empleado en ir desde A hasta P y desde P hasta A' debe ser el mismo y así sucesivamente. En general, si la energía potencial es simétrica respecto a un cierto punto, tal como O (fig. 2-35), sabemos que cuando el cuerpo está en posiciones simétricas, tales como A y A' , las condiciones dinámicas deben ser las mismas.

En mecánica cuántica, las consideraciones de simetría son aún más importantes que en mecánica clásica. Por ejemplo, cuando el problema es tal que la energía potencial tiene un centro de simetría, lo cual requiere que la partícula esté en el mismo estado dinámico en posiciones simétricas, la probabilidad de encontrar la partícula en estas posiciones simétricas debe ser la misma. Como esta probabilidad está dada por $|\psi|^2$, concluimos que si A y A' son dos posi-

ciones simétricas respecto al centro de simetría del problema físico, como en la fig. 2-35, entonces

$$|\psi_A|^2 = |\psi_{A'}|^2. \quad (2.25)$$

Esto es, el gráfico de $|\psi|^2$ deberá ser simétrico respecto al centro de simetría. Ahora bien, si suponemos que las funciones de onda son reales, la ec. (2.25) requiere que

$$\psi_A = \pm \psi_{A'}. \quad (2.26)$$

Por consiguiente, la función de onda en puntos simétricos debe tener igual módulo pero puede ser de signos opuestos. Cuando $\psi_A = +\psi_{A'}$, decimos que la función de onda tiene *paridad par*. Cuando $\psi_A = -\psi_{A'}$, la función de onda tiene *paridad impar*.

En general, la paridad se refiere al comportamiento de la función de onda en dos posiciones simétricas. Concluimos entonces que

en problemas que tienen un centro de simetría, los estados estacionarios se describen por medio de funciones de onda que tienen una paridad bien definida, par o impar.

Veamos cómo esta importante conclusión se aplica a los problemas considerados previamente. En la caja de potencial de la fig. 2-6, el punto $x = a/2$ es un centro de simetría; luego las funciones de onda deben ser pares o impares respecto a $x = a/2$. Esto se ve claramente en la fig. 2-8(a), de modo que podemos decir que los estados con $n = 1, 3, 5, \dots$ tienen paridad par, mientras que aquellos con $n = 2, 4, 6, \dots$ tienen paridad impar. La distribución de probabilidades que se ilustra en la fig. 2-8(b) satisface el requerimiento establecido en la ec. (2.25), ya que es simétrica respecto a $x = a/2$.

Para el caso del oscilador armónico, el centro de simetría es $x = 0$ (fig. 2-13) y las funciones de onda para $n = 0, 2, 4, \dots$ tienen paridad par, mientras que aquellas para $n = 1, 3, 5, \dots$ tienen paridad impar (fig. 2-14). La distribución de probabilidad para todos los estados estacionarios es simétrica respecto a $x = 0$ (fig. 2-15).

Este principio de simetría se usó implícitamente al discutir las funciones de onda para el pozo de potencial (fig. 2-16), que tiene un centro de simetría en $x = 0$. Sin embargo, la energía potencial considerada en el ejemplo 2.6 no presenta ninguna simetría (fig. 2-20) y las correspondientes funciones de onda no son ni pares ni impares (fig. 2-21).

La energía potencial para el movimiento de inversión del átomo de N en la molécula NH_3 que se discutió en el ejemplo 2.7 (ver fig. 2-30), tiene también un centro de simetría y las funciones de onda correspondientes (fig. 2-31) son pares o impares. Las funciones de onda pares o simétricas se designan por s y las impares o antisimétricas por a . En la tabla 2-3 las funciones de onda pares e impares sucesivas se designan $0s, 0a, 1s, 1a$, etc.

Otro hecho interesante que mencionaremos brevemente y que cualquier lector puede haber captado al mirar las figs. 2-8, 2-14, 2-17 y 2-31, es que la función

de onda del estado fundamental tiene siempre el mismo signo (en el lenguaje del álgebra, podemos decir que la función de onda del estado fundamental *no tiene raíces*), mientras que las funciones de onda para el primero, segundo, tercero, ... estados excitados cruzan el eje (o cambian de signo) una, dos, tres veces, ... (o tienen una, dos, tres, ... raíces). Luego podemos concluir que

mientras mayor número de veces la función de onda cambie de signo (o mientras mayor sea el número de raíces), mayor será la energía de los correspondientes estados estacionarios.

2.10 La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

Hasta ahora sólo hemos estudiado la distribución espacial del campo de materia y hemos calculado su amplitud o función de onda $\psi(x)$. No se ha dicho nada acerca de la variación del campo con el tiempo. Para discutir esta dependencia debemos tener una ecuación que contenga el tiempo; esta ecuación se llama *ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo*; tiene en mecánica cuántica un papel similar al que tienen las ecuaciones de Maxwell en el electromagnetismo. La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + E_p(x)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (2.27)$$

donde ahora aparece $\Psi(x, t)$ en lugar de $\psi(x)$ para la función de onda, incluyendo así la dependencia en el tiempo y el espacio. Vemos que esta ecuación para el campo de materia $\Psi(x, t)$ difiere radicalmente de la ecuación de onda $\partial^2 \xi / \partial t^2 = v^2 \partial^2 \xi / \partial x^2$, que describe las ondas elásticas o electromagnéticas, porque aquella contiene sólo la derivada de primer orden respecto al tiempo $\partial \Psi / \partial t$ y no la de segundo orden. La ecuación (2.27) tiene similitud con la del fenómeno de transporte, $\partial \xi / \partial t = a^2 \partial^2 \xi / \partial x^2$, en el sentido de que ésta también contiene la derivada de primer orden respecto al tiempo y describe la conducción del calor y la difusión. Sin embargo, hay una diferencia importante: el factor imaginario $i = \sqrt{-1}$, que multiplica a la derivada respecto al tiempo en la ecuación de Schrödinger. Por consiguiente, el campo descrito por la ec. (2.27) difiere de las ondas elásticas o electromagnéticas por una parte y de las ondas térmicas o de difusión por la otra. Es por ello que debemos contenernos de llevar demasiado lejos la analogía entre los campos de la mecánica cuántica y las ondas elásticas o electromagnéticas.

Obsérvese que sólo hemos escrito la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y no la hemos deducido, como es posible establecer la ecuación para las ondas elásticas en una cuerda o para las ondas electromagnéticas partiendo de principios más fundamentales. Podríamos decir ahora que la ec. (2.27) es una ley fundamental de la naturaleza en el mismo sentido que lo son la ley de la inducción electromagnética de Faraday-Henry o el principio de conservación del momentum, y que su forma matemática son el resultado del análisis cuidadoso de hechos experimentales y de nuestra intuición. Esta proposición es esencialmente

correcta. Sin embargo, es posible obtener la ecuación de Schrödinger partiendo de ciertas hipótesis básicas. Este procedimiento se sigue en la teoría formal de la mecánica cuántica, cuyo estudio está fuera del objetivo de este libro; sin embargo, en la sección 2.12 se da un análisis introductorio. Debemos llamar la atención aquí sobre lo siguiente: el hecho de que la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo contenga la derivada de primer orden respecto al tiempo y la derivada de segundo orden respecto a la posición, se puede relacionar directamente con el hecho de que la energía de la partícula depende del cuadrado del momentum a través de la relación $E = p^2/2m + E_p(x)$.

A continuación trataremos de obtener una solución de la ec. (2.27) que sea adecuada para describir los estados estacionarios. Por el conocimiento que tenemos de las ondas estacionarias, podemos suponer que tal solución debe tener las variables tiempo y posición separadas. Trataremos una solución de la forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.28)$$

Probaremos a continuación que E es la energía y $\psi(x)$ es la amplitud que satisfacen la ec. (2.3). Para ver esto notemos que

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad \text{y} \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \psi}{dx^2} e^{-iEt/\hbar}.$$

Sustituyendo estas dos expresiones en la ec. (2.27) y cancelando el factor común $e^{-iEt/\hbar}$, obtenemos la ec. (2.3) para $\psi(x)$; en consecuencia E debe ser la energía total del sistema. Por consiguiente el campo de materia dado por la ec. (2.28) oscila con una frecuencia angular

$$\omega = E/\hbar \quad \text{ó} \quad E = \hbar\omega = h\nu,$$

de conformidad con las ecs. (1.44) y (1.45). Como se ha indicado anteriormente, el campo expresado por la ec. (2.28) es típico de las ondas estacionarias porque las partes que contienen el espacio y el tiempo están incluidas en factores diferentes. Sin embargo, cuando se compara con las ondas estacionarias en una cuerda, en columnas de aire o en cavidades metálicas, hay una diferencia importante y es que la parte que contiene el tiempo no puede ser escrita como $\sin \omega t$ o $\cos \omega t$, sino como $e^{-i\omega t} = e^{-iEt/\hbar}$, lo cual se debe a que la ec. (2.27) es de primer orden con respecto al tiempo. Esto es, en la mecánica cuántica las ondas son siempre funciones complejas del tiempo.

Para una partícula libre que se mueve en la dirección $+X$ con momentum $p = \hbar k$, tenemos $\psi(x) = Ae^{ikx}$. De este modo la función de onda dependiente del tiempo es

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} = Ae^{i(kx - \omega t)}, \quad (2.29)$$

que describe una onda que se propaga en la dirección $+X$ con una velocidad de fase $v_p = \omega/k = E/p = \frac{1}{2}v$, como se estudió en la sección 1.11. Esto corrobora la proposición hecha en la sección 2.3 de que la función de onda $\psi(x) = e^{ikx}$ corresponde a una partícula que se mueve en la dirección $+X$. Análogamente, la

función de onda dependiente del tiempo que corresponde a $\psi(x) = e^{-ikx}$ es $\Psi(x, t) = A e^{-i(kx + \omega t)}$, que describe una onda propagándose en la dirección $-X$. Sin embargo, no podemos usar $\cos(kx - \omega t)$ o $\sin(kx - \omega t)$ en lugar de la ec. (2.29) para expresar $\Psi(x, t)$ para una partícula libre, porque estas ecuaciones no son soluciones de la ec. (2.27).

Para una partícula en una caja de potencial

$$\psi(x) = A \sin \frac{n\pi x}{a} = \frac{A(e^{in\pi x/a} - e^{-in\pi x/a})}{2i}$$

y

$$\Psi(x, t) = A \sin \frac{n\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} = \left[\frac{A}{2i} e^{i(n\pi x/a - Et/\hbar)} - e^{-i(n\pi x/a + Et/\hbar)} \right].$$

Esta ecuación corresponde a dos ondas que viajan en direcciones opuestas lo cual da como resultado ondas estacionarias, como en el caso de una cuerda vibrante con extremos fijos.

Una solución de la forma dada por la ec. (2.28) describe una partícula que se mueve con una energía bien definida, correspondiente a uno de los niveles de energía o estados estacionarios. En este caso,

$$|\Psi(x, t)|^2 = [\psi^*(x)e^{iEt/\hbar}][\psi(x)e^{-iEt/\hbar}] = |\psi(x)|^2, \quad (2.30)$$

de modo que la densidad de probabilidad $\Psi(x, t)$ es independiente del tiempo. Esta es la razón por la cual los estados descritos por la ec. (2.28) fueron designados previamente como *estacionarios*. Debemos observar, sin embargo, que la ec. (2.28) no es la única solución de la ec. (2.27), y que existe otra solución en la cual $|\Psi(x, t)|^2$ no es independiente del tiempo. Los estados correspondientes no son estacionarios. Usando un resultado de la teoría de las ecuaciones diferenciales, podemos expresar la solución general de la ec. (2.27), correspondiente a los estados no estacionarios, como una combinación lineal de las soluciones estacionarias; esto es,

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (2.31)$$

(lo cual es semejante al análisis de Fourier de una onda). La expresión anterior de $\Psi(x, t)$ es una solución de la ec. (2.27), como podemos verificar observando que cada término, siendo del tipo dado en la ec. (2.28), es una solución de la ec. (2.27), y que su suma es también una solución, ya que la ec. (2.27) es una ecuación diferencial lineal homogénea.

Como una ilustración concreta, consideremos el caso en el cual se puede expresar $\Psi(x, t)$ como suma de dos términos estacionarios, esto es,

$$\Psi(x, t) = c_1 \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}. \quad (2.32)$$

Para obtener la función de onda inicial hacemos $t = 0$, con lo cual resulta

$$\Psi(x, 0) = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$$

Podemos calcular los coeficientes c_1 y c_2 por un método matemático directo si conocemos $\Psi(x, 0)$ (ver problema 2.37). Por lo tanto es posible determinar $\Psi(x, t)$ si conocemos la función de onda inicial $\Psi(x, 0)$.

La distribución de probabilidad correspondiente a $\Psi(x, t)$ es

$$\begin{aligned} P(x, t) &= |\Psi(x, t)|^2 \\ &= \{c_1^* \psi_1^* e^{iE_1 t/\hbar} + c_2^* \psi_2^* e^{iE_2 t/\hbar}\} \{c_1 \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}\} \\ &= |c_1 \psi_1|^2 + |c_2 \psi_2|^2 + c_1 c_2^* \psi_1 \psi_2^* e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} \\ &\quad + c_1^* c_2 \psi_1^* \psi_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Luego $P(x, t)$ no es constante sino que contiene términos que oscilan con frecuencia angular $\omega = (E_1 - E_2)/\hbar$ o frecuencia lineal $\nu = (E_1 - E_2)/h$. Por consiguiente, el estado descrito por $\Psi(x, t)$ dado no es estacionario. Este resultado nos da una idea más clara de la diferencia entre estados estacionarios y no estacionarios. Mientras que para estados estacionarios $|\Psi(x, t)|^2$ es independiente del

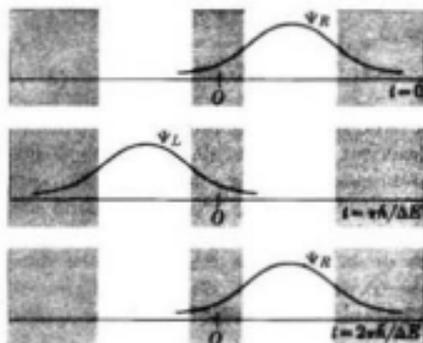


Fig. 2-36. Descripción del movimiento de inversión en el NH_3 por medio de funciones de onda dependientes del tiempo.

tiempo, en estados no estacionarios $|\Psi(x, t)|^2$ contiene una serie de términos oscilatorios con frecuencias $\nu = (E_n - E_{n'})/h$.

La función de onda dada por la ec. (2.32) puede describir un sistema durante una transición entre estados estacionarios E_1 y E_2 . Si la partícula que experimenta la transición está cargada, podemos decir que durante ésta la partícula se comporta como un oscilador de frecuencia dada por la ecuación de Bohr (1.29), $\nu = (E_1 - E_2)/h$, y, por lo tanto, es capaz de emitir o absorber radiación electromagnética de la misma frecuencia. En consecuencia el formalismo de la mecánica cuántica incorpora la ecuación de Bohr $E_1 - E_2 = h\nu$ de un modo natural.

EJEMPLO 2.8. Estudiar la función de ondas que describe la inversión de la molécula de NH_3 .

Solución: Supongamos que el átomo de N está inicialmente (con mayor probabilidad) en el estado fundamental del pozo de potencial de la derecha (ver fig. 2-30). Luego la función de onda inicial debe ser grande en el pozo de la derecha y muy pequeña

en el de la izquierda. Entonces, se puede expresar la función de onda en la forma

$$\Psi(x, 0) = \Psi_D,$$

la cual está representada en la fig. 2-36(a). Recordando la forma de las funciones ψ_0 y ψ_1 en la fig. 2-31, podemos también escribir, con buena aproximación,

$$\Psi(x, 0) = \Psi_D \approx \psi_0 + \psi_1.$$

Después de un cierto tiempo t , la función de onda está dada por

$$\Psi(x, t) = \psi_0 e^{-iE_0 t/\hbar} + \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar}.$$

Poniendo $\Delta E = E_1 - E_0$, podemos escribir esta expresión en la forma

$$\Psi(x, t) = (\psi_0 + \psi_1 e^{-i\Delta E t/\hbar}) e^{-iE_0 t/\hbar}.$$

En el instante $t = \pi\hbar/\Delta E$, el valor de la exponencial en el paréntesis es -1 y tenemos

$$\Psi(x, t) = (\psi_0 - \psi_1) e^{-iE_0 t/\hbar} = \Psi_I e^{-iE_0 t/\hbar},$$

donde, teniendo en cuenta las formas de ψ_0 y ψ_1 mostradas en la fig. 2-31, vemos que $\Psi_I \approx \psi_0 - \psi_1$ está concentrada a la izquierda, según se muestra en la fig. 2-36. Por consiguiente, la partícula — el átomo de N en nuestro ejemplo — está (muy probablemente) a la izquierda del pozo de potencial. En otras palabras, la molécula de NH_3 se ha invertido. En el instante $t = 2\pi\hbar/\Delta E$, el átomo de N está de nuevo a la derecha. En consecuencia, la frecuencia de inversión de la molécula está dada por $\nu = \Delta E/2\pi\hbar = (E_1 - E_0)/h$. El valor experimental para ν es $2,38 \times 10^{16}$ Hz, del cual podemos calcular la diferencia de energía $E_1 - E_0$ como $9,84 \times 10^{-3}$ eV. Este es el valor dado en la tabla 2-3.

2.11 Probabilidades de transición y reglas de selección

Sería lógico que en este momento el estudiante hiciera la siguiente pregunta: ¿Cómo puede la mecánica cuántica predecir *cuándo* va a ocurrir una transición? En otros términos: si un átomo, molécula o núcleo está en un estado excitado, ¿cómo podemos saber cuándo este átomo, molécula o núcleo va a saltar a un estado de menor energía? O si el átomo, molécula o núcleo está sometido a un campo electromagnético externo, ¿cómo podemos determinar si una de las partículas nombradas absorbe energía y pasa a un estado excitado? La respuesta a estas preguntas es que no podemos decir con exactitud cuándo tendrá lugar la transición, pero que para cada salto, digamos que del estado i al estado f , hay una *probabilidad de transición* por unidad de tiempo, T_{if} , que podemos calcular de acuerdo a las leyes de la mecánica cuántica y a las interacciones responsables de que ocurra la transición. A mayor T_{if} , mayor es la probabilidad de que la transición ocurra. Desde luego, si $T_{if} = 0$, la transición es imposible o *prohibida*. Este resultado implica que no todas las transiciones que satisfacen la ecuación de Bohr $\nu = (E' - E)/h$ son posibles, porque además de la conservación de la energía, entran otras consideraciones en el proceso. Por ejemplo, debe conservarse el momentum angular. También, debido a la simetría espacial del sistema (esto es, a la paridad de las funciones de onda), puede no ser posible para la función de onda del estado inicial, experimentar un ajuste de modo que se transforme en la función de onda del estado final por medio de un proceso radiativo

apropiado. Esta limitación en las transiciones posibles da lugar a *reglas de selección*. Estas reglas establecen cuáles son las transiciones más probables o *permitidas*, esto es, aquellas para las cuales las probabilidades de transición tienen valores grandes.

Durante una transición electromagnética, el sistema puede comportarse como un multipolo eléctrico o magnético oscilante, y por lo tanto tenemos transiciones dipolares, cuadrupolares, etc., eléctricas o magnéticas, cada una de ellas caracterizada por su probabilidad de transición propias y por reglas de selección. Usualmente la transición más probable es la dipolar eléctrica, seguida por la dipolar magnética y la cuadrupolar eléctrica. Transiciones multipolares de orden superior tienen probabilidades de transición muy pequeñas y son en general ignoradas, excepto en algunos casos especiales en los núcleos. Las transiciones para las cuales la probabilidad de transición dipolar eléctrica no es cero se denominan *permitidas de primer orden*. Cuando la probabilidad de transición dipolar eléctrica es cero, la transición se llama *prohibida de primer orden*, a pesar de que tal transición puede todavía ocurrir como una transición dipolar magnética o cuadrupolar eléctrica (o aún una transición multipolar de orden superior) aunque con una rapidez mucho menor. Por ejemplo, la probabilidad de transición dipolar eléctrica de un oscilador armónico es diferente de cero sólo si

$$\Delta n = \pm 1 \quad (2.34)$$

donde $\Delta n = n_f - n_i$ que da la regla de selección para las transiciones permitidas de primer orden del oscilador. Esto significa que estas transiciones van desde un estado vecino a otro, esto es, desde un estado a otro cuyo número cuántico difiere en ± 1 . De este modo la energía absorbida ($\Delta n = +1$) o emitida ($\Delta n = -1$) en una transición es, de acuerdo a la ec. (2.21),

$$|E_f - E_i| = \hbar\omega = h\nu, \quad (2.35)$$

donde ν es la frecuencia del oscilador armónico. Comparando las ecs. (2.35) con la ecuación de Bohr, vemos que el oscilador armónico puede emitir o absorber radiación de una sola frecuencia: aquella que es igual a la suya propia (la frecuencia clásica de oscilación) y así su espectro queda limitado a una sola frecuencia.

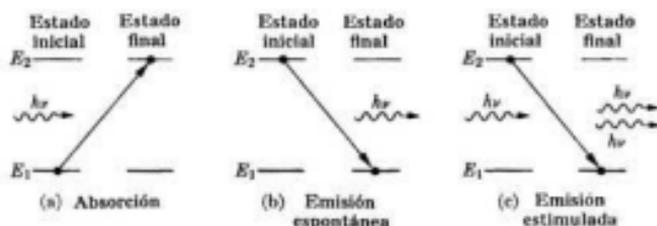


Fig. 2-37. Procesos radiativos: (a) absorción; se absorbe un fotón incidente; (b) emisión espontánea; se produce un fotón; (c) emisión estimulada bajo la acción de un fotón incidente.

Cuando un sistema está en un estado excitado permanecerá en este estado sólo un cierto intervalo de tiempo debido a la probabilidad de que salte a un nivel de energía inferior. El *promedio de vida* en un estado excitado es inversamente proporcional a la probabilidad total de transición de ese estado, esto es, a la suma de las probabilidades de transición de todos los niveles inferiores de energía hasta los cuales puede saltar. La vida del estado fundamental de un sistema aislado es evidentemente infinita, ya que el sistema no puede pasar a un nivel inferior. Los tiempos de duración para las transiciones atómicas y moleculares permitidas son del orden de 10^{-8} s mientras que la duración para las transiciones nucleares van desde 10^{-8} a 10^{-14} s.

Aunque puede haber transiciones en las cuales un sistema en un estado excitado emite espontáneamente energía pasando a un estado de menor energía, para que un sistema absorba energía es necesario que intervenga una acción externa. Si el sistema está inicialmente en un estado excitado, esta acción externa puede también inducir emisión de energía en adición a la emisión espontánea, como resultado de la perturbación producida en el sistema. Esto se denomina *emisión estimulada* y es muy importante en muchos casos. En la fig. 2-37 se ilustra los tres procesos: absorción, emisión espontánea y emisión estimulada. En el ejemplo 13.5 obtendremos la relación entre las probabilidades de transición espontánea y estimulada.

2.12 Teoría formal de la mecánica cuántica

Hasta ahora hemos desarrollado una teoría cuántica para sistemas atómicos basada en la ecuación de Schrödinger. Con la ayuda de las funciones de onda que resultan de la solución de la ecuación de Schrödinger, podemos obtener información acerca de los posibles niveles de energía del sistema, la probabilidad de encontrar el sistema en una región particular del espacio, la probabilidad de una transición de un nivel de energía a otro, la frecuencia de la radiación electromagnética emitida o absorbida, y así sucesivamente. Sin embargo, parecería que la única información que podemos extraer de las leyes de la mecánica cuántica concierne a la energía del sistema. Esto no es así. Es posible expresar los principios de la mecánica cuántica de un modo formal que nos permita obtener toda la información necesaria acerca de un sistema físico. Presentaremos ahora, de una manera simplificada, esta teoría formal.

Consideremos primero el problema en una dimensión. La ecuación de Schrödinger (2.3) se puede escribir en la forma

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) + E_p(x) \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (2.36)$$

Al escribir el primer miembro, factorizamos la función de onda $\psi(x)$ como si fuera un factor común de las cantidades entre los corchetes. Sin embargo, cada término del corchete debe actuar u *operar* sobre $\psi(x)$ de acuerdo a su propia naturaleza. Esto es: $E_p(x)$ multiplica a $\psi(x)$, pero d^2/dx^2 produce la derivada se-

gunda de $\psi(x)$. En lenguaje matemático podemos decir que la expresión

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) + E_p(x) \quad (2.37)$$

que aparece entre los corchetes es un *operador**, el cual, cuando actúa sobre una función $\psi(x)$ [esto es, $\mathbf{H}\psi(x)$], produce una nueva función como resultado de un conjunto de operaciones matemáticas explícitamente contenidas en la definición de \mathbf{H} . En particular, se puede escribir la ec. (2.36) en la forma simbólica

$$\mathbf{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (2.38)$$

la cual significa que el efecto de \mathbf{H} sobre $\psi(x)$ es multiplicar $\psi(x)$ por la constante E . Es evidente que cuando \mathbf{H} opera sobre una función arbitraria el resultado no es necesariamente la misma función multiplicada por una constante, sino que en general es otra función diferente. Aquellas funciones que satisfacen la ec. (2.38) se llaman *funciones propias* del operador \mathbf{H} , y los valores correspondientes de E son los *valores propios* del operador.

Para un operador arbitrario \mathbf{A} , las funciones y los valores propios son los que satisfacen la ecuación

$$\mathbf{A}\psi(x) = a\psi(x). \quad (2.39)$$

Para cada operador hay en general una serie de valores propios a_1, a_2, a_3, \dots y una serie de funciones propias asociadas $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ que dependen de la naturaleza del operador y de las condiciones matemáticas de contorno. Estas funciones propias son consecuencia de las propiedades físicas del sistema. En algunos casos hay varias funciones propias que corresponden a un valor propio dado; en tal caso, el valor propio se dice *degenerado*.

En la mecánica cuántica los operadores pertenecen a una clase llamada *hermitiana* (en honor del matemático francés C. Hermite). Estos operadores satisfacen la condición

$$\int \Phi_1^* \mathbf{A} \Phi_2 \, d\tau = \int [\mathbf{A} \Phi_1]^* \Phi_2 \, d\tau \quad (2.40)$$

para todas las funciones Φ_1 y Φ_2 que cumplen las condiciones de contorno impuestas. Se puede probar que

los valores propios de un operador hermitico son reales y sus funciones propias son ortogonales.

Esto es,

$$\int_{\text{Todo el espacio}} \psi_i^* \psi_j \, d\tau = \delta_{ij}, \quad (2.41)$$

donde ψ_i y ψ_j son funciones propias pertenecientes a los valores propios a_i y a_j de \mathbf{A} .

* Los operadores serán designados con tipos futura en negrita.

El operador H dado por la ec. (2.37) juega un papel muy importante en mecánica cuántica y se llama *operador hamiltoniano* del sistema. En mecánica clásica la energía total se denomina el hamiltoniano cuando se expresa en función del momentum y de las coordenadas del sistema. Luego, para una partícula que se mueve en una dirección el hamiltoniano clásico es

$$H_{\text{clásico}} = \frac{1}{2m} p^2 + E_p(x). \quad (2.42)$$

Podemos correlacionar los hamiltonianos clásico y cuántico de una manera muy simple. Comparando las ecs. (2.37) y (2.42) vemos que podemos transformar el operador hamiltoniano clásico en el hamiltoniano cuántico haciendo la correspondencia

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (2.43)$$

[El signo menos en la ec. (2.43) es sólo cuestión de conveniencia.] Para el movimiento en tres dimensiones, el hamiltoniano clásico es

$$H_{\text{clásico}} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + E_p(\mathbf{r}), \quad (2.44)$$

donde \mathbf{r} es el vector de posición de la partícula y $\mathbf{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$. La extensión lógica de la correspondencia expresada por la ec. (2.43) es

$$p_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (2.45)$$

Usando el operador vectorial ∇ , que se lee *nabla*, definido por

$$\nabla = \mathbf{u}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{u}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{u}_z \frac{\partial}{\partial z},$$

podemos escribir la ec. (2.45) en la forma más compacta

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla. \quad (2.46)$$

Reemplazando \mathbf{p} del hamiltoniano clásico por el operador $-i\hbar \nabla$, obtenemos el operador cuántico

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + E_p(\mathbf{r}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + E_p(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.47)$$

Operando con H sobre una función $\psi(\mathbf{r})$, tenemos

$$H\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + E_p(\mathbf{r})\psi.$$

Si ψ es una función propia de \mathbf{H} , tenemos $\mathbf{H}\psi = E\psi$, donde E es el valor propio de \mathbf{H} , o

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + E_p(\mathbf{r})\psi = E\psi.$$

que es la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones, como se estableció en la ec. (2.9); por consiguiente podemos decir que la ec. (2.47) da el operador hamiltoniano cuántico para una partícula en tres dimensiones.

Basándonos en la relación (2.46), podemos establecer el *primer principio de la mecánica cuántica* como sigue:

I. A cada cantidad física $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, que sea una función de la posición y del momentum de una partícula, corresponde un operador cuántico, que se obtiene reemplazando \mathbf{p} por $-i\hbar\nabla$; esto es, $A(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla)$.

Por lo tanto, los operadores hamiltonianos (2.37) ó (2.47) son los operadores cuánticos correspondientes a la energía total del sistema para el movimiento en una y tres dimensiones, respectivamente. Análogamente, a la energía cinética $E_k = p^2/2m$, corresponde el operador $-(\hbar^2/2m)\nabla^2$ en tres dimensiones, o $-(\hbar^2/2m)d^2/dx^2$ en una dimensión. La tabla 2-4 resume los operadores cuánticos para varias cantidades físicas.

El *segundo principio de la mecánica cuántica* establece:

II. Cuando se mide una cantidad física $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, los únicos valores posibles que se puede obtener son los valores propios del operador cuántico $A(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla)$

TABLA 2-4 Operadores cuánticos

Magnitud	Definición clásica	Operador cuántico
Posición	\mathbf{r}	\mathbf{r}
Momentum	\mathbf{p}	$-i\hbar\nabla$
Momentum angular	$\mathbf{r} \times \mathbf{p}$	$-i\hbar\mathbf{r} \times \nabla$
Energía cinética	$p^2/2m$	$-(\hbar^2/2m)\nabla^2$
Energía total	$p^2/2m + E_p(\mathbf{r})$	$-(\hbar^2/2m)\nabla^2 + E_p(\mathbf{r})$

De este modo podemos determinar los valores no sólo de la energía sino también de cualquier otra cantidad física. Este principio nos dice entonces qué información física concerniente a un sistema podemos sacar. Estableciendo el principio en términos matemáticos, podemos escribir la ecuación operacional

$$A(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla)\psi = a\psi. \quad (2.48)$$

A continuación encontramos los valores posibles de a y de las funciones ψ que satisfacen esta ecuación diferencial con las condiciones de contorno nece-

sarias. Los valores propios a_1, a_2, a_3, \dots son los únicos resultados posibles de una medida de A . Decimos además que las funciones propias $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ describen los estados posibles del sistema en cuanto concierne a la cantidad física A .

Obviamente, si el sistema está en el estado descrito por la función propia ψ_n correspondiente al operador \mathbf{A} , entonces el valor de la cantidad física A es a_n . Pero ¿qué sucede si el sistema está en un estado descrito por la función Φ que no es ninguna de las soluciones ψ_n de la ecuación (2.48)? En tal caso podemos decir que A no tiene un valor preciso. Desarrollando la función de onda Φ en términos de las funciones propias ψ_n del operador \mathbf{A} , obtenemos

$$\Phi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + c_3 \psi_3 + \dots = \sum c_n \psi_n.$$

Cuando las funciones ψ_n son ortogonales, entonces es evidente que

$$c_n = \int \psi_n^* \Phi \, d\tau. \quad (2.49)$$

Por lo tanto el *tercer principio de la mecánica cuántica* establece que

III. Cuando el estado del sistema corresponde a la función de onda $\Phi(\mathbf{r})$, la probabilidad de obtener el valor a_n como resultado de una medida de la cantidad física $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ es $|c_n|^2$, donde c_n está dado por la ec. (2.49) y ψ_n es la función propia del operador $\mathbf{A}(\mathbf{r}, -i\hbar \nabla)$ correspondiente al valor propio a_n .

Se puede demostrar que la ec. (2.1) es simplemente una aplicación particular de este principio cuando la cantidad física medida es justamente la posición de la partícula.

De acuerdo al tercer principio, cuando la función Φ no es una función propia de \mathbf{A} , no podemos decir cuál es el valor exacto de A , y si medimos A repetidamente obtenemos muchos resultados diferentes, cada uno con una cierta probabilidad. Podemos, sin embargo, hablar del *valor medio* de A en el estado descrito por Φ . Como corolario del tercer principio mostraremos que

el valor medio de una cantidad física $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ cuando el estado del sistema corresponde a la función $\Phi(\mathbf{r})$ es

$$A = \int_{\text{Todo el espacio}} \Phi^* \mathbf{A}(\mathbf{r}, -i\hbar \nabla) \Phi \, d\tau. \quad (2.50)$$

Para manipular la ec. (2.50) debemos operar primero con \mathbf{A} sobre Φ , luego multiplicar por Φ^* y finalmente integrar. La ecuación (2.50) es correcta si la función Φ está normalizada a uno, esto es, si $\int \Phi^* \Phi \, d\tau = 1$. Pero si Φ no está normalizada a uno, debemos escribir en su lugar

$$\bar{A} = \frac{\int \Phi^* \mathbf{A} \Phi \, d\tau}{\int \Phi^* \Phi \, d\tau}. \quad (2.51)$$

Los principios que hemos establecido son estáticos en el sentido de que no dan información acerca de la evolución del sistema en el tiempo. Para obtener una teoría dinámica necesitamos el *cuarto principio de la mecánica cuántica*:

IV. La evolución temporal de un sistema físico está descrita por la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi, \quad (2.52)$$

donde H es el operador hamiltoniano del sistema.

Vemos que la ec. (2.52) es idéntica a la ec. (2.27) en una dimensión cuando H está dado por la ec. (2.37). Aplicando el concepto de operador, podemos decir que es posible obtener la ecuación dinámica (2.52) reemplazando la energía E en la ec. (2.38) por el operador $i\hbar \partial/\partial t$. Esto es:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (2.53)$$

No elaboraremos más allá de este punto la teoría formal de la mecánica cuántica; los principios establecidos son suficientes para el propósito de este libro.

EJEMPLO 2.9. Hallar el valor medio del momentum de una partícula en una caja de potencial, si la función de onda corresponde a uno de los estados estacionarios.

Solución: Obtuvimos las funciones de onda de una partícula en una caja unidimensional en la sección 2.5 en la forma

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a}.$$

Como las funciones están normalizadas usamos la ec. (2.50). Por lo tanto

$$\bar{p} = \int_{-a}^a \psi_n^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi_n dx,$$

ya que el operador correspondiente a p es $-i\hbar d/dx$. Pero $d\psi_n/dx = \sqrt{2/a}(n\pi/a) \cos n\pi x/a$. Por consiguiente

$$\bar{p} = -i\hbar \frac{2n\pi}{a^2} \int_{-a}^a \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a} \cos \frac{n\pi x}{a} dx = 0.$$

Tal parece que esto contradice la ec. (2.13), la cual establece que el momentum de una partícula en una caja es $p = n\pi\hbar/a$. Sin embargo, el valor $p = n\pi\hbar/a$ da el módulo del momentum. Pero el momentum es una cantidad vectorial y una partícula en una caja se mueve hacia atrás y hacia delante de un modo simétrico, cambiando la dirección de su momentum. De este modo es natural que $\bar{p} = 0$.

EJEMPLO 2.10. Matrices asociadas con una cantidad física.

Solución: Consideremos las funciones propias $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ del hamiltoniano, esto es, aquellas que satisfacen la ecuación $H\psi_n = E\psi_n$. Si A es otra magnitud física, obtenemos la serie de cantidades

$$A_{mn} = \int \psi_m^* A \psi_n dx \quad (2.54)$$

para cada par de funciones ψ_m y ψ_n . Estas cantidades pueden ordenarse en la forma matricial

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots & A_{1n} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots & A_{2n} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots & A_{3n} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & A_{m3} & \dots & A_{mn} & \dots \end{pmatrix}.$$

Este arreglo se denomina *matriz de A*; las A_{nn} son los elementos de matriz. Los elementos $A_{11}, A_{22}, A_{33}, \dots, A_{nn}$ se llaman *elementos diagonales de la matriz* debido a los lugares que ocupan en ella. Para calcular la matriz de un operador, no se tiene que usar necesariamente las funciones propias del hamiltoniano; en su lugar, se puede usar las funciones propias de cualquier otro operador.

El cálculo de elementos de matriz es muy importante en varios problemas cuánticos. Daremos sólo un ejemplo. Los elementos de matriz del vector de posición son

$$r_{mn} = \int \psi_m^* r \psi_n d\tau.$$

Se puede probar que la probabilidad de transición del estado i al estado f con la emisión o absorción de radiación dipolar eléctrica de energía $\hbar\omega = E_i - E_f$ está dada por

$$T_{if} = \frac{e^2 \omega^3}{3\pi \epsilon_0 \hbar c^3} |\mathbf{r}_{if}|^2. \quad (2.55)$$

De este modo si $\mathbf{r}_{if} = 0$ la transición es prohibida de primer orden. Obtenemos así las reglas de selección mencionadas en la sección 2.11. El estado de polarización de la radiación está determinado por las componentes de \mathbf{r}_{if} . Por ejemplo, si $x_{if} = -y_{if} = 0$ pero $z_{if} \neq 0$, la radiación emitida o absorbida está polarizada paralelamente al eje Z . Como la energía emitida en la transición es $\hbar\omega$, tenemos que la rapidez de radiación de energía es

$$\frac{dE}{dt} = \hbar\omega T_{if} = \frac{e^2 \omega^4}{3\pi \epsilon_0 c^3} |\mathbf{r}_{if}|^2.$$

Comparando este resultado con el del ejemplo 1.1 para un oscilador clásico, concluimos que durante la transición el electrón se comporta como un dipolo eléctrico de frecuencia angular ω y amplitud $2|\mathbf{r}_{if}|$.

Bibliografía

1. "Quantum-Mechanical Tunneling", J. Fermer, *Am. J. Phys.* **34**, 1168 (1966)
2. "The Philosophical Basis of Bohr's Interpretation of Quantum Mechanics", R. Hall, *Am. J. Phys.* **33**, 624 (1965)
3. "Quantum Mechanics as a Model", T. Buch, *Am. J. Phys.* **34**, 653 (1966)
4. "Interpretation of Quantum Mechanics and the Future of Physics", E. Witmer, *Am. J. Phys.* **35**, 40 (1967)
5. *Elements of Wave Mechanics*, N. Mott. Cambridge University Press, Cambridge, 1962, caps. 1, 2, 3 y 4
6. *Introduction to Modern Physics*, F. Richtmyer, E. Kennard y T. Lauritsen. McGraw-Hill, New York, 1955, cap. 6, secs. 96-102

7. *Elementary Wave Mechanics*, W. Heitler, segunda edición. Oxford University Press, Oxford, 1955, caps. 1 y 2
8. *Atomic Spectra and Atomic Structure*, G. Herzberg. Dover Press, New York, 1944, cap. 1
9. *Structure of Matter*, W. Finkelburg. Academic Press, New York, 1964, cap. 4
10. *Quantum Theory of Matter*, J. Slater. McGraw-Hill, New York, 1951, caps. 1, 2 y 3

Problemas

2.1 Una partícula está representada por la función de onda $\psi(x) = e^{-(x-x_0)^2/2\alpha}$ sen kx . Hacer el gráfico de la función $\psi(x)$ y la distribución de probabilidad $|\psi(x)|^2$. Estimar la indeterminación en la posición y en el momento de la partícula.

2.2 Probar que $R + T = 1$ para un haz de partículas que chocan con un escalón de potencial de altura E_0 cuando $E > E_0$ (referirse al ejemplo 2.2).

2.3 ¿Cuál es el efecto sobre los niveles de energía de una caja de potencial unidimensional cuando el tamaño de ésta (a) disminuye, (b) aumenta?

2.4 Considerar un electrón en una caja de potencial unidimensional de ancho 2,0 Å. Calcular la energía en el punto cero. Usando el principio de indeterminación, discutir el efecto de la radiación incidente utilizada para localizar el electrón con el 1 % de precisión (esto es, $\Delta x = 0,2$ Å).

2.5 Estimar la energía en el punto cero de un electrón confinado en el interior de una región de 10^{-14} m, que es el orden de magnitud de las dimensiones nucleares. Comparar esta energía con la energía potencial gravitacional y la potencial coulombiana de un electrón y un protón a la misma distancia. Basándose en esta comparación discutir la posibilidad de que pueda existir un electrón en el interior de un núcleo.

2.6 Calcular la energía en el punto cero de un neutrón confinado en el interior de un núcleo que tiene un tamaño de 10^{-14} m.

2.7 Probar que la diferencia relativa de energía $\Delta E/E$ entre dos niveles adyacentes cualesquiera de una partícula en una caja está dada por $(2n + 1)/n^2$.

2.8 Normalizar las funciones de onda para una partícula en una caja, dadas por la ec. (2.18), mostrando que $C = -\sqrt{8/abc} = \sqrt{8/V}$, donde V es el volumen de la caja.

2.9 Probar que las funciones de onda tridimensionales dadas en la ec. (2.18) son ortogonales.

2.10 Hacer el gráfico de la función $g(p)$ dada en el ejemplo 2.4 en función de p , y comparar con la fig. 2-12. Explicar la difefencia.

2.11 Probar que el volumen del espacio de fase correspondiente a una partícula que se mueve dentro de una región de volumen V que tienen un momento entre p y $p + dp$ es $4\pi V p^2 dp$. Recordando que el tamaño mínimo de una celda en el espacio de fase dentro del cual se puede localizar una partícula es h^3 , hallar el número de estados cuánticos con momento entre p y $p + dp$ accesibles a la partícula. Comparar con los resultados dados en el ejemplo 2.4.

2.12 Demostrar que los niveles de energía y funciones de onda de una partícula que se mueve en el plano XY dentro de una caja de potencial bidimensional de lados a y b son

$$E = (\pi^2 \hbar^2 / 2m) (n_x^2/a^2 + n_y^2/b^2)$$

y

$$\psi = C \text{sen}(n_x \pi x/a) \text{sen}(n_y \pi y/b).$$

Discutir la degeneración de los niveles cuando $a = b$. Hallar la constante de normalización C .

2.13 Refiriéndose al problema 2.12, si la caja bidimensional es muy grande, pero tiene lados iguales, hallar el número de estados cuánticos (a) con energía

entre E y $E + dE$, (b) con momentum comprendido entre p y $p + dp$.

2.14 Verificar por integración directa que las funciones de onda ψ_0 y ψ_1 para el oscilador armónico (tabla 2-2) están normalizadas. Verificar también que ψ_0 es ortogonal a ψ_1 y ψ_2 .

2.15 Calcular la energía en el punto cero y el distanciamiento de los niveles de energía (a) en un oscilador armónico unidimensional con una frecuencia de oscilación de 400 Hz, (b) en un oscilador armónico tridimensional con una frecuencia de oscilación de 400 Hz, (c) en la molécula de CO, si los dos átomos oscilan con una frecuencia de $6,43 \times 10^{13}$ Hz.

2.16 La expresión general de las soluciones de la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico es

$$\psi_n = N_n H_n(ax) e^{-a^2 x^2 / 2},$$

donde $N_n = \sqrt{a/\pi^{1/2} 2^n n!}$ es la constante de normalización, $a = \sqrt{m\omega/\hbar}$, y las funciones $H_n(ax)$ se llaman *polinomios de Hermite*, definidos por

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}).$$

Escribir las cuatro primeras funciones de onda ($n = 0, 1, 2, 3$) y comparar con las expresiones dadas en la tabla 2-2.

2.17 Se puede escribir las funciones de onda para un oscilador armónico tridimensional en la forma

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = N_{n_1} N_{n_2} N_{n_3} \times H_{n_1}(ax) H_{n_2}(ay) H_{n_3}(az) e^{-a^2 r^2 / 2},$$

donde las diferentes cantidades están definidas en el problema 2.16. La energía del oscilador es $E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, donde $n = n_1 + n_2 + n_3$. Probar que la degeneración de cada estado es $g = \frac{1}{2}(n + 1)(n + 2)$. Escribir completamente las funciones de onda correspondientes a $n = 0, 1$, y 2 . Notar que la función de onda para $n = 0$ es esféricamente simétrica. Analizar las formas de las funciones de onda para $n = 1$.

2.18 ¿Cuál es el efecto sobre los niveles de energía de un pozo de potencial unidimensional cuando la profundidad del mismo (a) disminuye? ¿(b) aumenta? Repetir el análisis para el caso de que

su ancho varíe, permaneciendo constante la profundidad.

2.19 Discutir el efecto sobre los niveles de energía y las funciones de onda de un pozo de potencial de alcance a cuando se añade un carozo rígido de alcance b , como se muestra en la fig. 2-38. [Sugerencia: ver los ejemplos 2.5 y 2.6.]

2.20 Dado un pozo de potencial de profundidad E_0 y ancho a (ejemplo 2.6) trazar las posibles funciones de onda para los estados ligados si

- (a) $E_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2 / 8m$,
- (b) $\pi^2 \hbar^2 / 8m < E_0 a^2 < 9\pi^2 \hbar^2 / 8m$,
- (c) $9\pi^2 \hbar^2 / 8m < E_0 a^2 < 25\pi^2 \hbar^2 / 8m$.

2.21 Estimar la profundidad E_0 del pozo para un neutrón en un pozo unidimensional rectangular de ancho 3×10^{-15} m, dada su energía de enlace E_b igual a 2,0 MeV y suponiendo que sólo es posible un nivel de energía.

2.22 La ecuación (2.23), $k_1 \cotg k_1 a = -\alpha$, se puede resolver gráficamente del siguiente modo: se define $\xi = k_1 a$, $\eta = \alpha a$ y $\rho = (\sqrt{2mE_0}/\hbar)a$. En consecuencia $\xi^2 + \eta^2 = \rho^2$. Además se obtiene de la ec. (2.23), $\eta = -\xi \cotg \xi$. Hacer el gráfico de $\eta = -\xi \cotg \xi$, tomando ξ como abscisa y η como ordenada, y mostrar que la circunferencia $\xi^2 + \eta^2 = \rho^2$ intersecta la curva una, dos, tres, etc. veces, dependiendo del valor de ρ . Los puntos de intersección corresponden a los valores permitidos de $E_0 a^2$. Probar que estos valores son compatibles con los valores de $E_0 a^2$ dados en el texto.

2.23 Para la barrera de potencial cuadrada de la fig. 2-23, determinar los coeficientes B , C , D y A' en función del coeficiente A para (a) $E < E_0$ y (b) $E > E_0$.

2.24 Escribir las funciones de onda en cada una de las regiones de energía potencial mostradas en la fig. 2-39. Dibujar dichas funciones de onda. Considerar que las partículas incidentes provienen de la izquierda y discutir los tres casos distintos: $E < E_0$, $E_0 < E < E_0'$ y $E > E_0'$.

2.25 Repetir el problema anterior para el caso en el cual las partículas provienen inicialmente de la derecha.

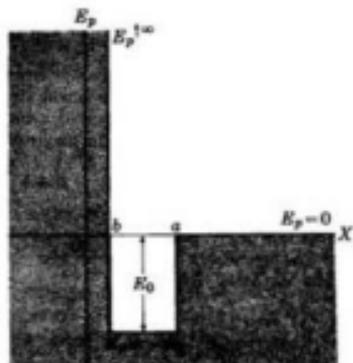


Figura 2-38

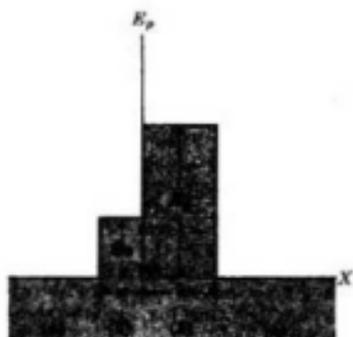


Figura 2-39

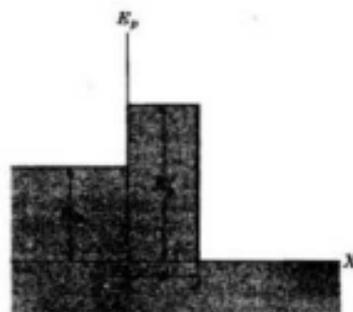


Figura 2-40

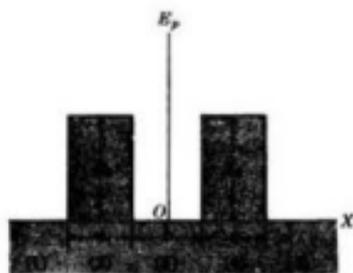


Figura 2-41

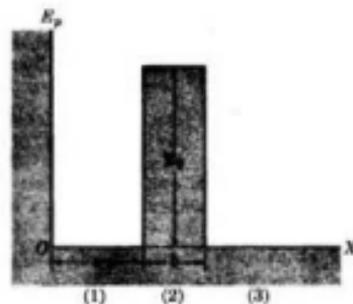


Figura 2-42

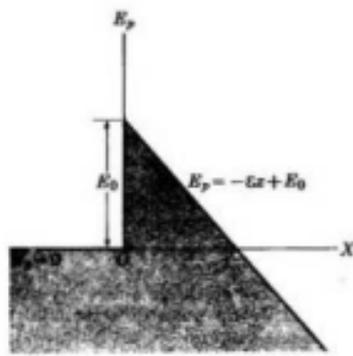


Figura 2-43

2.26 Considerar la energía potencial que se ilustra en la fig. 2-40. Discutir la expresión matemática general y la forma de la función de onda para una partícula incidente por la derecha cuando su energía es (a) $E < E_0$, (b) $E_2 < E < E_2'$ y (c) $E > E_0'$. Repetir los dos últimos casos para una partícula que incide por la izquierda.

2.27 Escribir la función de onda para cada una de las regiones de la energía potencial que se muestra en la fig. 2-41. Hacer además un bosquejo de las funciones de onda. Considerar una partícula incidente por la izquierda, primero con $E < E_0$ y luego con $E > E_0$. ¿Existe un estado estacionario posible para una partícula inicialmente en la región (3)?

2.28 Escribir la función de onda para cada una de las regiones de la energía potencial que se muestra en la fig. 2-42. Dibujar dicha función de onda.

2.29 Una partícula se mueve en línea recta bajo la acción de un campo eléctrico uniforme \mathcal{E} de modo que su energía potencial es $E_p = -\mathcal{E}x$. (a) Escribir la ecuación de Schrödinger para este movimiento. (b) Hacer un bosquejo de las funciones de onda para una energía E mayor y menor que cero. ¿Está cuantizada la energía?

2.30 Dada la energía potencial que se ilustra en la fig. 2-43, bosquejar las funciones de onda para una partícula proveniente de la derecha y con una energía total que es (a) negativa, (b) entre cero y E_0 , (c) mayor que E_0 . ¿Cómo varía la longitud de onda de la partícula a medida que se mueve en las regiones $x > 0$ y $x < 0$, si la energía total es mayor que E_0 ? Repetir para el caso en el cual la partícula proviene de la izquierda. Esta situación corresponde a la energía potencial de un electrón en un metal cuando se aplica un campo eléctrico externo.

2.31 Una partícula se mueve con energía potencial $E_p(x) = -E_0 e^{-\alpha x}$. (a) Hacer el gráfico de $E_p(x)$. (b) Hacer un bosquejo de las funciones de onda cuando la energía total es positiva y/o negativa. (c) ¿Espera tener niveles de energía cuantizados para ciertos intervalos de energía? (d) Estimar la energía en el punto cero. (Sugerencia: Observar que para

energías cercanas a $-E_0$ la partícula oscila con una frecuencia $\omega = [(d^2 E_p / dx^2) / m]^{1/2}$.)

2.32 Probar que para los polinomios de Hermite definidos en el problema 2.16,

$$H_n(-\xi) = H_n(\xi)$$

si n es par y

$$H_n(-\xi) = -H_n(\xi)$$

si n es impar. Concluir de aquí que las funciones de onda para un oscilador armónico unidimensional tienen paridad par o impar según que n sea par o impar. Probar también que la paridad del oscilador armónico tridimensional del problema 2.17 es par (impar) cuando n es par (impar).

2.33 Demostrar que las funciones de onda de una partícula en una caja de potencial, dadas en la ec. (2.18), tienen paridad par (impar) si $n = n_1 + n_2 + n_3$ es impar (par).

2.34 Dada la energía potencial que se muestra en la fig. 2-44 escribir la función de onda para cada región y bosquejar las funciones de onda y niveles de energía para $E < E_0$ y $E > E_0$. Observar que las funciones de onda son simétricas (pares) y antisimétricas (impares). Discutir el efecto sobre los niveles adyacentes de energía cuando E_0 o b se hacen muy grandes.

2.35 Una partícula se mueve con la energía potencial que se muestra en la fig. 2-45. Hacer el gráfico de las funciones de onda y de las distribuciones de probabilidad para los tres niveles de energía más bajos. Verificar que los tres niveles tienen energías casi iguales. Hacer un esquema general de los niveles de energía.

2.36 Considerar la función de onda dependiente del tiempo para un haz de partículas libres, dada por la ec. (2.29), donde $|A|^2$ es el número promedio de partículas por unidad de volumen. Mostrar que el número de partículas que cruzan la unidad de área por segundo (esto es, el flujo de partículas) es $\hbar|A|^2 k/m$.

2.37 Si

$$\Psi(x, t) = c_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t / \hbar} + c_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t / \hbar},$$

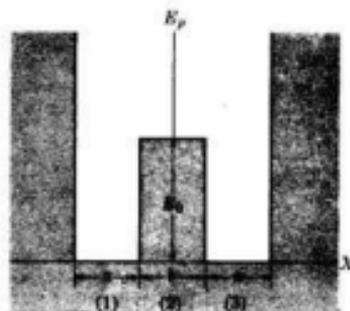


Figura 2-44

donde las funciones propias $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$ están normalizadas y son ortogonales, probar que

$$c_1 = \int \psi_1^*(x)\Psi(x, 0) dx$$

y

$$c_2 = \int \psi_2^*(x)\Psi(x, 0) dx.$$

Lo anterior demuestra que se puede hallar la función de onda en cualquier instante a partir de la función de onda inicial $\Psi(x, 0)$. Extender el resultado al caso en el cual

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

2.38 Probar que las funciones de onda $\psi(x) = e^{\pm ikx}$ de la partícula libre son funciones propias del operador momento correspondientes a los valores propios $\pm \hbar k$, respectivamente.

2.39 Indicar cuáles de las siguientes funciones son funciones propias del operador d/dx : (a) e^{2x} , (b) e^{2x^2} , (c) $\sin kx$. Indicar en cada caso el valor apropiado. Repetir para el operador d^2/dx^2 .

2.40 Probar que el operador momentum $-i\hbar d/dx$ es hermitico. [Sugerencia: Integrar por partes el primer miembro de la ec. (2.40) reemplazando \mathbf{A} por el operador momentum y tomando en consideración el comportamiento de las funciones de onda en $\pm \infty$.]

2.41 Hallar el valor medio de x , x^2 , p y p^2 en los estados $n = 0$ y $n = 1$ de un oscilador armónico lineal.

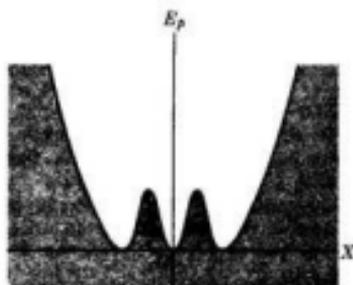


Figura 2-45

2.42 Hallar el valor medio de x , x^2 , p y p^2 para los estados fundamental y primero excitado de una partícula en una caja de potencial unidimensional.

2.43 Escribir completamente los operadores correspondientes a las tres componentes rectangulares del momento angular orbital $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$.

2.44 El conmutador de los dos operadores \mathbf{A} y \mathbf{B} es $\mathbf{AB} - \mathbf{BA}$ y se designa por el símbolo $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$. Probar que

$$[x, p_x]\psi = i\hbar\psi,$$

$$[y, p_x]\psi = 0,$$

y

$$[z, p_x]\psi = 0,$$

donde ψ es una función arbitraria. Usualmente la función de onda no está escrita de un modo explícito y las relaciones se escriben como $[x, p_x] = i\hbar$, $[y, p_x] = 0$ y $[z, p_x] = 0$. (Los conmutadores juegan un papel muy importante en la mecánica cuántica.)

2.45 Hallar los elementos de matriz x_{01} , x_{02} , p_{01} y p_{02} para las coordenadas y momento de un oscilador armónico lineal (unidimensional).

2.46 Una partícula se mueve en una caja de potencial unidimensional de ancho a . A partir de las funciones de onda normalizadas hallar los elementos de matriz x_{0n} y p_{0n} . Mostrar además que $p_{0n} = im\omega_{0n}x_{0n}$, donde

$$\omega_{0n} = (E_n - E_0)/\hbar.$$

2.47 Hallar la regla de selección para la transición dipolar eléctrica de una partícula en una caja de potencial unidimensional. [Sugerencia: Recordar el ejemplo 2.10.]

2.48 Probar que si ψ_1 y ψ_2 son funciones propias independientes de un operador lineal correspondientes al mismo valor propio degenerado, la función $\phi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ es también una función propia del operador correspondiente al mismo valor propio degenerado. Probar también que si ψ_1 y ψ_2 no son ortogonales es posible, escogiendo las constantes, hacer la función propia ϕ normalizada y ortogonal a ψ_1 . Este resultado es muy importante porque muestra que siempre se puede

suponer que las funciones propias correspondientes a los valores propios degenerados son ortogonales. Extender el método al caso de tres funciones propias ψ_1, ψ_2, ψ_3 , haciendo dos combinaciones lineales ϕ_1 y ϕ_2 de estas tres funciones que estén normalizadas y sean ortogonales a ψ_3 .

2.49 La curvatura de una función $\psi(x)$ es proporcional a $d^2\psi/dx^2$. Usando la ecuación de Schrödinger, probar que si $E < E_p(x)$, la función de onda $\psi(x)$ es cóncava hacia el eje X y que si $E > E_p(x)$ la función de onda $\psi(x)$ es convexa hacia el eje X . Comprobar este resultado con los gráficos de las funciones de onda consideradas en este capítulo.

ATOMOS CON UN ELECTRON

- 3.1 *Introducción*
- 3.2 *Atomo de hidrógeno*
- 3.3 *Espectro del hidrógeno*
- 3.4 *Cuantización del momentum angular*
- 3.5 *Funciones de onda de un electrón en un campo de fuerzas centrales*
- 3.6 *Efecto Zeeman*
- 3.7 *Espín del electrón*
- 3.8 *Adición de momenta angulares*
- 3.9 *Interacción espín-órbita*

3.1 Introducción

Comenzaremos nuestro estudio de los átomos resumiendo las ideas fundamentales acerca de su estructura atómica. Un átomo tiene una dimensión total del orden de 10^{-8} m. Está compuesto de un núcleo relativamente pesado (cuyas dimensiones son del orden de 10^{-14} m) alrededor del cual se mueven los electrones, cada uno de carga $-e$, que ocupan el resto del volumen atómico. El núcleo está compuesto de A partículas (A es el *número másico*) llamadas *nucleones*, de las cuales Z son protones (Z es el *número atómico*), cada uno de carga $+e$, y $N (= A - Z)$ son neutrones que no tienen carga eléctrica. El núcleo posee entonces una carga positiva $+Ze$. En cualquier átomo el número de electrones es igual al de protones (es decir Z) por lo que el átomo es un sistema eléctricamente neutro. Sin embargo, en ciertas circunstancias un átomo puede ganar o perder algunos electrones, cargándose negativa o positivamente; en este caso se denomina *ion*. La masa del nucleón es cerca de 1850 veces más grande que la del electrón; en consecuencia, la masa del átomo es prácticamente igual a la de su núcleo.

Sin embargo, los electrones Z de un átomo son responsables de la mayoría de las propiedades atómicas que se reflejan en las propiedades macroscópicas de la materia, tales como las propiedades elásticas y electromagnéticas de los diversos materiales. Las interacciones electromagnéticas entre electrones y núcleos de átomos diferentes juegan un papel básico en la ligadura de átomos para formar moléculas, en las reacciones químicas y en prácticamente todas las propiedades macroscópicas de la materia.

Podemos explicar el movimiento de los electrones alrededor del núcleo considerando sólo las interacciones electromagnéticas entre los electrones y los componentes del núcleo (protones y neutrones). Siendo las interacciones electromagnéticas bien comprendidas, ha sido posible desarrollar una descripción precisa del movimiento electrónico. El correspondiente problema nuclear es, sin embargo, más complejo, ya que entran en juego otras interacciones que no se comprenden tan bien. Para analizar el movimiento electrónico debemos usar los métodos de la mecánica cuántica discutidos en el capítulo anterior.

En este capítulo estudiaremos las propiedades de los átomos y de los iones que tienen un solo electrón (de los cuales el más simple es el átomo de hidrógeno) y en el capítulo siguiente consideraremos el problema de los átomos con muchos electrones. El átomo con un electrón nos ayudará a comprender los problemas básicos relacionados con la estructura atómica.

3.2 Atomo de hidrógeno

El átomo de hidrógeno es el más simple de todos los átomos. Su núcleo está compuesto de una sola partícula, un protón, de modo que tiene $A = 1$ y $Z = 1$. Alrededor del protón se mueve un solo electrón. Para que nuestros cálculos sean aplicables a otros átomos supondremos, sin embargo, que el núcleo contiene Z protones con una carga positiva igual a $+Ze$ (fig. 3-1). A esta altura haremos dos aproximaciones. La primera es que consideraremos que el núcleo está en

reposo en un sistema inercial; esto es razonable, ya que teniendo el núcleo una masa mucho mayor que el electrón, coincide prácticamente con el centro de masa del átomo, el cual está ciertamente en reposo en un sistema inercial mientras no actúen fuerzas externas sobre el átomo. La segunda aproximación es que supondremos que el campo eléctrico del núcleo es el de una carga puntual; esto es también razonable, ya que el núcleo tiene un tamaño muy pequeño (alrededor de 10^{-14} m) respecto a la distancia promedio electrón-núcleo (alrededor de

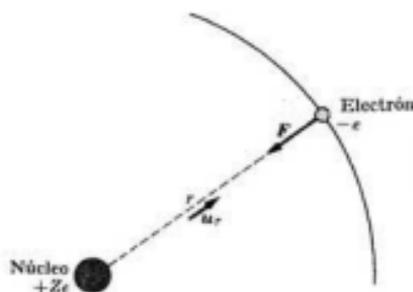


Fig. 3-1. Electrón moviéndose alrededor de un núcleo.

10^{-10} m). Sin embargo, el tamaño y la forma del núcleo se tienen que tomar en consideración en un análisis más refinado.

El movimiento del electrón respecto al núcleo está determinado por la interacción electromagnética entre ambos. Esta interacción se expresa mediante una fuerza central, que actúa sobre el electrón dependiente del inverso del cuadrado de la distancia, y que está dada por

$$\mathbf{F} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \mathbf{u}_r \quad (3.1)$$

La energía potencial del sistema electrón-núcleo es entonces

$$E_p(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (3.2)$$

Sin embargo, como debemos analizar el movimiento del electrón por medio de la mecánica cuántica, no podemos resolver el problema aplicando la ecuación de movimiento de Newton $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt$; sino que debemos establecer la ecuación de Schrödinger correspondiente al movimiento con una energía potencial dada por la ec. (3.2). Como el movimiento electrónico es tridimensional, debemos usar la ec. (2.9), que da una ecuación de Schrödinger de la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E\psi \quad (3.3)$$

La solución de esta ecuación es un problema matemático complejo para el cual el estudiante aún no está adecuadamente equipado. Por ahora, nos limitaremos

a considerar la energía de los estados estacionarios. En la sección 3.4 discutiremos las funciones de onda.

Introduzcamos una constante, denominada *constante de Rydberg*, definida por*

$$R_{\infty} = \frac{m_e c^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} \approx 1,0974 \times 10^7 \text{ m}^{-1}, \quad (3.4)$$

Los niveles de energía posibles de los estados estacionarios ligados del electrón, que obtenemos de la ec. (3.3), están dados por la expresión

$$E_n = - \frac{R_{\infty} h c Z^2}{n^2} = - \frac{2,180 \times 10^{-18} Z^2}{n^2} \text{ J}, \quad (3.5)$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$ (enteros positivos). Es a veces más conveniente expresar el resultado en electronvolts. Haciendo los cambios de unidades apropiados obtenemos

$$E_n = - \frac{13,607 Z^2}{n^2} \text{ eV}. \quad (3.6)$$

Obsérvese que los valores de la energía total son negativos. Esto concuerda con el resultado clásico para el movimiento bajo la acción de una fuerza inversamente proporcional al cuadrado de la distancia cuando la órbita es elíptica, es decir ligada. El cero de la energía se asigna al estado en que las dos partículas (electrón y núcleo) están en reposo a una distancia infinita una de otra. En consecuencia, la ec. (3.6) es equivalente a la energía que en la mecánica clásica corresponde al movimiento de partícula en órbitas elípticas; recordamos, sin embargo, al lector que en la mecánica cuántica no se habla de órbitas precisas.

La expresión (3.6) se aplica a cualquier átomo que tiene un solo electrón. Vale entonces para el hidrógeno ($Z = 1$) y sus isótopos: el deuterio ($A = 2, Z = 1$) y el tritio ($A = 3, Z = 1$); para el helio monopositivo He^+ (átomo de helio que

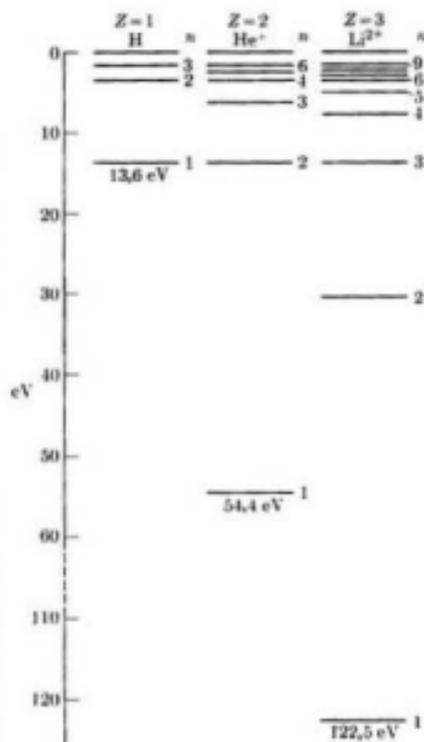


Fig. 3-2. Algunos niveles de energía del H, el He^+ y el Li^{2+} .

* La razón del uso del subíndice ∞ se aclarará más adelante.

ha perdido uno de sus dos electrones, $Z = 2$); para el litio bipoisitivo Li^{2+} (átomo de litio que ha perdido uno de sus tres electrones, $Z = 3$), etc. La fig. 3-2 muestra los correspondientes niveles teóricos de energía. Se indica además los valores apropiados de n para algunos niveles de cada serie.

TABLA 3-1 Constante de Rydberg
($R_{\infty} = 10\,978\,781\text{ m}^{-1}$)

Átomo	Z	A	R , m^{-1}
Hidrógeno (H)	1	1	10 967 758
Deuterio (D)	1	2	10 970 742
Tritio (T)	1	3	10 971 735
Helio (He^+)	2	4	10 972 227
Litio (Li^{2+})	3	7	10 972 880
Berilio (Be^{3+})	4	9	10 973 070

Obsérvese en la fig. 3-2 que algunos niveles coinciden. Por ejemplo, los niveles del hidrógeno coinciden respectivamente con los niveles del He^+ que tienen $n = 2, 4, 6, \dots$ y también con los de Li^{2+} que tienen $n = 3, 6, 9, \dots$. La razón de esto es que en la ec. (3.6) se cancelan algunos factores comunes debido a los respectivos valores de Z . En la naturaleza, sin embargo, no ocurre exactamente esta coincidencia. El núcleo no está en reposo en un sistema inercial; en realidad el núcleo y el electrón se mueven alrededor del centro de masa del sistema. Sin embargo, podemos analizar el movimiento relativo del electrón y el núcleo sustituyendo en la ec. (3.4) la masa del electrón por la masa reducida del sistema electrón-núcleo. Si M es la masa del núcleo, la masa reducida del átomo es*

$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M} = \frac{m_e}{1 + m_e/M}$$

Por lo tanto, en la ec. (3.5) debemos reemplazar la constante de Rydberg R_{∞} por

$$R = \frac{\mu e^4}{8 \epsilon_0^3 h^3 c} = R_{\infty} \frac{\mu}{m_e} = R_{\infty} \left(\frac{1}{1 + m_e/M} \right), \quad (3.7)$$

de modo que los niveles de energía están dados por $E = -RhcZ^2/n^2$. En la tabla 3-1 se da el valor de R para diferentes núcleos. Evidentemente R_{∞} corresponde al caso en que el núcleo tiene masa infinita ($M = \infty$) y esto explica el porqué del subíndice en el símbolo.

Hasta ahora hemos considerado solamente estados de energía negativa o *estados ligados*. Los estados de energía positiva, que en una descripción clásica corresponden a órbitas hiperbólicas, son *estados no ligados*, en los cuales un electrón con suficiente energía cinética se aproxima al núcleo desde una gran distancia y después de desviarse de su movimiento rectilíneo debido a su interacción coulomb-

* Ver, por ejemplo, el primer volumen de esta serie, *Física: Mecánica*, sección 9.3.

biana con el núcleo, vuelve nuevamente al infinito. Como se explicó en la sección 2.7, los estados de energía positiva no están cuantizados, ya que la energía cinética inicial puede tener cualquier valor arbitrario, por lo que constituyen un continuo de estados.

EJEMPLO 3.1. Deducción semiclásica de la expresión para los niveles de energía del hidrógeno.

Solución: Podemos justificar la ec. (3.5) para los estados estacionarios de los átomos hidrogenoides, tal como al final de la sección 2.5 justificamos los niveles de energía de una partícula que se mueve en una caja de potencial usando conceptos derivados de nuestro conocimiento de las ondas estacionarias. Supongamos que el electrón describa una órbita circular como se muestra en la fig. 3-3. Para que la órbita corres-

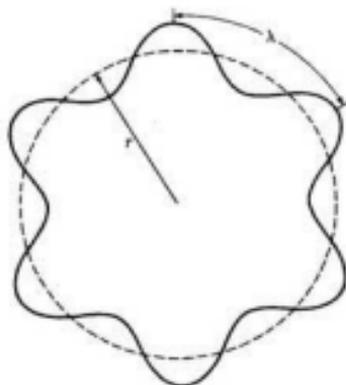


Fig. 3-3. Ondas estacionarias en una circunferencia.

ponda a un estado estacionario, parece lógico que deba permitir ondas estacionarias de longitud de onda $\lambda = h/p$. Podemos ver en la fig. 3-3 que esto requiere que la longitud de la órbita sea un múltiplo entero de λ , esto es: $2\pi r = n\lambda = nh/p$ o sea

$$rp = nh/2\pi. \quad (3.8)$$

Teniendo en cuenta que rp es el momentum angular del electrón, vemos que los estados estacionarios son aquellos para los cuales el momentum angular es un múltiplo entero de $\hbar = h/2\pi$. Como $p = m_e v$, también podemos escribir la ec. (3.8) en la forma

$$m_e v r = nh/2\pi. \quad (3.9)$$

Por otro lado, la ecuación de movimiento del electrón requiere que $F = m_e v^2/r$, donde F es la fuerza centrípeta. Pero en el caso de un electrón moviéndose alrededor de un núcleo, la fuerza centrípeta es la fuerza de Coulomb dada por la ec. (3.1). Por lo tanto,

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad \text{ó} \quad m_e v^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3.10)$$

Eliminando v con las ecs. (3.9) y (3.10), tenemos

$$r = \frac{n^2 \hbar^2 \epsilon_0}{\pi m_e Z e^2} = \frac{n^2}{Z} a_0, \quad (3.11)$$

donde

$$a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2} = 5,2917 \times 10^{-11} \text{ m} \quad (3.12)$$

se denomina *radio de Bohr*. La expresión (3.11) da el radio de las órbitas circulares permitidas y el radio de Bohr a_0 es el "radio" de la órbita fundamental ($n = 1$) del hidrógeno ($Z = 1$).

Usando la expresión (3.2) de la energía potencial del sistema electrón-núcleo, podemos expresar la energía del electrón en una órbita circular en la forma

$$E = E_k + E_p = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{Z e^2}{4\pi \epsilon_0 r}$$

En consecuencia, usando la ec. (3.10) para eliminar $m_e v^2$ obtenemos

$$E = -\frac{Z e^2}{4\pi \epsilon_0 (2r)} \quad (3.13)$$

Introduciendo el valor de r dado por la ec. (3.11), tenemos

$$E = -\frac{m_e e^4 Z^2}{8 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} = -\frac{R_{\infty} h c Z^2}{n^2},$$

que concuerda con las ecs. (3.4) y (3.6). Sin embargo, es necesario advertir lo siguiente respecto a nuestra deducción: además de ser aplicable sólo a órbitas circulares, depende en su totalidad de la validez de la ec. (3.8) que más adelante discutiremos con más detalle (sección 3.4). Por otra parte, debemos considerar que aquí el concepto de órbita se aplica a la región en que es más probable que se encuentre el electrón, siendo la ec. (3.11) sólo una indicación de la magnitud de la región en que el electrón se mueve la mayor parte del tiempo, y por lo tanto del tamaño del átomo.

Combinando las ecs. (3.9) y (3.11) encontramos que la velocidad del electrón en una órbita estacionaria es

$$v = \frac{nh}{2\pi m_e r} = \frac{hZ}{2\pi m_e a_0 n} = \frac{21,9 \times 10^6 Z}{n} \text{ m s}^{-1}.$$

Debemos considerar este resultado sólo como una indicación del orden de magnitud de la velocidad del electrón. Obsérvese que la velocidad disminuye cuando la energía aumenta (mayor valor de n). Tenemos también que $v/c \sim 7 \times 10^{-2} Z/n$, por lo que $v \ll c$, excepto para valores grandes de Z y valores pequeños de n . En consecuencia las correcciones relativistas no son muy importantes excepto cuando se desea una gran precisión. Sin embargo, estas correcciones son muy importantes desde el punto de vista teórico.

EJEMPLO 3.2. Estimar la magnitud del término correctivo en la ec. (3.7), debido al movimiento nuclear, para la energía de los estados estacionarios de los átomos más livianos, es decir, H, D, T, He⁺ y Li²⁺.

Solución: Como m_e/M es una cantidad muy pequeña, podemos usar la aproximación $(1+x)^{-1} = 1-x+\dots$ y escribir la ec. (3.7) en la forma

$$R = R_{\infty} \left(1 - \frac{m_e}{M}\right) \quad \text{ó} \quad \Delta R = R - R_{\infty} = -\frac{m_e}{M} R_{\infty}.$$

La masa de un átomo de número másico A se puede escribir con buena aproximación en la forma $M = 1,67 \times 10^{-27} A$ kg; además $m_e = 9,11 \times 10^{-31}$ kg. Por lo tanto, $m_e/M = 5,45 \times 10^{-4}/A$. Como la energía es proporcional a R , podemos escri-

bir entonces

$$\frac{\Delta E}{E} = -\frac{m_e}{M} = -100 \frac{m_e}{M} \% = -\frac{5,45 \times 10^{-4}}{A} \%$$

donde ΔE es el cambio de energía respecto al valor dado en la ec. (3.5). En la tabla 3-2 se dan los resultados para los elementos más livianos.

El hecho de que $\Delta E/E$ es diferente para H, D y T significa que los niveles de energía de estos tres isótopos del hidrógeno están ligeramente desplazados, resultando lo que se denomina *efecto isotópico*. Análogamente, los niveles pares de He^+ no coinciden exactamente con los de H. Fue esta pequeña diferencia la que llevó a Frankland y Lockyer a descubrir el helio cuando estaban analizando el espectro solar en 1868.

TABLA 3-2 Correcciones energéticas cuando se considera el movimiento nuclear

Atomo	H	D	T	He^+	Li^{2+}
A	1	2	3	4	7
$(m_e/M) \times 10^4$	5,45	2,75	1,82	1,36	0,78
$-(\Delta E/E), \%$	0,0545	0,0275	0,0182	0,0136	0,0078

3.3 Espectro del hidrógeno

Como vimos en la fig. 3-2, la energía de los estados estacionarios aumenta con el número cuántico n . La diferencia en energía entre dos niveles correspondientes a n_1 y n_2 (con $n_2 > n_1$) es, para un ion hidrogenoide,

$$E_2 - E_1 = \left(-\frac{RhcZ^2}{n_2^2} \right) - \left(-\frac{RhcZ^2}{n_1^2} \right) = RhcZ^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Aplicando la condición de Bohr, $\nu = (E_2 - E_1)/h$ (ec. 1.29), y despreciando los efectos de retroceso, la frecuencia de la radiación electromagnética emitida o absorbida por el átomo en una transición entre los estados correspondientes a n_1 y n_2 es

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{E_2 - E_1}{h} = RcZ^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \\ &= 3,2899 \times 10^{15} Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \text{ Hz.} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Los espectroscopistas prefieren a veces usar el *número de onda* $\tilde{\nu} = \nu/c = 1/\lambda$ en vez de la frecuencia.* Su razonamiento es que las medidas espectroscópicas deter-

* El número de onda $\tilde{\nu}$ da el número de longitudes de onda en la unidad de longitud y no se debe confundir con el número de onda $k = 2\pi/\lambda$, que está asociado con una partícula y que se definió en la sección 1.10.

minan generalmente longitudes de onda y no frecuencias. En el sistema MKSC el número de onda está dado en m^{-1} aunque la unidad más comúnmente usada es cm^{-1} . En este caso la ecuación anterior se escribe en la forma

$$\tilde{\nu} = RZ^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = 1,0974 \times 10^8 Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \text{cm}^{-1}.$$

Esta expresión (o la anterior) se denomina *fórmula de Balmer* y se aplica sólo a átomos hidrogenoides. Como en un espectroscopio (de prisma o de red) cada

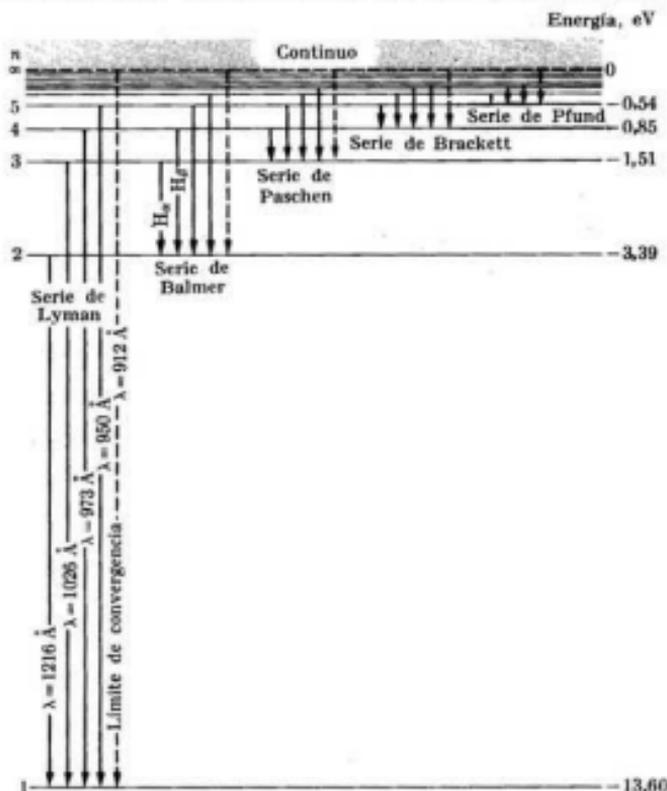


Fig. 3-4. Transiciones radiativas en el hidrógeno.

transición aparece como una línea (que es la imagen de la rendija), el espectro se llama *espectro de línea*; se usa frecuentemente las palabras línea y transición como sinónimos.

El espectro del hidrógeno ($Z = 1$) (y análogamente el espectro de otros átomos) se clasifica en series, formadas cada una por las transiciones que tienen

en común el nivel de energía más bajo. La fig. 3-4 representa las siguientes series del hidrógeno:

- (1) Serie de Lyman: $n_1 = 1, n_2 = 2, 3, 4, \dots$
- (2) Serie de Balmer: $n_1 = 2, n_2 = 3, 4, \dots$
- (3) Serie de Paschen: $n_1 = 3, n_2 = 4, 5, \dots$
- (4) Serie de Brackett: $n_1 = 4, n_2 = 5, 6, \dots$
- (5) Serie de Pfund: $n_1 = 5, n_2 = 6, 7, \dots$

La serie de Balmer, que se encuentra principalmente en la región visible, se observa fácilmente con un espectroscopio común. La serie de Lyman cae en la región ultravioleta y las otras en el infrarrojo. Las transiciones indicadas en la fig. 3-4 corresponden al espectro de emisión; las transiciones inversas tienen lugar en el espectro de absorción.

Históricamente, fue el problema de explicar los espectros de línea del hidrógeno y de otros elementos lo que originó las primeras aplicaciones de la teoría cuántica al átomo. El matemático suizo J. Balmer (1825-1898), mucho antes del advenimiento de la teoría cuántica, obtuvo empíricamente la fórmula (3.14) en 1885 sin ninguna explicación teórica relacionada con la estructura atómica. En 1913, el físico danés Niels Bohr, entonces en la Universidad de Cambridge, dedujo la ec. (3.14) introduciendo por primera vez el concepto de estados estacionarios. Como la mecánica cuántica no había sido aún formulada, el método de Bohr consistía en una serie de suposiciones *ad hoc* muy parecidas a los cálculos hechos en el ejemplo 3.1.

EJEMPLO 3.3. Determinar la primera energía de excitación y la energía de ionización del hidrógeno.

Solución: Como se explicó en la sección 1.8 al discutir el experimento de Franck-Hertz la primera energía de excitación es la energía necesaria para llevar un átomo de su estado fundamental al primer (o más bajo) estado excitado. En los átomos hidrogenoides, estos estados corresponden, respectivamente, a $n = 1$ y $n = 2$. Poniendo $n = 1$ y $n = 2$ en la ec. (3.6) con $Z = 1$, tenemos $E_1 = -13,6$ eV y $E_2 = -3,4$ eV. La energía necesaria para excitar el átomo del estado fundamental al primero excitado es entonces $E_2 - E_1 = 10,2$ eV. Si se lleva un átomo de hidrógeno a su primer estado excitado por medio de una colisión inelástica electrónica, como ocurre en una descarga a través de un gas, vuelve al estado fundamental emitiendo radiación de frecuencia

$$\nu = (E_2 - E_1)/h = 2,47 \times 10^{15} \text{ Hz}$$

o longitud de onda

$$\lambda = 1,216 \times 10^{-7} \text{ m,}$$

que en este caso cae en la región ultravioleta. La energía de ionización es la energía necesaria para llevar el electrón desde el estado fundamental ($n = 1$) al estado de energía nula ($n = \infty$) y es por lo tanto igual a $-E_1 = 13,6$ eV. La ionización puede ser el resultado de una colisión inelástica del átomo de hidrógeno con un electrón u otra partícula cargada, con otro átomo, o por absorción de un fotón de frecuencia igual o mayor que $3,29 \times 10^{15}$ Hz o sea con una longitud de onda igual o menor que $9,12 \times 10^{-8}$ m.

3.4 Cuantización del momentum angular

Hasta ahora hemos visto que la energía de un sistema atómico está cuantizada. Debemos explorar la posibilidad de que otras cantidades físicas también estén cuantizadas, es decir, restringidas a sólo ciertos valores para el sistema. Señalamos al final de la sección 2.5 que el momentum de una partícula en una caja de potencial también está cuantizado. En la mayoría de los ejemplos del capítulo 2 el momentum y/o la energía eran constantes de movimiento, es decir, cantidades cuyo valor no cambia durante el movimiento de la partícula. Es entonces razonable investigar si otras constantes de movimiento están cuantizadas o no.

Sabemos que para el movimiento bajo la acción de fuerzas centrales el momentum angular $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ respecto al centro de fuerza es una constante de

TABLA 3-3 Designación de los estados de momentum angular y degeneración esencial para el movimiento bajo la acción de fuerzas centrales

Momentum angular, l	0	1	2	3	4	5
Símbolo	s	p	d	f	g	h
Degeneración, $g = 2l + 1$	1	3	5	7	9	11

movimiento. Esto también es cierto en la mecánica cuántica. Un análisis teórico y experimental cuidadoso muestra que el momentum angular está cuantizado, es decir: sólo puede tener valores discretos. Se puede demostrar (ver ejemplo 3.4) que el módulo del momentum angular está caracterizado por los valores

$$L^2 = l(l + 1)\hbar^2, \quad (3.15)$$

donde $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ es un entero no negativo. Sin embargo, en los átomos hidrogenoides los valores de l para cada nivel de energía están limitados por los valores de n correspondientes a dicho nivel, siendo $n - 1$ el valor máximo de l . En consecuencia

en un campo coulombiano, para cada valor de n que especifica un nivel de energía, hay n valores diferentes del momentum angular desde $l = 0$ hasta $l = n - 1$.

Es costumbre designar los valores posibles de l por medio de letras conforme al esquema de la tabla 3-3. Tenemos entonces: para $n = 1$, $l = 0$ ó s; para $n = 2$, $l = 0$ y 1 ó s y p; para $n = 3$, $l = 0, 1$ y 2 ó s, p y d, etc.

En un campo central diferente del coulombiano los valores de l asociados con cada nivel de energía también son diferentes. Por ejemplo, en el caso de un oscilador tridimensional la energía potencial es $E_p = \frac{1}{2}kr^2$. Los niveles de energía

posibles son $E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ (ver ec. 2.22) y para cada n los valores de l son $n, n-2, n-4, \dots, 1$ ó 0 . Tenemos entonces: para $n=0, l=0$ ó s ; para $n=1, l=1$ ó p ; para $n=2, l=0$ y 2 ó s y d , y así sucesivamente.

Hay evidencia experimental (que se discutirá más adelante) de que el momentum angular, además de su limitación en módulo, está restringido en cuanto a *dirección*; esta situación se denomina *cuantización espacial*. Esto significa que el ángulo que \mathbf{L} forma con el eje Z (fig. 3-5) no es arbitrario; en otras palabras: se puede demostrar (ver el ejemplo 3.4) que los valores de la componente L_z están cuantizados y dados por

$$L_z = m_l \hbar, \quad (3.16)$$

donde $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$, esto es, m_l es un número entero entre 0 y $\pm l$. El número cuántico m_l no puede ser mayor que l porque entonces L_z sería mayor que $|\mathbf{L}|$, lo cual es imposible. Concluimos entonces que:

para cada valor del momentum angular hay $2l + 1$ valores de m_l o sea $2l + 1$ orientaciones diferentes de \mathbf{L} .

La fig. 3-6 ilustra esta situación para $l=1$ y $l=2$.

La cantidad $g = 2l + 1$ se denomina *degeneración esencial* del estado de momentum angular. Se puede probar que esta degeneración es consecuencia de la simetría esférica del movimiento bajo la acción de una fuerza central. En la tabla 3-3 se da el valor de g para algunos valores del momentum angular.

En la mecánica clásica el momentum angular bajo la acción de una fuerza central es constante en módulo y dirección. Por el contrario, en la mecánica cuántica el módulo del momentum angular está dado por la ec. (3.15) y una de sus componentes por la ec. (3.16). Pero para especificar la dirección del momentum angular necesitamos conocer las otras dos componentes, L_x y L_y . Un análisis detallado que no reproducimos aquí por su complejidad matemática, muestra que

es imposible conocer exactamente más de una componente del momentum angular.

Por lo tanto, si conocemos L_z , lo más que podemos saber de L_x y L_y es que están dentro de las indeterminaciones ΔL_x y ΔL_y que satisfacen la relación de indeterminación

$$\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{1}{2} \hbar L_z.$$

Esta relación es similar a las relaciones de indeterminación para la posición y

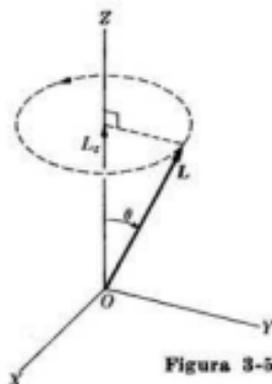


Figura 3-5

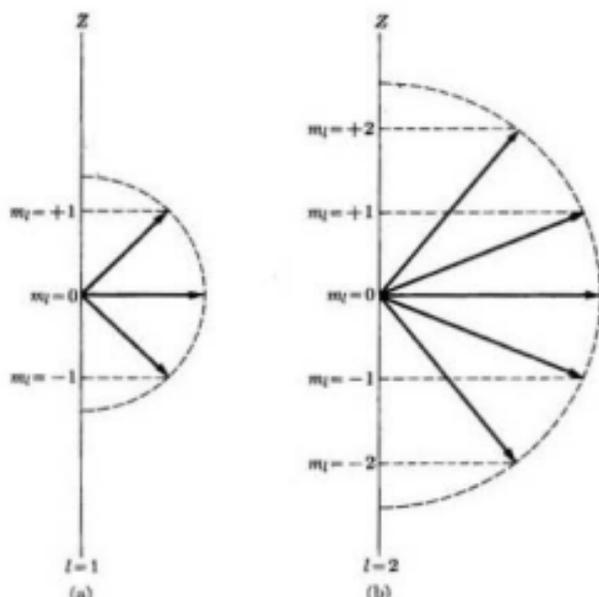


Fig. 3-6. Cuantización espacial para $l = 1$ y $l = 2$.

el momentum (ec. 1.48), y para la energía y el tiempo (ec. 1.49). En otras palabras:

en la mecánica cuántica es imposible determinar precisamente la dirección del momentum angular.

Como sólo podemos conocer $|L_z|$ y L_z , imaginaremos el vector momentum angular \mathbf{L} de la fig. 3-5 como realizando un movimiento de precesión alrededor del eje Z , formando con él un ángulo constante θ .

Podemos concluir de esta discusión que los niveles de energía de los átomos hidrogenoides son algo más complejos que la representación simple implícita en la ec. (3.6) y la fig. 3-2. En un campo coulombiano cada nivel de energía, que corresponde a un n dado, contiene n estados diferentes de momentum angular, todos con la misma energía y con l entre cero y $n - 1$ (esto ha sido ilustrado en la fig. 3-7). Estos niveles se indican con ns , np , nd , etc. (Este resultado concuerda con la descripción clásica del movimiento bajo la acción de una fuerza proporcional al inverso del cuadrado de la distancia, para la cual la energía es independiente del momentum angular, aunque la excentricidad de las órbitas elípticas depende del momentum angular.) En una teoría más refinada de los átomos con un electrón que tome en cuenta otros efectos (como correcciones relativistas), los diferentes estados de momentum angular correspondientes al mismo n tienen energías diferentes.

Si la fuerza no es inversamente proporcional al cuadrado de la distancia, los niveles que tienen el mismo valor de n pero momenta angulares diferentes (es

decir, niveles ns , np , nd , etc.) no tienen necesariamente la misma energía. Así, en un campo de fuerzas centrales, la energía depende en general de n y de l , pero no puede depender de m_l porque en un campo central de fuerzas la orientación de la órbita carece de importancia.

El hecho de que en un átomo hidrogenoide cada nivel está compuesto de varios estados de momentum angular, es sin embargo importante desde el punto de vista de las transiciones. En el caso de movimiento en un potencial central, las reglas de selección para transiciones dipolares eléctricas son

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_l = 0, \pm 1. \quad (3.17)$$

Estas reglas de selección están impuestas por la ley de conservación del momentum angular, ya que el fotón emitido o absorbido lleva momentum angular, por lo que el momentum angular del átomo debe cambiar para compensar el momentum angular que lleva el fotón emitido o absorbido. La ley de conservación del momentum angular y la regla cuántica de suma de momenta angulares (ver sección 3.8) permitiría $\Delta l = 0, \pm 1$. Sin embargo, la paridad de las funciones de onda en un potencial central (que se discutirá en la sección 3.5) prohíbe la posibilidad $\Delta l = 0$.

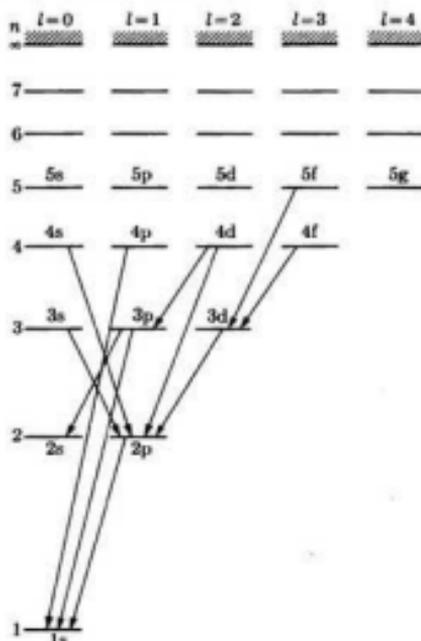


Fig. 3-7. Transiciones entre diversos estados de momentum angular.

Las reglas de selección (3.17) requieren que las transiciones ocurran sólo entre estados de momentum angular ubicados en columnas adyacentes en la fig. 3-7. Se han indicado algunas de estas transiciones posibles. Obsérvese que de acuerdo con estas reglas, no se puede pasar del estado $2s$ al $1s$ que es el único estado disponible de energía menor. Por esta razón el estado $2s$ se llama *estado metastable*. Las reglas (3.17) son válidas para transiciones dipolares eléctricas, que son las más probables. Para otras transiciones, como las dipolares magnéticas o las cuadrupolares eléctricas, las reglas de selección son diferentes; estas transiciones tienen una probabilidad mucho menor que las dipolares eléctricas. Es por esta razón que en los espectros atómicos sólo se toma en consideración las transiciones dipolares eléctricas.

Hagamos ahora algunos comentarios sobre la ec. (3.8). Teniendo en cuenta que para una órbita circular rp es el momentum angular L , vemos que la ec. (3.8)

equivale a $L = n\hbar$. Pero este resultado está en desacuerdo con la ec. (3.15), es decir, $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$. Por lo tanto el modelo simple e intuitivo usado en el ejemplo 3.1 para llegar a la ec. (3.8) es incorrecto (aunque sea correcto el resultado obtenido). Esta es otra advertencia al estudiante de que no es posible, a no ser que se tenga mucho cuidado, extrapolar conceptos ondulatorios al campo de la mecánica cuántica. En este caso del momentum angular, la discrepancia se debe a que es imposible confinar las ondas electrónicas en una trayectoria estrictamente circular. Sin embargo, poniendo $l = n - 1$ en la ec. (3.15) obtenemos

$$L^2 = (n - 1)n\hbar^2 = (n^2 - n)\hbar^2.$$

Cuando n es grande podemos aproximar esta expresión escribiendo $L^2 = n^2\hbar^2$ o sea $L = n\hbar$, que concuerda con la ec. (3.8). Luego $l = n - 1$ con n grande aproxima el caso clásico de órbitas circulares. Esto es una ilustración del *principio de correspondencia* de Bohr, que dice que cuando los números cuánticos son grandes la descripción cuántica se aproxima a la clásica.

3.5 *Funciones de onda de un electrón en un campo de fuerzas centrales*

La función de onda $\psi(x, y, z)$ para los átomos hidrogenoides se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger, ec. (3.3). La energía potencial que aparece en esa ecuación, $E_p = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$, corresponde a una fuerza central. Podemos esperar que las funciones de onda de todos los problemas con fuerzas centrales, es decir, problemas en los que la energía potencial es función solamente de la distancia y tiene por lo tanto la forma $E_p(r)$, tengan cierta similitud.

A causa de la simetría esférica de la energía potencial, es posible simplificar la discusión de problemas con fuerzas centrales utilizando las coordenadas esféricas r, θ, ϕ (fig. 3-8). Podemos demostrar que la función de onda para un electrón en un campo central se puede escribir como el producto de dos factores, uno que depende de la distancia del electrón al origen y otro que depende de la orientación del vector posición \mathbf{r} , especificada por los ángulos θ y ϕ . Podemos escribir entonces para la función de onda

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi).$$

La parte radial $R(r)$ depende de la forma particular de la energía potencial $E_p(r)$ correspondiente a la fuerza central que actúa sobre el electrón. En cambio, como la parte angular $Y(\theta, \phi)$ es consecuencia de la simetría esférica de la fuerza central, no depende de la forma particular de la energía potencial $E_p(r)$. En otras palabras, *las funciones angulares $Y(\theta, \phi)$ son las mismas para todos los problemas con fuerzas centrales.*

No discutiremos la forma de obtener las funciones de onda, aunque es un problema matemático de solución directa (ver ejemplo 3.4). En vez de ello dis-

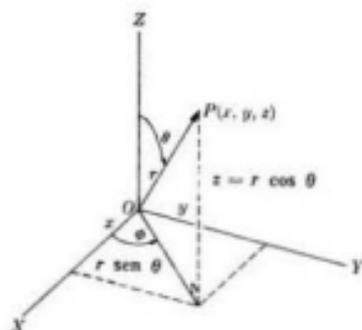
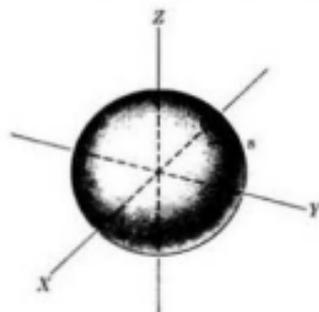


Fig. 3-8. Coordenadas esféricas.

Fig. 3-9. Función angular de onda para los estados s ($l = 0$).

cutiremos las propiedades más importantes de las funciones de onda.

En un problema con fuerzas centrales la parte angular de la función de onda está determinada enteramente por el módulo y la componente Z del momentum angular del electrón.

El módulo del momentum angular está determinado por el número cuántico l y la componente Z u orientación está determinada por m_l . Por esa razón, las funciones angulares correspondientes a valores específicos de L^2 y L_z se designan por $Y_{lm}(\theta, \phi)$. Los matemáticos llaman *armónicos esféricos* a estas funciones.

La tabla 3-4 da las funciones angulares Y_{lm} para $l = 0, 1$ y 2 . Esta es la forma que se aplica en la mayoría de los problemas físicos. La tabla 3-5 da las funciones angulares en una forma más adecuada para discutir el enlace molecular. Las funciones de la tabla 3-5 no pertenecen a un valor particular de m_l sino de m_l^2 o $|m_l|$, correspondiendo a L^2 y L_z^2 en vez de L_z .

Vemos en la tabla 3-5 que para $l = 0$ (estados s) la única función de onda es independiente de los ángulos, es decir: *los estados s son esféricamente simétricos*. Esto se ha ilustrado en el diagrama polar de la fig. 3-9 donde el valor de la función s para cada dirección (θ, ϕ) es igual a la longitud de un segmento desde el origen. El lugar geométrico de los extremos es una superficie esférica. Se comprende este resultado porque si el momentum angular es cero, no hay orientación preferencial de la órbita del electrón.

Para $l = 1$ (estados p) hay tres funciones angulares que representan las tres orientaciones posibles del momentum angular o los tres valores de $m_l = 0, \pm 1$. En la tabla 3-5 se designan con p_x, p_y y p_z y la fig. 3-10 muestra sus diagramas polares. Estas funciones corresponden a un movimiento preferencial del electrón según cada uno de los ejes de coordenadas; este resultado es muy importante para describir el enlace químico.

Para $l = 2$ (estados d) hay cinco funciones angulares diferentes. La distribución de estos estados es más compleja, como se desprende de los diagramas

TABLA 3-4 Funciones angulares correspondientes a L^2 y L_z

l	m_l	Función angular
0	0	$Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$
1	0	$Y_{10} = \sqrt{3/4\pi} \cos \theta$
	± 1	$Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
2	0	$Y_{20} = \frac{1}{2} \sqrt{5/4\pi} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	± 1	$Y_{2\pm 1} = \mp \sqrt{15/8\pi} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$
	± 2	$Y_{2\pm 2} = \frac{1}{2} \sqrt{15/2\pi} \sin^2 \theta e^{\pm i2\phi}$

TABLA 3-5 Funciones angulares correspondientes a L^2 y L_z^2

l	$ m_l $	Función angular
0	0	$s = 1/\sqrt{4\pi}$
1	0	$p_z = \sqrt{3/4\pi} \cos \theta$
	1	$p_x = \sqrt{3/4\pi} \sin \theta \cos \phi$ $p_y = \sqrt{3/4\pi} \sin \theta \sin \phi$
2	0	$d_{z^2-y^2} = \sqrt{5/16\pi} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	1	$d_{xz} = \sqrt{15/4\pi} \sin \theta \cos \theta \cos \phi$ $d_{yz} = \sqrt{15/4\pi} \sin \theta \cos \theta \sin \phi$
	2	$d_{x^2-y^2} = \sqrt{15/4\pi} \sin^2 \theta \cos 2\phi$ $d_{xy} = \sqrt{15/4\pi} \sin^2 \theta \sin 2\phi$

polares de la fig. 3-11, que representan las funciones d de la tabla 3-5. Para valores mayores de l la situación se hace aún más compleja.

Una propiedad importante de las funciones angulares Y_{lm_l} es que tienen paridad igual a $(-1)^l$. Esto es, para $l = 0, 2, 4, \dots$, entero par, las funciones Y_{lm_l} tienen el mismo valor y el mismo signo en puntos situados simétricamente respecto al origen de coordenadas, siendo por lo tanto funciones pares, mientras que para $l = 1, 3, 5, \dots$, entero impar, las funciones Y_{lm_l} tienen el mismo valor pero signos opuestos en puntos simétricos, siendo entonces funciones impares. Se puede demostrar que para transiciones dipolares eléctricas los estados inicial y final deben tener paridades opuestas, por lo que estos estados no pueden tener

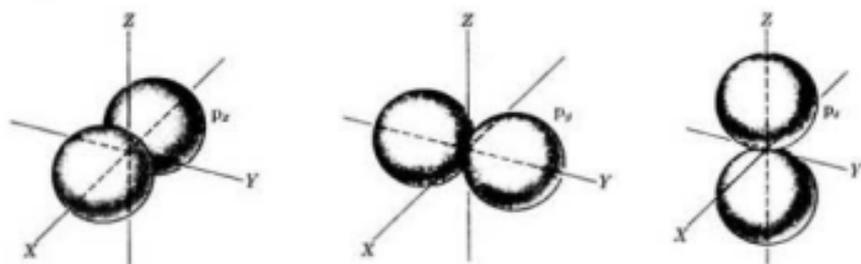


Fig. 3-10. Funciones angulares de onda para los estados p ($l = 1$).

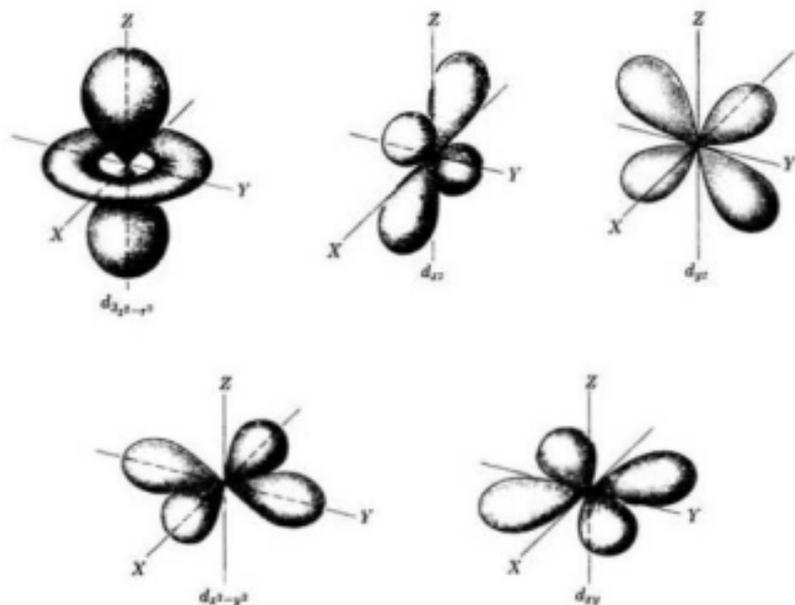


Fig. 3-11. Funciones angulares de onda para los estados d ($l = 2$).

el mismo valor de l . Por esa razón, el valor $\Delta l = 0$ es imposible para esas transiciones, como se indicó anteriormente en relación con la ec. (3.17).

La parte radial $R(r)$ de la función de onda $\psi(r, \theta, \phi)$ depende de la energía y del módulo del momentum angular, pero no de su orientación. Podemos entender esto porque dada la simetría esférica de un campo central, la distribución radial del movimiento electrónico debe ser independiente de la orientación de su momentum angular, o sea que debe ser independiente de m_l . Este es el análogo

TABLA 3-6 Funciones de onda radiales de los átomos hidrogenoides

n	l	$R_{nl}(r)$ ($\rho = 2Zr/na_0$)
1	0	$R_{10}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\rho/2}$
2	0	$R_{20}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (2 - \rho)e^{-\rho/2}$
	1	$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2}$
3	0	$R_{30}(r) = \frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (6 - 6\rho + \rho^2)e^{-\rho/2}$
	1	$R_{31}(r) = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho(4 - \rho)e^{-\rho/2}$
	2	$R_{32}(r) = \frac{1}{9\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/2}$

cuántico del resultado clásico de que la energía y el módulo del momentum angular determinan el "tamaño" de la órbita. Por lo tanto, la función radial depende del número cuántico n asociado con la energía, y de l pero no de m_l . Luego, estas funciones radiales se representan por $R_{nl}(r)$ y la función de onda total es

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi). \quad (3.18)$$

La tabla 3-6 da las funciones radiales correspondientes a los tres primeros niveles de energía de los átomos hidrogenoides. La fig. 3-12 muestra estas funciones. La línea de trazos indica en cada caso el radio clásico de la órbita, conforme a la ec. (3.11).

Podemos ver que, aunque lo más probable es que el electrón se encuentre dentro del radio clásico de la órbita, también se puede encontrar a distancias mayores. La probabilidad de encontrar el electrón dentro de una capa esférica de radios r y $r + dr$ independientemente de su posición angular es proporcional a $r^2 [R_{nl}(r)]^2$ (ver problema 3.25). La fig. 3-13 muestra estas probabilidades.

Una particularidad interesante que se aprecia fácilmente en la fig. 3-12 es que las funciones radiales para electrones s tienen valores relativamente grandes para r pequeño. Decimos que los electrones s describen órbitas *penetrantes* que llegan muy cerca del núcleo. Los electrones p son menos penetrantes, los electrones d aún menos y así sucesivamente para valores crecientes del momentum angular. Esto es fácil de entender si consideramos que (tanto en la mecánica clásica como en la cuántica) el movimiento radial bajo la acción de una fuerza

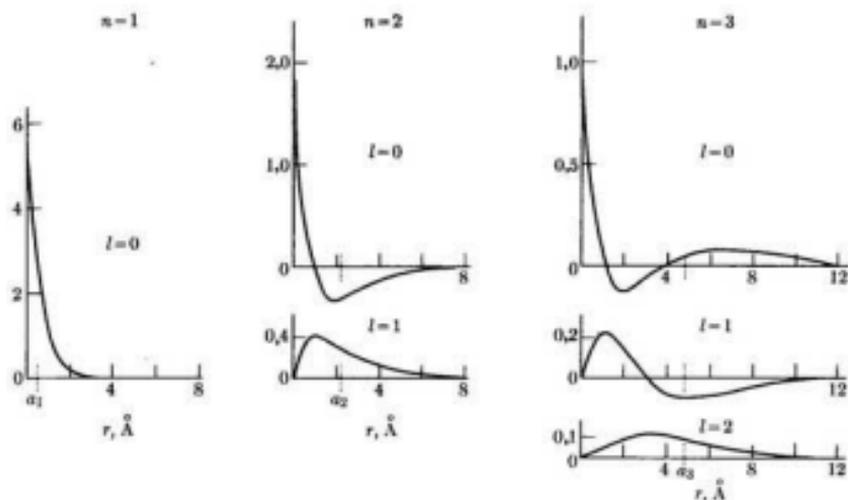


Fig. 3-12. Funciones radiales del hidrógeno para $n = 1, 2$ y 3 . En cada caso, la ordenada de la curva es $[R_{nl}(r) \text{ m}^{-3/2}] \times 10^{-4}$.

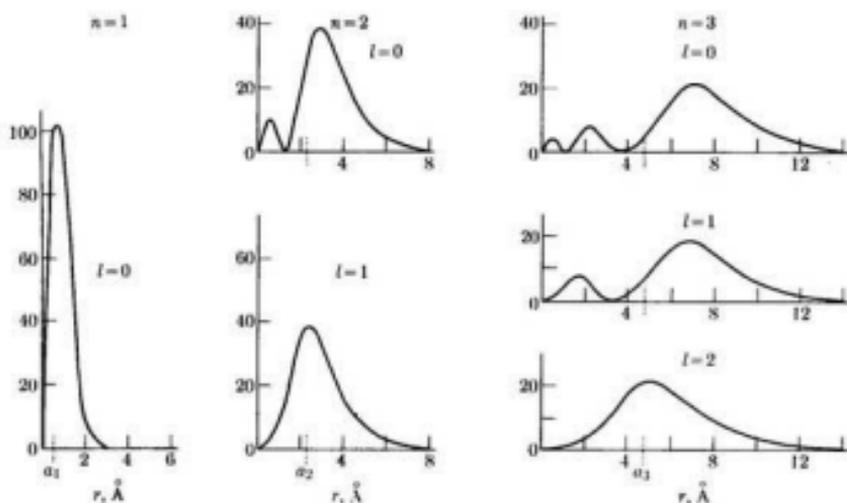


Fig. 3-13. Distribución radial de probabilidad en el hidrógeno para $n = 1, 2$ y 3 . En cada caso la ordenada es $[r^2 R_{nl}(r) \text{ m}^{-1}] \times 10^{-16}$.

central corresponde a un potencial efectivo

$$E_{p,ef} = E_p(r) + \frac{L^2}{2mr^2} = E_p(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}, \quad (3.19)$$

donde $E_p(r)$ es la energía potencial de la fuerza central (el potencial coulombiano en el caso de un electrón) y $L^2/2mr^2$ se denomina *potencial centrifugo* (ver ejemplo 3.5). Para los estados s tenemos $l = 0$ y no hay potencial centrifugo por lo que $E_{p,ef} = E_p$. Luego, un electrón s ligado o con energía E negativa (fig. 3-14a) se puede mover clásicamente entre O y A teniendo en consecuencia acceso al origen de coordenadas. La forma de la parte radial de la función de onda debe ser entonces como se muestra en la parte inferior de la figura. (El número de oscilaciones de la función de onda depende de la energía). Para otros valores del momentum angular, la forma del potencial efectivo es como se muestra en la fig. 3-14(b). Clásicamente, el electrón se debe mover por lo tanto entre B y C . Traducimos esto al lenguaje cuántico diciendo que la función de onda debe decrecer rápidamente fuera de los límites clásicos del movimiento, debiendo ser entonces muy pequeña cerca del origen. Cuanto mayor sea el momentum angular, tanto más lejos del origen comienza la función de onda a ser apreciable y tanto menos "penetrante" es la órbita.

Esta característica del movimiento electrónico se refleja en muchas propiedades importantes del átomo. Por ejemplo: los electrones s son muy sensibles a la forma y a la estructura interna del núcleo, mientras que los electrones que tienen momentum angular mayor son mucho menos sensibles a la forma y a la estructura nucleares.

EJEMPLO 3.4. Análisis de los operadores de momentum angular y sus funciones propias.

Solución: Recordemos de la tabla 2-2, sección 2.12, que el operador momentum angular está dado por

$$\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla = -i\hbar \begin{vmatrix} \mathbf{u}_x & \mathbf{u}_y & \mathbf{u}_z \\ x & y & z \\ \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z \end{vmatrix},$$

de donde concluimos que la componente Z es

$$L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (3.20)$$

y expresiones parecidas para L_x y L_y . Es más conveniente expresar L_z en coordenadas esféricas. Observando en la fig. 3-8 que

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta,$$

tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial \phi} = \frac{\partial x}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial z}.$$

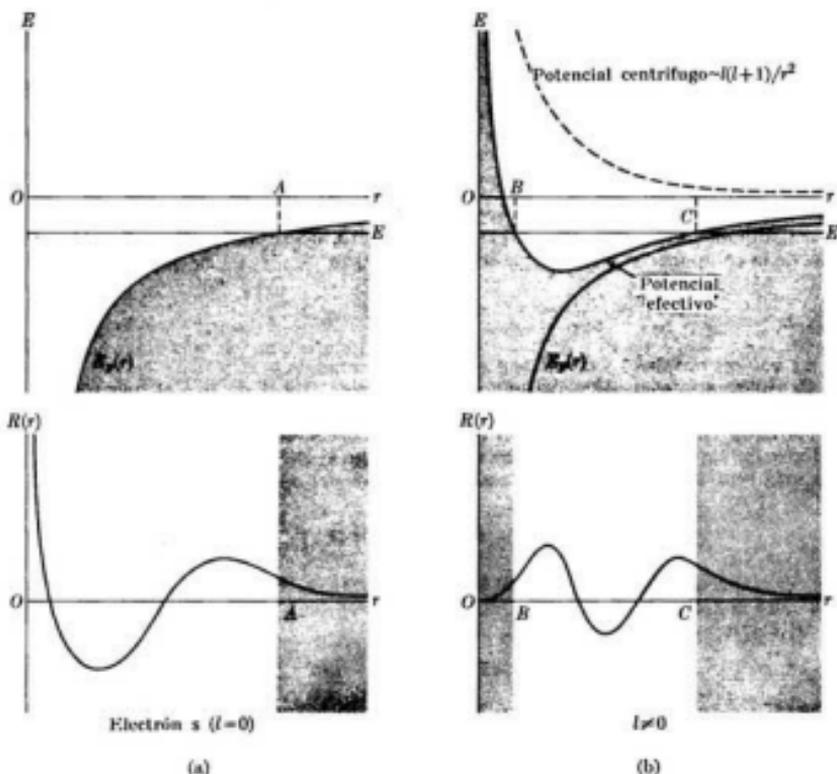


Fig. 3-14. Potencial efectivo y función de onda radial para $l = 0$ y $l \neq 0$ en el movimiento bajo la acción de una fuerza central.

Pero $\partial x / \partial \phi = -r \sin \theta \sin \phi = -y$, $\partial y / \partial \phi = r \sin \theta \cos \phi = x$ y $\partial z / \partial \phi = 0$. Luego,

$$\frac{\partial}{\partial \phi} = -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y},$$

con lo que el operador L_z se escribe en la forma

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (3.21)$$

Se puede demostrar que esta relación es absolutamente general y que el operador cuántico correspondiente a la componente del momentum angular según cualquier dirección está dado por $-i\hbar \partial / \partial \phi$, donde ϕ es un ángulo medido alrededor de esa dirección. La ecuación de valores propios es, conforme a la ec. (2.48), $L_z \Phi = L_z \Phi$, donde $\Phi(\phi)$ es la función propia y L_z el valor propio. Por lo tanto, usando la expresión (3.21) de L_z obtenemos

$$-i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} = L_z \Phi \quad \text{ó} \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} = im \Phi,$$

donde hemos puesto $m_l = L_z/\hbar$ o $L_z = m_l \hbar$. La solución de esta ecuación es $\Phi = Ce^{im_l \phi}$ donde C es la constante de normalización. Como un mismo punto del espacio está representado por ϕ y por $\phi + 2\pi$, es necesario que $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$, lo cual implica que $e^{im_l \phi} = e^{im_l(\phi + 2\pi)}$ o $e^{i2\pi m_l} = 1$. Esto exige que m_l sea un número entero, es decir: $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, como ya se indicó en la sección 3.4. Para determinar C aplicamos la condición de normalización, que en nuestro caso es $\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\phi = 1$ o

$$\int_0^{2\pi} (C^* e^{-im_l \phi}) (C e^{im_l \phi}) d\phi = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi |C|^2 = 1,$$

o sea, suponiendo C real, $C = 1/\sqrt{2\pi}$. Por lo tanto, las funciones propias normalizadas de la componente Z del momentum angular son

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \phi}, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (3.22)$$

y los valores propios $L_z = m_l \hbar$ son múltiplos enteros de \hbar .

El cuadrado del módulo del momentum angular está dado por el operador $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$, donde L_x y L_y son operadores con expresiones similares a la de L_z dada en la ec. (3.20). Transformando a coordenadas esféricas por medio de un cálculo algebraico elaborado, se encuentra que el cuadrado del momentum angular está representado por el operador cuántico

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (3.23)$$

La ecuación de valores propios es $L^2 Y(\theta, \phi) = L^2 Y(\theta, \phi)$, donde la función propia, que depende de los ángulos θ y ϕ , se ha designado con $Y(\theta, \phi)$ siendo L^2 el valor propio. Esto corresponde a la ecuación diferencial

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \frac{L^2}{\hbar^2} Y = 0.$$

Se puede demostrar que para obtener una solución que satisfaga las condiciones de contorno y continuidad que requiere la mecánica cuántica, es necesario que $L^2/\hbar^2 = l(l+1)$, donde l es un entero no negativo, esto es: $l = 0, 1, 2, 3, \dots$. De esta forma hemos obtenido los resultados anteriormente establecidos en la sección 3.5, esto es, $L^2 = l(l+1)\hbar^2$. Las soluciones de la ecuación resultante,

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + l(l+1) Y = 0,$$

se designan por Y_{lm} y son las funciones dadas en la tabla 3-4. La tabla muestra que las funciones Y_{lm} son productos de un factor que depende de θ y otro que depende de ϕ . [El factor que depende de ϕ es idéntico a la ec. (3.22)]. Esto es: $Y_{lm} = P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$. Teniendo en cuenta que las Y_{lm} son funciones propias de L^2 y L_z podemos escribir

$$L^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}, \quad L_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}.$$

EJEMPLO 3.5. Análisis de la ecuación de Schrödinger para movimiento bajo la acción de fuerzas centrales.

Solución: Recordemos que según la ec. (2.9) la ecuación de Schrödinger para el movimiento con una energía potencial $E_p(r)$ es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + E_p(r)\psi = E\psi.$$

Haciendo el cambio de coordenadas cartesianas x, y, z a coordenadas esféricas r, θ, ϕ , esta ecuación se transforma, después de un largo cálculo algebraico, en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \right\} \psi + E_p(r)\psi = E\psi.$$

Recordando la ec. (3.32) para el operador \mathbf{L}^2 , podemos escribir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) \psi + E_p(r)\psi = E\psi.$$

Poniendo $\psi = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ y teniendo en cuenta que $\mathbf{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}$, la ecuación anterior se convierte en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R + E_p(r)R = ER.$$

Esta ecuación contiene sólo la parte radial $R(r)$ de la función de onda ψ . Es costumbre poner $R(r) = u(r)/r$, con lo que resulta

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[E_p + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] u = Eu. \quad (3.24)$$

Esta expresión se llama a veces *ecuación de Schrödinger radial*. Comparando esta ecuación con la ecuación de Schrödinger unidimensional (2.3) concluimos que el movimiento radial es equivalente a un movimiento unidimensional en una energía potencial efectiva dada por la ec. (3.19), es decir

$$E_{p,eff} = E_p(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}.$$

El término $E_{p,cm} = l(l+1)\hbar^2/2mr^2$ es un potencial centrífugo porque la "fuerza" correspondiente, $F = -\partial E_{p,cm}/\partial r$, es positiva y está por lo tanto dirigida alejándose del origen.

Si ponemos $E_p = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$ obtenemos una ecuación diferencial que admite como soluciones las funciones radiales dadas en la tabla 3-6. Con otras formas de la energía potencial resultan funciones radiales diferentes.

EJEMPLO 3.6. Corrección relativista a la energía de átomos hidrogenoides.

Solución: Como explicamos en la sección 2.12, la ecuación de Schrödinger (3.3) se obtiene a partir de la expresión no relativista $E = p^2/2m_0 + E_p$. Este proceso es correcto siempre que la velocidad del electrón sea pequeña respecto a la velocidad de la luz. En el ejemplo 3.1 se estimó que el valor de v/c para un electrón en un estado estacionario es del orden de $7 \times 10^{-3}Z/n$. El efecto relativista debido a esta velocidad, aunque pequeño, se puede detectar fácilmente con métodos espectroscópicos. La energía relativista de un electrón que se mueve con momentum p y tiene una energía potencial E_p es (ver ec. A.11),

$$E = c\sqrt{m_0^2 c^2 + p^2} + E_p - m_0 c^2,$$

donde se ha restado la energía en reposo para que el cero de la energía coincida con el caso no relativista. Suponiendo que el momentum p es mucho menor que $m_0 c$,

podemos desarrollar la raíz hasta el término de segundo orden, resultando

$$E = \frac{1}{2m_e} p^2 - \frac{1}{8m_e^2 c^2} p^4 + \dots + E_p \\ = \left(\frac{1}{2m_e} p^2 + E_p \right) - \frac{1}{8m_e^2 c^2} p^4 + \dots \quad (3.25)$$

Los dos términos dentro del paréntesis dan la aproximación no relativista a la energía. En consecuencia, el último término es la corrección relativista de primer orden a la energía total del electrón; la designaremos por ΔE_r . Luego,

$$\Delta E_r = - \frac{1}{8m_e^2 c^2} p^4 = - \frac{1}{2m_e c^2} \left(\frac{p^2}{2m_e} \right) \left(\frac{p^2}{2m_e} \right).$$

Los factores idénticos dentro de los paréntesis corresponden a la energía cinética no relativista del electrón. Por lo tanto (con una aproximación razonable) podemos escribir para el primero, usando el resultado de las ecs. (3.10) y (3.13),

$$\frac{p^2}{2m_e} = \frac{1}{2} m_e v^2 = - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0(2r)} + \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0(2r)} = -E.$$

Para el segundo podemos escribir $p^2/2m_e = \frac{1}{2} m_e v^2$. Por lo tanto

$$\Delta E_r = - \frac{1}{2m_e c^2} (-E) \left(\frac{1}{2} m_e v^2 \right) = \frac{1}{4} \frac{v^2}{c^2} E.$$

Luego, la corrección relativista es del orden de $(v/c)^2 \times$ (energía del electrón). En el átomo de hidrógeno, por ejemplo, $(v/c)^2$ es del orden de 10^{-5} , por lo que $\Delta E_r \sim 10^{-5} E$ o sea alrededor de 0,001 % de E , cantidad que, aunque pequeña, se puede detectar fácilmente en el laboratorio con las técnicas experimentales que se usan actualmente.

Para obtener un resultado más preciso, notemos que el último término de la ec. (3.25), el cual acabamos de ver que es muy pequeño respecto a los dos primeros, se puede considerar como una pequeña perturbación. Para calcular su efecto sobre los estados estacionarios podemos estimar su valor medio conforme a la ec. (2.50). En el estado descrito por la función de onda ψ_{nlm} tenemos

$$\Delta E_r = - \frac{1}{8m_e^2 c^2} \overline{p^4} = - \frac{1}{8m_e^2 c^2} \int \psi_{nlm}^* p^4 \psi_{nlm} d\tau.$$

El resultado de este cálculo es

$$\Delta E_r = \frac{|E_n| Z^2 \alpha^2}{n} \left(-\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right), \quad (3.26)$$

donde

$$\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c \approx 1/137$$

se denomina *constante de estructura fina* y $|E_n|$ es el valor absoluto de la energía dada por la ec. (3.5). En nuestra aproximación, los niveles de energía están dados entonces por $E = E_n + \Delta E_r$. Como la corrección relativista (3.26) depende de l y de n , los niveles que tienen el mismo n pero diferente l no tienen la misma energía. En otras palabras: la corrección relativista destruye la degeneración accidental que encontramos en el caso de un campo coulombiano. Además, la corrección relativista es siempre negativa para todo n y l . Para un n dado, cuanto menor es el valor de l mayor es la corrección relativista. Por lo tanto, los estados del hidrógeno para los cuales la corrección es más importante son el 1s y el 2s.

P. A. M. Dirac desarrolló una teoría relativista del electrón más refinada. En la teoría de Dirac se establece desde el principio una ecuación correspondiente a la energía relativista, obteniéndose de este modo los niveles de energía exactos. Sin embargo, esta teoría es demasiado complicada para ser presentada aquí.

3.6 Efecto Zeeman

La cuantización espacial se manifiesta de una manera obvia cuando se perturba el movimiento electrónico aplicando un campo magnético. Cuando el campo magnético es suficientemente fuerte cada línea espectral de los átomos con un electrón se desdobra en un triplete que consta de tres líneas muy próximas. El espaciamiento es el mismo para todos los átomos y todas las líneas y es proporcional al módulo del campo magnético. El físico holandés Pieter Zeeman (1865-1943) observó por primera vez este efecto en 1896. Se le ha llamado *efecto Zeeman* para honrar su trabajo.

Un electrón que describe una órbita circular con velocidad angular ω pasa por cada punto de la órbita $\omega/2\pi$ veces por segundo, lo cual corresponde a una corriente $I = e(\omega/2\pi)$. Como la corriente tiene un contorno muy pequeño, equivale a un dipolo magnético cuyo momento magnético es igual a (corriente) \times (área). En consecuencia, el *momento dipolar magnético orbital* del electrón es

$$M_L = e(\omega/2\pi) (\pi r^2) = \frac{1}{2}e\omega r^2.$$

Recordando que para una órbita circular $L = m_e v r = m_e \omega r^2$, tenemos que $M_L = (e/2m_e)L$. Esta es una relación entre los módulos de M_L y L . Ahora bien, la dirección de L está relacionada con la del movimiento del electrón como se muestra en la fig. 3-15. Por otra parte, la carga del electrón es negativa y por lo tanto la corriente equivalente es opuesta a la del movimiento electrónico, resultando una orientación de M_L opuesta a la de L . Podemos entonces escribir la ecuación vectorial

$$M_L = -\frac{e}{2m_e} L. \quad (3.27)$$

Aunque hemos obtenido esta relación para una órbita circular y hemos usado la mecánica clásica, la misma es válida aún en la mecánica cuántica para un

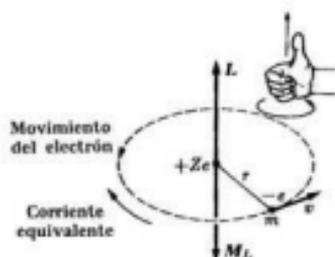


Fig. 3-15. Relación entre el momento magnético y el momentum angular orbitales de un electrón.

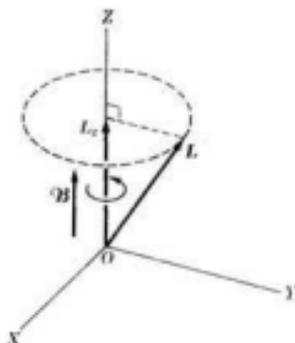


Fig. 3-16. Precesión del momentum angular por la acción de un campo magnético.

movimiento arbitrario con momentum angular L . La componente Z del momento magnético orbital es

$$M_{Lz} = -\frac{e}{2m_e} L_z = -\frac{e\hbar}{2m_e} m_l = -\mu_B m_l, \quad (3.28)$$

donde la cantidad

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,2732 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1} = 5,6564 \times 10^{-5} \text{ eV T}^{-1} \quad (3.29)$$

se denomina *magnetón de Bohr*.

Cuando se coloca un dipolo magnético de momento M en un campo magnético \mathcal{B} , adquiere una energía $E_M = -M \cdot \mathcal{B}$. En consecuencia, cuando se coloca

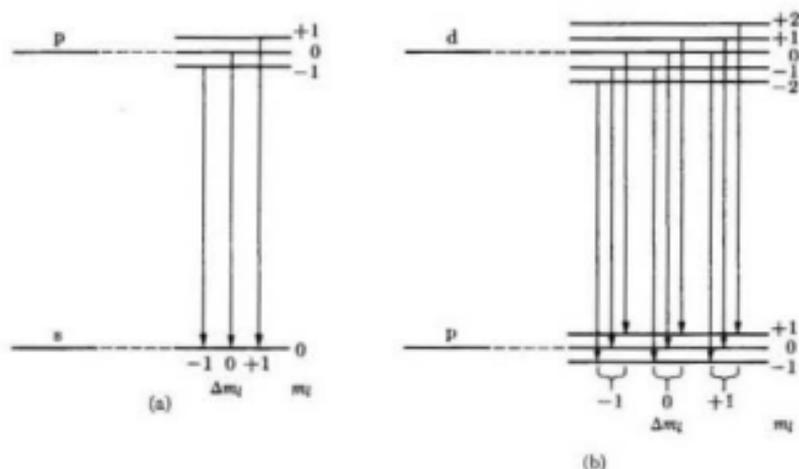


Fig. 3-17. Desdoblamiento de los niveles de energía s, p y d bajo la acción de un campo magnético. La separación de niveles sucesivos es $\mu_B \mathcal{B}$.

un átomo en un campo magnético, éste agrega a un electrón en órbita la energía

$$E_M = -M_L \cdot \mathcal{B} = -\frac{e}{2m_e} L \cdot \mathcal{B} \quad (3.30)$$

Al mismo tiempo el electrón experimenta un torque

$$\tau = M_L \times \mathcal{B} = -\frac{e}{2m_e} L \times \mathcal{B},$$

que hace que el momentum angular L precese alrededor de la dirección del campo magnético \mathcal{B} , como se indica en la fig. 3-16. Tomando el eje Z paralelo al campo magnético \mathcal{B} , podemos reescribir la ec. (3.30) en la forma $E_{\mathcal{B}} = -M_L \mathcal{B}$, de donde, empleando la ec. (3.28), obtenemos

$$E_{\mathcal{B}} = \mu_B \mathcal{B} m_l. \quad (3.31)$$

Vemos entonces que $E_{\mathcal{B}}$, en vez de tener un intervalo continuo de valores, puede tener $2l + 1$ valores diferentes correspondientes a cada una de las $2l + 1$ orientaciones de L respecto a \mathcal{B} teniendo todos un espaciamiento constante igual a $\mu_B \mathcal{B}$.

La energía total de un electrón ligado a un átomo que se encuentra en un campo magnético es $E_n + E_{\mathcal{B}}$, donde E_n es la energía del movimiento del electrón en ausencia de campo magnético. La ec. (3.31) indica entonces que cada nivel de energía con números cuánticos n, l se desdobra en $2l + 1$ niveles en presencia de un campo magnético. La separación entre los niveles sucesivos se refleja también en las frecuencias asociadas con las transiciones entre niveles. En la fig. 3-17 se ilustra la situación correspondiente a los niveles s , p y d . Los estados con $l = 0$ (estados s) no son afectados por el campo magnético. Los niveles con $l = 1$ (estados p) se desdoblan en tres estados igualmente espaciados correspondientes a las orientaciones para las cuales $m_l = +1, 0$ y -1 . Luego, la transición $p \rightarrow s$ se transforma en una transición triple, una correspondiente a $m_l = 0 \rightarrow m_l = 0$ con la frecuencia original, y otras dos correspondientes a $m_l = \pm 1 \rightarrow m_l = 0$ con un cambio de frecuencia dado por

$$\Delta\nu = \pm \frac{\mu_B \mathcal{B}}{h} = 1,40 \times 10^{18} \mathcal{B} \text{ Hz}. \quad (3.32)$$

Esto significa que cada una de las líneas $p \rightarrow s$ mostradas en la fig. 3-8 se transforma en tres líneas muy juntas. Análogamente, los estados con $l = 2$ (estados d) se desdoblan en cinco niveles igualmente espaciados correspondientes a las orientaciones de L dadas por $m_l = \pm 2, \pm 1, 0$. La transición $d \rightarrow p$ tiene ahora nueve posibilidades, conforme a la regla de selección $\Delta m_l = \pm 1, 0$. Sin embargo, las transiciones correspondientes al mismo valor de Δm_l tienen todas la misma energía por lo que dan la misma línea espectral. Concluimos entonces que aunque hay nueve transiciones posibles, el espectro de la transición $d \rightarrow p$ en un campo magnético contiene tres líneas solamente, con $\Delta\nu$ dado también por la ec. (3.32).

La cuantización del momentum angular explica claramente los resultados experimentales del efecto Zeeman. Si en vez de estar cuantizado espacialmente, el momentum angular pudiera tener cualquier orientación, el efecto del campo magnético sería ensanchar cada nivel. Los nuevos niveles ocuparían entonces una banda de energía de ancho $2\mu_B \mathcal{B} L$ y cada línea se transformaría en una banda. Esta es la razón, como se mencionó anteriormente, de por qué el efecto Zeeman es una prueba de la cuantización espacial. De hecho, el efecto Zeeman fue uno de los fenómenos que llevó a introducir la idea de la cuantización del momentum angular.

3.7 Espín del electrón

Recordemos que la tierra, además de su movimiento orbital alrededor del sol, tiene un movimiento rotacional (gira) alrededor de su eje. Por lo tanto, el momento angular total de la tierra es la suma vectorial de su momento angular orbital y su momento angular de giro. Por analogía, podemos sospechar que un electrón ligado en un átomo también gira sobre sí mismo. Sin embargo, no podemos describir el electrón como una partícula esférica que gira sobre sí misma porque no conocemos su estructura interna. En consecuencia no podemos calcular el momento angular de giro del electrón en la misma forma que calculamos el momento angular de giro de la tierra en función de su radio y de su velocidad angular. La idea de que el electrón gira fue propuesta en 1926 por G. Uhlenbeck y S. Goudsmit para explicar ciertas características de los espectros de átomos con un solo electrón (en la sección 3.9 consideraremos estos espectros). No se puede, sin embargo, mantener la analogía del electrón con una pequeña esfera que gira. Es por ello que se postula la existencia de un momento angular intrínseco del electrón llamado *espín* [del inglés *to spin* (girar)]. Si \mathbf{S} es el espín del electrón y \mathbf{L} es el momento angular orbital, el momento angular total es $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Para \mathbf{L} y \mathbf{S} dados, el valor de \mathbf{J} depende de la orientación relativa de los mismos y podemos esperar que esto se refleje en ciertas propiedades atómicas; esto es lo que ocurre realmente.

La existencia del espín del electrón está confirmada por una gran cantidad de datos experimentales. Por ejemplo, el espín del electrón se manifiesta de forma muy directa en el experimento de Stern-Gerlach, realizado por primera vez en 1924. Como el electrón es una partícula cargada, el espín del electrón debe dar lugar a un momento magnético \mathbf{M}_S intrínseco o de espín. Si el electrón pudiera ser descrito como un cuerpo rígido cargado que rota, la relación entre \mathbf{M}_S y \mathbf{S} sería la misma que entre \mathbf{M}_L y \mathbf{L} , ec. (3.17). Sin embargo, como no es así, debemos escribir

$$\mathbf{M}_S = -g_S \frac{e}{2m_e} \mathbf{S},$$

donde g_S se denomina *razón giromagnética* del electrón. El valor experimental de g_S es 2,0024. Para la mayoría de los fines prácticos podemos tomar $g_S = 2$. El momento dipolar magnético total de un electrón en su órbita es entonces

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_L + \mathbf{M}_S = -\frac{e}{2m_e} (\mathbf{L} + g_S \mathbf{S}), \quad (3.33)$$

que por supuesto depende no sólo del módulo de \mathbf{L} y de \mathbf{S} sino también de su orientación relativa.

Supongamos ahora que un haz de átomos hidrogenoides atraviesa un campo magnético no homogéneo como se muestra en la fig. 3-18. El efecto de ese campo sobre un dipolo magnético es ejercer una fuerza cuyo módulo y dirección dependen de la orientación relativa del campo magnético y el dipolo magnético. Por ejemplo, si el dipolo magnético es paralelo al campo magnético, tiende a moverse en

la dirección en que el campo magnético aumenta, mientras que si el dipolo magnético es antiparalelo al campo magnético se moverá en la dirección en que el campo magnético disminuye.

En el experimento de Stern-Gerlach se produce el campo magnético no homogéneo dando a las piezas polares la forma que se muestra en la fig. 3-18. La intensidad del campo magnético aumenta en la dirección S-N. Si los átomos hidrogenoides están en su estado fundamental, el momentum angular orbital del electrón es nulo (estado s o $l = 0$) y todo el momento magnético se debe al espín.

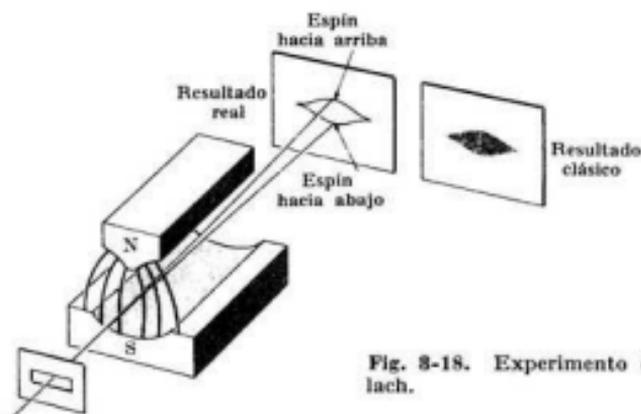


Fig. 3-18. Experimento de Stern-Gerlach.

El campo magnético desviará entonces el haz atómico según sea la orientación de \mathbf{M}_S o, lo que es equivalente, la orientación \mathbf{S} . El resultado del experimento es que el campo magnético no homogéneo desdobra el haz atómico en dos. Esto muestra que

el espín del electrón sólo puede tener dos orientaciones respecto al campo magnético: paralelo o antiparalelo.

Como según la discusión hecha en la sección 3.4 el número de orientaciones de un vector momentum angular respecto a un eje Z fijo es $g = 2l + 1$, tenemos para el caso del espín el valor $g = 2$ o sea $l = \frac{1}{2}$. Designando el número cuántico de espín con s en vez de l y el número cuántico correspondiente a la componente S_z con m_s , tenemos que $s = \frac{1}{2}$ y $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Luego:

$$S^2 = s(s+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2, \quad s = \frac{1}{2}, \quad S_z = m_s\hbar, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}. \quad (3.34)$$

En la fig. 3-19 se muestra los únicos valores de m_s permitidos (esto es, $+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$), que corresponden a las dos orientaciones posibles de \mathbf{S} . Para abreviar, se los llama comúnmente *espín para arriba* (\uparrow) y *espín para abajo* (\downarrow) aunque realmente el espín nunca está dirigido según el eje Z u opuesto a él.

Designaremos con χ_{m_s} las funciones de onda asociadas con la componente S_z del espín. No nos interesa la forma de χ_{m_s} ; sus principales propiedades son

$$\mathbf{S}^2 \chi_{m_s} = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_{m_s}, \quad S_z \chi_{m_s} = m_s \hbar \chi_{m_s}.$$

A veces se usa la notación χ_+ y χ_- en vez de χ_{m_s} , las cuales corresponden a $m_s = +\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$ respectivamente. La función de onda completa de un electrón que se mueve en un campo central es entonces

$$\psi_{nlm_l m_s} = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \chi_{m_s}. \quad (3.35)$$

Obsérvese que según la ec. (3.35), para describir completamente el estado de un electrón en un campo central se necesitan *cuatro* números cuánticos: n , l , m_l y m_s .

Las propiedades del espín del electrón descritas por las ecs. (3.34) no se pueden explicar con ningún modelo clásico del electrón. Sin embargo, podemos explicarlas teóricamente combinando las ideas de la mecánica cuántica con el principio de relatividad. Dirac hizo esto alrededor de 1928 pero no discutiremos su análisis aquí porque cae fuera del objetivo de este libro.

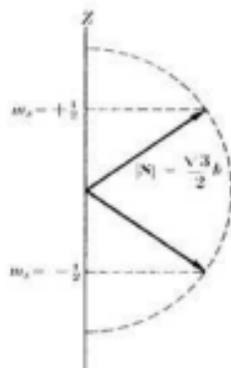


Fig. 3-19. Orientaciones posibles del espín respecto al eje Z .

Cuando el átomo está en un estado con $l \neq 0$, el desdoblamiento producido por el campo magnético depende del momento magnético total o, lo que es lo mismo, del momentum angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Por ello se puede usar el experimento de Stern-Gerlach para determinar el momentum angular total de un átomo.

3.8 Adición de momenta angulares

Vimos en la sección precedente que el momentum angular resultante \mathbf{J} de un electrón en un átomo hidrogenoide es la suma del momentum angular orbital \mathbf{L} y el momentum angular de espín \mathbf{S} , esto es: $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Es de importancia examinar los valores posibles de \mathbf{J} conforme a la mecánica cuántica. Para que nuestro análisis sea de aplicación general, supongamos que tenemos dos momenta angulares, \mathbf{J}_1 y \mathbf{J}_2 , que pueden corresponder, por ejemplo, al momentum angular orbital de un electrón y a su espín (como acabamos de considerar en la sección precedente), o al momentum angular de dos electrones en un átomo (caso que consideraremos en el próximo capítulo). Se tiene que: $J_1^2 = j_1(j_1 + 1)\hbar^2$, $J_{1z} = m_1\hbar$, y $J_2^2 = j_2(j_2 + 1)\hbar^2$, $J_{2z} = m_2\hbar$. Se puede demostrar que en el caso más general

j_1 y j_2 pueden ser enteros o semienteros, esto es, $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$. Como ya se explicó, los momenta angulares orbitales sólo pueden ser enteros.

Si $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ es el momentum angular resultante, de modo que $J_z = J_{z1} + J_{z2}$, se tiene

$$J^2 = j(j+1)\hbar^2, \quad J_z = m\hbar, \quad m = \pm j, \pm (j-1), \dots \quad (3.36)$$

siendo $m = m_1 + m_2$. Pero como \mathbf{J}_1 y \mathbf{J}_2 pueden tener diversas orientaciones relativas, hay varios valores posibles de \mathbf{J} . Se encuentra que el número cuántico j varía en pasos de a uno desde $j_1 + j_2$ hasta $|j_1 - j_2|$, por lo que sólo puede tener los valores

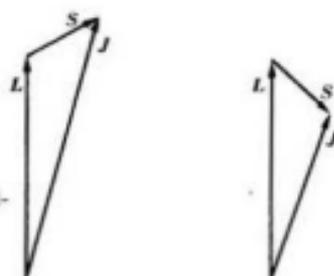
$$j = j_1 + j_2, \quad j_1 + j_2 - 1, \quad j_1 + j_2 - 2, \dots, \quad |j_1 - j_2|.$$

El primer valor corresponde a \mathbf{J}_1 y \mathbf{J}_2 "paralelos" y el último a los dos momenta angulares "antiparalelos". Los valores sucesivos de j difieren en una unidad y si $j_2 \leq j_1$, el número total de posibilidades es $2j_2 + 1$.

TABLA 3-7 Designación de estados electrónicos

l	0	1		2		3	
j	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{7}{2}$
Símbolo	$s_{1/2}$	$p_{1/2}$	$p_{3/2}$	$d_{3/2}$	$d_{5/2}$	$f_{5/2}$	$f_{7/2}$

Por ejemplo, si $j_2 = \frac{1}{2}$ los valores posibles de j son $j_1 + \frac{1}{2}$ y $j_1 - \frac{1}{2}$, que corresponden a las orientaciones paralela y antiparalela. En el caso del electrón, si $\mathbf{J}_1 = \mathbf{L}$ y $\mathbf{J}_2 = \mathbf{S}$, tenemos entonces que los valores posibles del momentum angular total \mathbf{J} son $j = l \pm \frac{1}{2}$. Estas dos situaciones están ilustradas en la fig. 3-20



$j = l + \frac{1}{2}$ (espín hacia arriba)
(a)

$j = l - \frac{1}{2}$ (espín hacia abajo)
(b)

para $l = 2$. Tenemos por lo tanto que

el espín del electrón sólo puede tener dos orientaciones posibles respecto al momentum angular orbital.

Cuando $l = 0$ (estado *s*) sólo es posible $j = \frac{1}{2}$. Indicando el valor de j como subíndice, los estados posibles de un electrón en un campo central se designan como se muestra en la tabla 3-7.

Otro ejemplo es $j_2 = 1$ y $j_1 \geq 1$; entonces $j = j_1 + 1, j_1$ ó $j_1 - 1$. Se puede demostrar que en una transición dipolar eléctrica el fotón tiene un momentum angular correspondiente a un valor de j igual a 1. Luego, si j_1 se refiere al momentum angular orbital l del electrón y $j_2 = 1$ al del fotón, los valores permitidos del momentum angular orbital de un electrón después de emitir o absorber el fotón son $l + 1, l$ y $l - 1$, correspondientes a $\Delta l = \pm 1, 0$. Como ya explicamos en la sección 3.4, $\Delta l = 0$ queda eliminado por razones de paridad.

3.9 Interacción espín-órbita

La doble orientación del espín del electrón respecto al momentum angular orbital da lugar a un efecto importante: la duplicación de los niveles de energía (excepto los niveles *s*) de los átomos hidrogenoides. A su vez, esta duplicación da lugar a una duplicación de las líneas espectrales. Estas líneas aparecen en pares que tienen frecuencias o longitudes de onda muy parecidas por lo que se denominan *dobletes*. El doblete mejor conocido es el formado por las dos líneas amarillas *D* del sodio, que corresponden a longitudes de onda de 5890 Å y 5896 Å. Fue precisamente el problema de explicar estos dobletes el que dio origen a la idea del espín del electrón con dos orientaciones posibles.

La duplicación de los niveles de energía es consecuencia de la llamada *interacción espín-órbita*. El origen de esta interacción es el siguiente: en un sistema de referencia *XYZ* fijo al núcleo de un átomo, el electrón rota alrededor del núcleo (fig. 3-21a) con momentum angular L . Pero en un sistema de referencia $X'Y'Z'$ fijo al electrón es el núcleo el que rota alrededor del electrón. Como el núcleo tiene carga positiva, produce en el sistema $X'Y'Z'$ un campo magné-

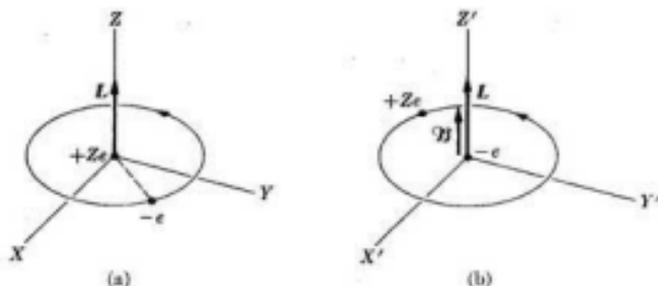


Fig. 3-21. Origen de la interacción espín-órbita.

tico \mathcal{B} paralelo al momentum angular L . Como el electrón está en reposo respecto a $X'Y'Z'$, la única interacción del campo magnético nuclear es con momento magnético M_S debido al espín del electrón. Esta interacción es proporcional a $M_S \cdot \mathcal{B}$. Pero \mathcal{B} es paralelo a L y M_S es paralelo a S . Por lo tanto la interacción es proporcional a $L \cdot S$. Es por esto que el efecto se llama interacción espín-órbita. Podemos escribir entonces para la energía del electrón debida a la interacción espín-órbita:

$$E_{SL} = aS \cdot L, \quad (3.37)$$

donde a es una cantidad que depende de las diferentes variables que afectan el movimiento del electrón y cuya forma precisa no necesitamos conocer por ahora. Si E_n es la energía del movimiento electrónico bajo la acción de una fuerza central solamente, la energía total es, cuando se agrega la interacción espín-órbita,

$$E = E_n + E_{SL} = E_n + aS \cdot L. \quad (3.38)$$

Al escribir esta expresión estamos suponiendo que la interacción espín-órbita no afecta la contribución a la energía debida a las fuerzas centrales, suposición que es válida mientras E_{SL} sea muy pequeña respecto a E_n . Para valores dados de L y de S , la interacción espín-órbita E_{SL} depende de la orientación relativa de los dos vectores. Pero como S sólo puede tener dos orientaciones respecto a L , concluimos que

la interacción espín-órbita desdobla cada nivel de energía del electrón con un valor dado de l en dos niveles muy próximos.

Un nivel corresponde a L y S paralelos o espín hacia arriba ($j = l + \frac{1}{2}$) y el otro a L y S antiparalelos o espín hacia abajo ($j = l - \frac{1}{2}$). Evidentemente, los niveles s ($l = 0$) siguen siendo simples.

En presencia de la interacción espín-órbita, los números cuánticos necesarios para especificar el estado de momentum angular de un electrón son l , j y m ,

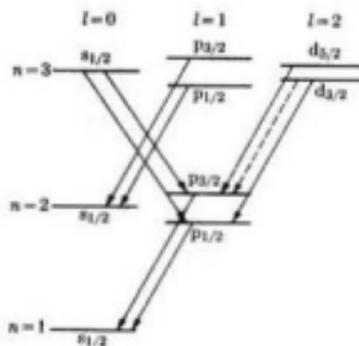


Fig. 3-22. Desdoblamiento de los niveles de energía por la interacción espín-órbita y transiciones posibles. La línea de trazos indica una transición con probabilidad muy baja.

donde m se refiere al valor propio de J_z . Las reglas de selección para transiciones dipolares eléctricas impuestas por la conservación del momentum angular son

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta j = 0, \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1. \quad (3.39)$$

Las transiciones con $\Delta j = 0$ son muy débiles porque requieren la inversión de la dirección del espín respecto al momentum angular del electrón. Pero la fuerza que produce esa inversión de espín es la interacción espín-órbita que es una fuerza relativamente débil.

La fig. 3-22 muestra (no en escala) cómo la interacción espín-órbita afecta los niveles mostrados en la fig. 3-7, y algunas de las transiciones posibles. La transición $d_{3/2} \rightarrow p_{3/2}$, que es relativamente débil, está indicada por una línea de trazos. Vemos que las líneas espectrales correspondientes a transiciones entre niveles p y s son dobles mientras que aquellas entre niveles d y p son tripletes, aunque una de las líneas es tan débil que en la práctica podemos hablar de un doblete.

EJEMPLO 3.7. Cálculo de la separación de dos niveles de energía debida a la interacción espín-órbita.

Solución: Tenemos que calcular el valor de E_{SL} para espín hacia arriba y espín hacia abajo, y hallar su diferencia. Esta diferencia da la energía de separación de los niveles. Para hacer esto debemos hallar $S \cdot L$ en ambos casos. Como $J = L + S$, tenemos $J^2 = L^2 + S^2 + 2S \cdot L$, de donde

$$S \cdot L = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2).$$

Introduciendo los valores de L^2 , S^2 y J^2 dados por las ecs. (3.15), (3.34) y (3.36), obtenemos

$$S \cdot L = \frac{1}{2}\{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\} \hbar^2$$

o sea

$$S \cdot L = \begin{cases} \frac{1}{4}\hbar^2 & \text{espín hacia arriba, } j = l + \frac{1}{2}, \\ -\frac{1}{2}(l+1)\hbar^2 & \text{espín hacia abajo, } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases}$$

Utilizando la ec. (3.38) se tiene para los niveles de energía

$$\begin{aligned} E(\uparrow) &= E_n + E_{SL}(\uparrow) = E_n + \frac{1}{4}a\hbar^2, & j = l + \frac{1}{2}, \\ E(\downarrow) &= E_n + E_{SL}(\downarrow) = E_n - \frac{1}{2}a(l+1)\hbar^2, & j = l - \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Luego, si a es positiva, los niveles con $j = l + \frac{1}{2}$ están un poco más arriba respecto al nivel de energía E_n de la fuerza central, y aquellos con $j = l - \frac{1}{2}$ están un poco más abajo. Para completar nuestro cálculo debemos evaluar a , pero como esto está por encima del nivel de este libro, nos limitaremos a dar el resultado final:

$$a = \frac{|E_n|Z^3\alpha^2}{M^2 n l(l+1)(l+\frac{1}{2})},$$

donde α es la constante de estructura fina introducida en el ejemplo 3.6 y $|E_n|$ es el valor absoluto de la energía del electrón en ausencia de la interacción espín-órbita.

La separación entre los dos niveles de energía es

$$\Delta E_{SL} = \frac{1}{4}a\hbar^2(2l+1) = \frac{|E_n|Z^3\alpha^2}{n l(l+1)} \approx 5,32 \times 10^{-8} \frac{|E_n|Z^3}{n l(l+1)}.$$

Luego, la separación entre los niveles debida a la interacción espín-órbita es muy pequeña respecto a $|E_n|$ y disminuye a medida que n y l aumentan. Por ejemplo, para el estado $2p$ del hidrógeno, ΔE_{sl} es aproximadamente $4,6 \times 10^{-6}$ eV, por lo que la transición del estado $2p$ al $1s$ consistirá en dos líneas separadas por un intervalo de frecuencia de $1,11 \times 10^{10}$ Hz o con una diferencia de longitud de onda de $5,3 \times 10^{-13}$ m. Se debe comparar estos valores con la frecuencia $2,47 \times 10^{15}$ Hz y la longitud de onda $1,21 \times 10^{-7}$ m que corresponden a la transición en ausencia de la interacción espín-órbita.

Cuando se agrega la corrección relativista dada por la ec. (3.26) a la interacción espín-órbita, los niveles de energía están dados, hasta el primer orden de aproximación, por la expresión

$$E = E_n + \frac{|E_n|Z^2\alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right),$$

por lo que los niveles con los mismos n y j coinciden. El nivel $n = 1$ tiene $j = \frac{1}{2}$ y no se desdobra. En la fig. 3-23 se muestra los niveles de energía del hidrógeno para $n = 2$ y $n = 3$. Medidas más cuidadosas y cálculos más precisos muestran que los estados con l diferente pero con el mismo j no coinciden sino que están ligeramente

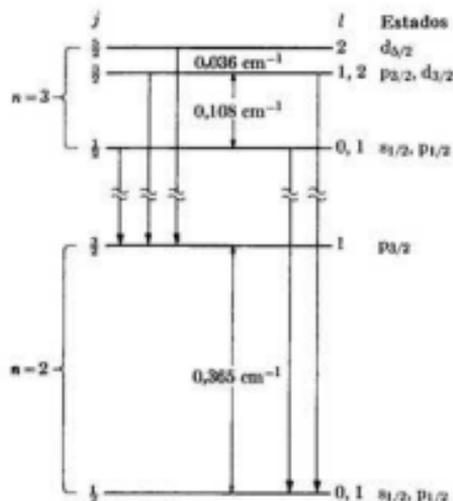


Fig. 3-23. Estructura fina de la transición $n = 3 \rightarrow n = 2$ en el hidrógeno.

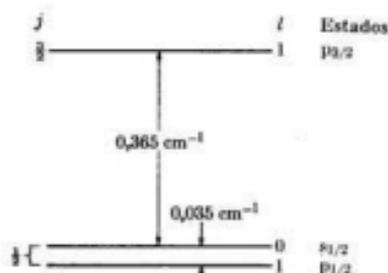


Fig. 3-24. Desdoblamiento del nivel $n = 2$ del hidrógeno, incluyendo el corrimiento de Lamb.

separados. Por ejemplo, en la fig. 3-24 se muestra la disposición real de los niveles del hidrógeno para $n = 2$. La separación entre los niveles $s_{1/2}$ y los niveles $p_{1/2}$ se denomina *corrimiento de Lamb*.

EJEMPLO 3.8. Cálculo del momento magnético de un electrón en presencia de la interacción espín-órbita.

Solución: La interacción espín-órbita $E_{SL} = a\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ depende de la orientación relativa de \mathbf{S} y \mathbf{L} , es decir, del ángulo formado por los dos momentos angulares. Pero cuando la energía potencial depende de un ángulo, aparece un torque en dirección perpendicular al ángulo. Existe entonces un torque perpendicular a \mathbf{S} y a \mathbf{L} que hace que los dos vectores precesen. Sin embargo, si no hay torques externos aplicados, el momentum angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ debe ser constante. Podemos entonces representarnos el efecto de la interacción espín-órbita como una precesión de \mathbf{S} y de \mathbf{L} alrededor de su resultante como se indica en la fig. 3-25.

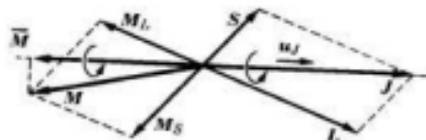


Fig. 3-25. Momento magnético resultante promedio.

El momento dipolar magnético del electrón dado en la ec. (3.33) es, con $g_s \approx 2$,

$$\mathbf{M} = - (e/2m_e) (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) = - (e/2m_e) (\mathbf{J} + \mathbf{S})$$

y no es directamente opuesto a \mathbf{J} . En consecuencia \mathbf{M} también precesa alrededor de \mathbf{J} . El valor medio de \mathbf{M} es igual a la componente de \mathbf{M} paralela a \mathbf{J} . Luego, podemos escribir

$$\bar{\mathbf{M}} = (\mathbf{M} \cdot \mathbf{u}_J) \mathbf{u}_J,$$

donde \mathbf{u}_J es el versor en la dirección de \mathbf{J} que se puede escribir en la forma $\mathbf{u}_J = \mathbf{J}/J$. Por lo tanto

$$\bar{\mathbf{M}} = - (e/2m_e) (\mathbf{J} + \mathbf{S}) \cdot \mathbf{J} \mathbf{J}/J^3 = - (e/2m_e) (1 + \mathbf{S} \cdot \mathbf{J}/J^2) \mathbf{J}.$$

Como $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, podemos escribir $\mathbf{S} \cdot \mathbf{J} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2)$. Luego, reemplazando los cuadrados de los momentos angulares por sus expresiones cuánticas, tenemos finalmente

$$\bar{\mathbf{M}} = - (e/2m_e) g \mathbf{J},$$

donde

$$g = 1 + \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}}{J^2} = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (3.40)$$

se denomina *factor de Landé*. Sus valores correspondientes a espín para arriba y espín para abajo son

$$g = 1 \pm \frac{1}{2l+1}, \quad j = l \pm \frac{1}{2}. \quad (3.41)$$

En presencia de un campo magnético débil que no perturba apreciablemente las relaciones dinámicas de la fig. 3-25 la energía de interacción es

$$E_{\mathcal{H}} = - \bar{\mathbf{M}} \cdot \mathcal{H} = (e/2m_e) g \beta \mathcal{H} J_z = \mu_B g \beta m. \quad (3.42)$$

Esto da lugar a diagramas de Zeeman más complicados que los considerados en la sección 3.6. El efecto Zeeman expresado por la ec. (3.42) es muy importante porque permite hallar g experimentalmente y de ahí verificar los valores de j y de l para el estado del electrón. Los resultados de la sección 3.6 siguen siendo válidos cuando el campo magnético es tan intenso que la interacción magnética es mucho mayor que la espín-órbita por lo que ésta se puede ignorar.

Bibliografía

1. "Papers Given at the Niels Bohr Memorial Session", A. Bohr, F. Bloch, J. Neilson, J. Rosenfeld, V. Weisskopf y J. Wheeler, *Physics Today*, octubre de 1963, pág. 22
2. "The Evolution of the Balmer Series", L. Banet, *Am. J. Phys.* **34**, 496 (1966)
3. "Orbital Angular Momentum in Quantum Mechanics", M. Whippman, *Am. J. Phys.* **34**, 656 (1966)
4. "A Quantum-Dynamical Description of Atoms and Radiative Processes", G. Fowles, *Am. J. Phys.* **31**, 407 (1963)
5. *Elements of Wave Mechanics*, N. Mott. Cambridge University Press, Cambridge, 1962, cap. 4, secs. 4-13; cap. 5, secs. 1.2.1 y 4.3
6. *Principles of Modern Physics*, R. Leighton. McGraw-Hill, New York, 1959, caps. 5 y 6
7. *Atomic Spectra and Atomic Structure*, G. Herzberg. Dover, New York, 1951, cap. 1
8. *The Behavior of Electrons in Atoms*, R. Hochstrasser. Benjamin, New York, 1964
9. *Structure of Matter*, W. Finkelburg. Academic Press, New York, 1964, cap. 3
10. *Quantum Theory of Matter*, J. C. Slater. McGraw-Hill, New York, 1951, cap. 5
11. *Introduction to Modern Physics*, R. Richtmyer, E. Kennard y T. Lauritsen. McGraw-Hill, New York, 1955, cap. 5, secs. 80-83; cap. 6, secs. 104-108

Problemas

3.1 Calcular la velocidad angular y las energías potencial y cinética del electrón de un átomo de hidrógeno en función del número cuántico n , suponiendo que el electrón se mueve en órbitas circulares (ver el ejemplo 3.1). Evaluar los coeficientes numéricos. Representar los valores calculados en función de n para determinar su tendencia general a medida que la energía total del electrón aumenta.

3.2 Hallar la energía y la velocidad de retroceso de un átomo de hidrógeno cuando sufre una transición del estado $n = 4$ al $n = 1$ emitiendo un fotón. A partir de este resultado justificar la validez de la suposición hecha al escribir la ec. (3.14).

3.3 Si la vida media promedio de un estado excitado del hidrógeno es del orden de 10^{-8} s, estimar cuántas revoluciones da un electrón cuando está (a) en el estado $n = 2$ y (b) en el estado $n = 15$, antes de experimentar una transición al estado $n = 1$. (c) Comparar estos números con el de revoluciones que ha dado

la tierra en sus 2×10^9 años de existencia.

3.4 Cinco líneas de la serie de Balmer del hidrógeno tienen las longitudes de onda 3669,42 Å, 3770,06 Å, 3835,40 Å, 3970,07 Å y 4340,47 Å. Representar λ en función de n para la serie de Balmer. Hallar por inspección el valor de n del nivel superior para cada una de las longitudes de onda dadas.

3.5 Calcular la diferencia de longitud de onda entre las líneas H_α (esto es, $n = 3$ a $n = 2$) del hidrógeno, el deuterio y el tritio, resultante de las masas diferentes de estos átomos.

3.6 ¿Qué líneas del espectro del hidrógeno caen en la región visible del espectro (entre 4000 Å y 7000 Å)? ¿Qué líneas del He^+ caen en la misma región? ¿Cómo se podría distinguir si hay hidrógeno mezclado con una muestra de helio?

3.7 Mostrar que para un fotón podemos usar las equivalencias $1 \text{ eV} = 8065,8 \text{ cm}^{-1}$ y $1 \text{ cm}^{-1} = 1,2398 \times 10^{-4} \text{ eV}$.

3.8 Suponga que Ud. está repitiendo el experimento de Franck-Hertz usando como vapor hidrógeno atómico. ¿Qué líneas del espectro del hidrógeno observaría si la energía máxima de los electrones fuera 12,5 eV?

3.9 (a) Empleando el método del ejemplo 3.1 calcular la frecuencia del movimiento circular de un electrón en el nivel correspondiente al número cuántico n . (b) Calcular la frecuencia de la radiación emitida en la transición del estado n al $n - 1$. (c) Mostrar que los resultados de (a) y (b) concuerdan cuando n es muy grande.

3.10 Podemos computar las funciones de onda del momentum angular $Y_{lm}(\theta, \phi)$ usando la expresión $Y_{lm} = N_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$, donde

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$$

es la constante de normalización y $P_l^m(\xi)$ es la *función asociada de Legendre* definida por

$$P_l^m(\xi) = (-1)^m (1 - \xi^2)^{m/2} \frac{d^m P_l(\xi)}{d\xi^m}$$

y

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l$$

son los *polinomios de Legendre*. Computar Y_{lm} para $l = 0, 1$ y 2 , y comparar con las expresiones dadas en la tabla 3-4.

3.11 Demostrar que de acuerdo con su definición (ver el problema 3.10), los polinomios de Legendre son de grado l y contienen sólo potencias pares o impares de ξ según que l sea par o impar.

3.12 Determinar por cálculo directo si las funciones de onda que aparecen en la tabla 3-5 son funciones propias de los operadores (a) L_x , (b) L_z .

3.13 Hacer un diagrama polar de $|Y_{lm}|^2$ para $l = 1$ y $m_l = 0, \pm 1$. Repetir para las funciones angulares p_x^2 , p_y^2 y p_z^2 , y comparar resultados.

3.14 Refiriéndose a la definición de las funciones asociadas de Legendre dadas en el problema 3.10, mostrar que su paridad es igual a $(-1)^{l+m}$. [*Sugerencia:*

Ver lo que ocurre cuando se reemplaza ξ por $-\xi$ en las definiciones de $P_l(\xi)$ y de $P_l^m(\xi)$.]

3.15 En coordenadas esféricas, la operación de paridad $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ (o $x, y, z \rightarrow -x, -y, -z$) se expresa mediante la transformación $r, \theta, \phi \rightarrow r, \pi - \theta, \pi + \phi$. Analizar el comportamiento de las funciones de onda angulares dadas en la tabla 3-4 y confirmar la regla dada en el texto de que la paridad de las funciones Y_{lm} es $(-1)^l$. Repetir para las funciones que aparecen en la tabla 3-5.

3.16 (a) Demostrar que se puede obtener las funciones de onda angulares de la tabla 3-5 por medio de una combinación lineal apropiada de las funciones de onda de la tabla 3-4. (b) Expresar las funciones de onda de la tabla 3-5 en función de x, y, z y r , y justificar la notación utilizada para las mismas.

3.17 Expresar los operadores L_x y L_y en coordenadas esféricas. Empleando estas expresiones y la ec. (3.21) para L_x , obtener la expresión (3.23) para L^2 .

3.18 Escribir la ecuación radial (3.24) para una partícula libre ($E_p = 0$). Mostrar por sustitución directa en la ecuación que las soluciones para $l = 0$ y $l = 1$ que satisfacen las condiciones $u = 0$ para $r = 0$, son $u = \text{sen } kr$ y $u = (\text{sen } kr)/kr - \cos kr$, donde $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Escribir la solución completa $\psi_{lm}(\mathbf{r})$ para una partícula libre incluyendo la parte angular, para $l = 0$ y $l = 1$. Interpretar la función de onda $l = 0$ como la combinación lineal de una onda esférica entrante y una saliente. [*Nota:* Se puede demostrar que la función de onda general de una partícula libre de momentum $p = \hbar k$ y momentum angular orbital $L = -\sqrt{l(l+1)}\hbar$ es $\psi_{lm} = j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \phi)$, donde $j_l(kr)$ se denomina *función esférica de Bessel* de orden l . El estudiante debe consultar un manual de matemática para investigar las funciones de Bessel, obtener $j_0(kr)$ y $j_1(kr)$ y comparar éstas con los resultados en la primera parte de este problema y obtener, así, una mayor comprensión del mismo.]

3.19 Se puede demostrar que la función de onda de una partícula libre que se mueve según el eje Z con momentum $\hbar k$

se puede expresar en la forma

$$\psi = e^{im\phi} = \sum_l i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(kr) Y_{lm}(0).$$

¿Por qué sólo las funciones con $m=0$ están permitidas? ¿Por qué la solución contiene muchas funciones del momento angular? Escribir en detalle los dos primeros términos de la suma. (Ver la definición de j_l en el problema anterior).

3.20 Las funciones de onda radiales del átomo de hidrógeno están dadas por

$$R_{nl}(r) = N_{nl} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho),$$

donde $\rho = 2Zr/na_0$, los L_s^t son los polinomios asociados de Laguerre definidos por

$$L_s^t(\rho) = \frac{d^s}{d\rho^s} [L_t(\rho)],$$

con

$$L_t(\rho) = e^\rho \frac{d^t}{d\rho^t} [\rho^t e^{-\rho}],$$

y N_{nl} es la constante de normalización dada por

$$N_{nl} = - \left[\left(\frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{1/2}.$$

Escribir todas las funciones radiales para $n = 1, 2$ y 3 , y comparar con las expresiones dadas en la tabla 3-6.

3.21 Demostrar que los polinomios asociados de Laguerre definidos en el problema 3.20, son de grado $l-s$. Esto muestra que $s \leq l$. Verificar entonces la regla de que para un n dado el valor máximo de l es $n-1$.

3.22 A partir de la información dada en el problema 3.20, demostrar que las funciones de onda radiales del hidrógeno se comportan como ρ^l para pequeños valores de r y que se comportan como $\rho^s e^{-\rho/2}$ para grandes valores de r . Concluir de esto que cuanto mayor es el valor de l menos penetrante es la órbita.

3.23 Mostrar por sustitución directa que R_{10} es solución de la ecuación de Schrödinger radial.

3.24 Verificar que las funciones de onda del momento angular $Y_{lm}(\theta, \phi)$ dadas en la tabla 3-4 son ortogonales y están

normalizadas. (La condición de ortogonalidad y normalización es que

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{lm}^* Y_{l'm'} d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

donde $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ y δ_{ab} es 1 si $a=b$ y cero en caso contrario).

3.25 El elemento de volumen en coordenadas esféricas (fig. 3-26) es

$$dV = dr dS = r^2 dr d\Omega.$$

La probabilidad de encontrar un electrón dentro de ese elemento de volumen es $|\psi|^2 r^2 dr d\Omega$. Verificar que la probabilidad de encontrar el electrón dentro del cascarón esférico de radios r y $r+dr$ independientemente de su posición angular, está dada por $|R_{nl}|^2 r^2 dr$. [Sugerencia: Reemplazar ψ por su expresión (3.18) e integrar sobre todos los ángulos, utilizando la condición de normalización de los Y_{lm} dada en el problema 3.24.]

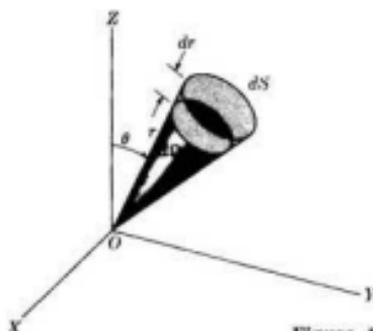


Figura 3-26

3.26 Usando el resultado del problema precedente, hallar (a) la distancia más probable y (b) la distancia promedio del electrón al protón en el estado 1s del hidrógeno. Comparar con el radio de Bohr de la órbita para $n=1$.

3.27 (a) Utilizando el elemento de volumen dado en el problema 3.25, demostrar que la condición de normalización de las funciones de onda ψ_{nlm} implica que $\int_0^\infty |R_{nl}|^2 r^2 dr = 1$. (b) Refiriéndose a la fig. 3-13, demostrar que el área que está por debajo de cada curva es igual a uno, como lo exige la condición de nor-

malización. [Sugerencia: Considerar cada pico como un triángulo.]

3.28 En los átomos hidrogenoides el valor medio de r está dado por

$$\bar{r} = \frac{n^2 a_0}{Z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\}.$$

Calcular \bar{r} para todos los estados con $n = 1, 2$ y 3 . Comparar estos valores con los radios de Bohr correspondientes. Utilizando \bar{r} como medida del tamaño de la órbita, disponer los estados nl en orden creciente de distancia promedio al núcleo.

3.29 Las funciones de onda radiales tienen uno o más nodos, es decir, regiones en las cuales la probabilidad de encontrar el electrón es cero. Hallar el valor de r para el cual ocurre esto en la función de onda $2s$ de la tabla 3-6.

3.30 Usando la ec. (3.24) demostrar que, independientemente del momentum angular, la función de onda radial de una partícula libre a gran distancia del origen es proporcional a $e^{\pm ikr/r}$, donde $k^2 = 2mE/\hbar^2$. De aquí que se pueda escribir la función de onda completa en la forma $f(\theta)e^{\pm ikr/r}$, donde $f(\theta)$ depende del momentum angular. Interpretar ambos signos.

3.31 Escribir las integrales radiales y angulares necesarias para computar los elementos de matriz de $z = r \cos \theta$ entre los estados $n'l m_l$ y $n'T m'_l$. Demostrar que los elementos de matriz son nulos a no ser que $m_l = m'_l$.

3.32 Estimar la corrección relativista relativa $\Delta E_r/E_n$ para los niveles $n = 2$ del átomo de hidrógeno.

3.33 Analizar el desdoblamiento de los niveles p , d y f de un átomo con un electrón como resultado del efecto relativista. [Sugerencia: ver el ejemplo 3.6.]

3.34 Determinar la corriente eléctrica del electrón en las tres primeras órbitas de Bohr ($n = 1, 2, 3$). Calcular también para cada caso el momento dipolar magnético del electrón.

3.35 Dibujar un diagrama de niveles de energía para los estados $4f$ y $3d$ del hidrógeno en presencia de un campo magnético. Mostrar que en la transición $4f \rightarrow 3d$ el número de líneas espectrales es tres. Si el campo magnético es $0,5 \text{ T}$, ¿serán

observables las líneas teniendo en cuenta que la resolución de un espectrómetro es 10^{-11} m ?

3.36 Se puede obtener el valor de e/m_e experimentalmente observando el efecto Zeeman. Hallar el valor de e/m_e si la separación entre dos líneas en un campo de $0,450 \text{ T}$ es $0,629 \times 10^{14} \text{ Hz}$. ¿Cuál es la separación en longitud de onda para la línea del hidrógeno correspondiente a la transición $n = 2$ a $n = 1$? ¿Es la separación en longitud de onda para la línea H_α ($n = 3$ a $n = 2$) mayor, menor o igual?

3.37 La fuerza que un campo magnético no homogéneo \mathcal{B} de gradiente $d\mathcal{B}/dz$ ejerce sobre un dipolo magnético de momento M es $F = \pm M(d\mathcal{B}/dz)$. Si en cierta región el gradiente es $1,5 \times 10^8 \text{ T m}^{-1}$, calcular la fuerza que se ejerce sobre un electrón debida a su momento dipolar magnético de espín. Si un átomo de hidrógeno se mueve 1 m en dirección perpendicular a ese campo, calcular el desplazamiento vertical si la velocidad del átomo de hidrógeno es 10^4 m s^{-1} y el espín del electrón es paralelo o antiparalelo al campo magnético.

3.38 Un haz de átomos de plata con una velocidad media de $7 \times 10^6 \text{ m s}^{-1}$ atraviesa un campo magnético no homogéneo de $0,1 \text{ m}$ de longitud y que tiene una gradiente de $3 \times 10^8 \text{ T m}^{-1}$ en dirección perpendicular a la del movimiento de los átomos. Hallar la separación máxima de los dos haces que emergen del campo. Suponer que el momento magnético neto de cada átomo es 1 magnetón de Bohr.

3.39 ¿Qué señal de radiofrecuencia inducirá transiciones electrónicas en las que el espín cambia de paralelo a antiparalelo (o viceversa) en un campo magnético de 10^{-1} T ?

3.40 Haciendo uso de la ec. (3.39) verificar que son correctos los números dados para el desdoblamiento espín-órbita de los niveles de energía del hidrógeno mostrados en la fig. 3.23. Calcular las mismas energías de desdoblamiento para el He^+ .

3.41 En el ejemplo 3.8 se indicó que la interacción espín-órbita origina una precesión de L y de S alrededor de su resul-

tante J , que es constante. Demostrar que en este caso L_z y S_z no pueden tener valores bien definidos aunque su suma J_z sea constante. En consecuencia, m_l y m_s no son buenos números cuánticos mientras que m sí lo es.

3.42 Analizar el desdoblamiento del nivel 3d del hidrógeno debido a un campo magnético (a) cuando el campo magnético es débil y (b) cuando es intenso, respecto a la interacción espín-órbita.

3.43 Discutir el desdoblamiento de las líneas en la transición 3d \rightarrow 2p en presencia de un campo magnético, cuando éste es débil respecto a la interacción espín-órbita.

3.44 La expresión relativista de la energía de una partícula libre es $E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2$. Escribir la correspondiente ecuación relativista de Schrödinger reemplazando p por su operador $-i\hbar\nabla$ (conforme a la tabla 2-4). Esta ecuación se denomina *ecuación de Klein-Gordon*. (a) Hallar la solución correspondiente a una partícula libre que se mueve según el eje X . (b) Demostrar que para una partícula libre de momentum angular nulo la función de onda es $\psi = Ce^{-i\omega r}/r$, donde $\mu = m_0 c/\hbar$ es 2π por la inversa de la longitud de onda Compton de la partícula.

3.45 En el caso de una partícula relativista que se mueve con una energía potencial E_p , la energía total se escribe $E = c \sqrt{m_0^2 c^2 + p^2} + E_p$. También se puede escribir esto en la forma $(E - E_p)^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2$. Escribir la correspondiente ecuación de Schrödinger para el átomo

de hidrógeno reemplazando p por su operador $-i\hbar\nabla$ (ver el problema 3.44). [Nota: Esta ecuación no da correctamente los niveles de energía relativistas del hidrógeno.]

3.46 Se puede demostrar que la interacción espín-órbita es

$$E_{SL} = \frac{1}{2m_0^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dE_p}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L},$$

donde E_p es la energía potencial debida a la interacción eléctrica con el núcleo. Empleando el resultado

$$\overline{(r^{-2})} = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l + \frac{1}{2}) (l + 1)},$$

obtener la expresión del desdoblamiento espín-órbita ΔE_{SL} dada en el ejemplo 3.7.

3.47 De acuerdo con el ejemplo 3.6, la corrección relativista a los niveles de energía de un átomo con un electrón se puede obtener computando el valor medio de

$$p^4 \approx 4m^2 (E_n - E_p)^2$$

donde E_n está dado por la fórmula de Balmer y $E_p = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$ es la energía potencial del electrón. Usando los resultados

$$\overline{(r^{-1})} = \frac{Z}{a_0 n^2}$$

y

$$\overline{(r^{-2})} = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l + \frac{1}{2})},$$

obtener la ec. (3.26).

ATOMOS CON MUCHOS ELECTRONES

- 4.1 *Introducción*
- 4.2 *Atomo de helio*
- 4.3 *Principio de exclusión*
- 4.4 *Estructura atómica*
- 4.5 *Acoplamiento L-S*
- 4.6 *Atomos con uno o dos electrones de valencia*
- 4.7 *Espectros de rayos X*

4.1 Introducción

Todos los átomos — excepto el de hidrógeno y ciertos iones de elementos ligeros — contienen varios electrones. Por consiguiente, el problema del átomo con un solo electrón estudiado en el capítulo anterior parecería de poco valor práctico. Sin embargo, comprender las propiedades del átomo con un solo electrón es muy útil para analizar átomos con muchos electrones.

La primera dificultad con el átomo de muchos electrones es la imposibilidad de describir el movimiento de cada electrón individualmente porque, además de considerar la interacción eléctrica de cada electrón con el núcleo, debemos considerar las interacciones mutuas entre ellos. De este modo la energía potencial de todo el átomo es

$$E_p = \sum_{\text{Todos los electrones}} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{\text{pares}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (4.1)$$

El último sumando corresponde a un acoplamiento del movimiento de los electrones, y en consecuencia no es posible considerar el movimiento de cada electrón independientemente del de los otros. Cualquier modificación en el movimiento de un electrón debe, necesariamente, afectar el movimiento de los otros. Por lo tanto, no podemos hablar de la energía de cada electrón sino sólo de la energía de todo el átomo (o ion). Por la misma razón, no podemos hablar de la función de onda para cada electrón, sino sólo de la función de onda para el átomo completo.

El problema de muchos electrones no puede resolverse exactamente; por lo tanto se requieren ciertas aproximaciones. Ilustraremos estas aproximaciones estudiando el átomo de helio.

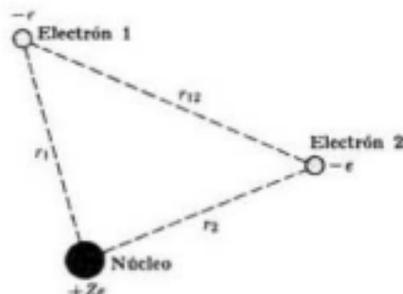


Fig. 4-1. Un átomo o ion similar al helio.

4.2 Atomo de helio

De todos los átomos con muchos electrones, los más simples son aquellos con dos electrones, tales como el ion negativo del hidrógeno H^- ($Z = 1$), el átomo de helio He ($Z = 2$), el átomo de litio simplemente ionizado Li^+ ($Z = 3$), y así

sucesivamente. En este caso, la energía potencial de los electrones (fig. 4-1) es

$$E_p = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}. \quad (4.2)$$

Los dos primeros términos corresponden a la atracción entre el núcleo y cada uno de los electrones y el último a la repulsión entre los dos electrones. Aún para este problema relativamente simple de sólo dos electrones es imposible resolver exactamente la ecuación de Schrödinger y es necesario hacer varias aproximaciones. Como la discusión matemática de los átomos como el helio está fuera del propósito de este libro, nos limitaremos a una descripción física, seguida por una breve explicación en el ejemplo 4.2 de cómo se calcula la energía.

En primera aproximación, podemos ignorar el último término (o sea la interacción electrón-electrón) en la ec. (4.2). Esto equivale a suponer que cada electrón se mueve independientemente del otro. Por ello, esta aproximación se llama *modelo de partículas independientes*. Por consiguiente, el movimiento de cada electrón puede ser descrito por funciones de onda hidrogenoides del tipo $\psi_{nlm_l} = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi)$, especificadas por los números cuánticos orbitales n, l, m_l . La energía del átomo se obtiene añadiendo términos que tengan la forma de la ec. (3.5), esto es, $E = -RhcZ^2/n^2$, un término por cada electrón. Luego, en el caso del He la energía del movimiento de los electrones en el estado fundamental, $n = 1$ (si hacemos $Z = 2$ en la ec. 3.5) será $E_{He} = 2 \times (-54,4 \text{ eV}) = -108,8 \text{ eV}$. Sin embargo, el valor experimental es $E_{He} = -78,98 \text{ eV}$. De este modo nuestra aproximación de primer orden da un valor demasiado bajo para la energía. Esto se debe a que hemos despreciado la repulsión entre los dos electrones, que tiende a elevar la energía del átomo. Podemos mejorar nuestra aproximación considerando la perturbación del movimiento electrónico causado por la interacción mutua de los dos electrones. Se obtiene un sensible mejoramiento en los cálculos considerando que cada electrón se mueve no sólo en el campo central del núcleo sino también en un campo central promedio producido por el otro electrón. De este modo el efecto neto aparente de cada electrón sobre el movimiento del otro es reducir la carga del núcleo en una cierta cantidad. La energía del átomo en el estado fundamental se puede escribir entonces en la forma

$$E = 2(Z - \delta)^2 E_H,$$

donde $E_H = -13,6 \text{ eV}$ (la energía para el movimiento de los hidrogenoides) y δ es la constante de pantalla que para el estado fundamental del helio debe tener el valor 0,32 para estar de acuerdo con el valor observado de E_{He} . Esto es, el efecto pantalla de cada electrón sobre el otro es cerca de un tercio de la carga del electrón.

Para ayudar nuestra discusión, señalemos los electrones con 1 y 2. Como en nuestra primera aproximación supusimos que los electrones se movían independientemente el uno del otro, la probabilidad de encontrar el electrón 1 en una posición dada y al mismo tiempo hallar el electrón 2 en otra posición también dada es el producto de la distribución de probabilidad para cada electrón, debido a que los dos eventos no están relacionados, esto es, $P_{\text{átomo}} = P(1)P(2)$.

Concluimos entonces que en el modelo de partículas independientes la función de onda del átomo deberá ser el producto de las funciones de onda para cada electrón.* Si designamos los números cuánticos orbitales nlm_l del electrón 1 por a y los del electrón 2 por b , debemos escribir entonces

$$\psi_{\text{átomo}} = \psi_a(1)\psi_b(2), \quad (4.3)$$

con lo cual resulta una distribución de probabilidad

$$|\psi_{\text{átomo}}|^2 = |\psi_a(1)\psi_b(2)|^2 = |\psi_a(1)|^2 |\psi_b(2)|^2. \quad (4.4)$$

Debido al movimiento de los electrones, el campo central promedio que un electrón produce sobre el otro se aparta del campo coulombiano $1/r$ producido por el núcleo. Obviamente, esto requiere una ligera modificación de las funciones de onda $\psi_a(1)$ y $\psi_b(2)$ que ya no son idénticas a las funciones de onda de los hidrogenoides. El cambio afecta la parte radial R_{nl} pero no la angular Y_{lm_l} de la función de onda, debido a que la fuerza resultante sobre cada electrón es aún una fuerza central. Usando técnicas matemáticas apropiadas podemos optimizar la función de onda del electrón y obtener así los niveles de energía del átomo con una precisión relativamente buena.

Empero, aún cuando las funciones que aparecen en la ec. (4.3) sean optimizadas de este modo, la expresión para la función de onda del átomo no puede ser correcta. La función de onda (4.3) dice que el electrón 1 está en el estado a y el 2 en el estado b . Pero la función de onda

$$\psi_{\text{átomo}} = \psi_a(2)\psi_b(1), \quad (4.5)$$

correspondiente al electrón 2 en el estado a y al electrón 1 en el estado b , debe representar un estado de la misma energía que la función de onda de la ec. (4.3) y describir el estado del átomo tan bien como la ec. (4.3). Se denomina *degeneración de intercambio* al hecho de que las funciones de onda dadas por las ecs. (4.3) y (4.5) corresponden a la misma energía.

Ahora bien, *los electrones son idénticos e indistinguibles* y todo lo que podemos decir es: en el átomo un electrón está en el estado a y el otro en el estado b . Esto requiere que la función de onda $\psi_{\text{átomo}}$ sea tal que $|\psi_{\text{átomo}}|^2$ (que da la distribución de probabilidad de ambos electrones) sea simétrica con respecto a los dos electrones, de tal manera que ambos desempeñen el mismo papel. Ni la función de onda del átomo dada por la ec. (4.3) ni la dada por la ec. (4.5) llenan estos requisitos. Se puede obtener una adecuada función de onda para el átomo (incorporando el hecho de que los electrones son indistinguibles) haciendo combinaciones lineales apropiadas de las ecs. (4.3) y (4.5), tales como

$$\psi_{\text{átomo}} = \psi_a(1)\psi_b(2) \pm \psi_a(2)\psi_b(1). \quad (4.6)$$

El estudiante puede observar que en ambos casos la expresión $|\psi_{\text{átomo}}|^2$ es simétrica con respecto a ambos electrones. La información contenida en las funciones dadas por las ecs. (4.3), (4.5) y (4.6) está esquemáticamente expresada en la fig. 4.2.

* Esta conclusión también se deduce de un modo sencillo a partir de la ecuación de Schrödinger para un sistema de partículas independientes.

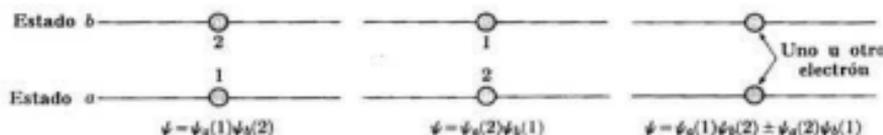


Figura 4-2

En consecuencia llamaremos a las funciones de onda dadas por la ec. (4.6) *funciones de onda orbitales*, ya que describen el comportamiento espacial u orbital de los electrones en un átomo, sin hacer referencia al espín. Las dos funciones orbitales de la ec. (4.6) son muy diferentes en cuanto a la función de onda orbital con el signo positivo

$$\psi_S(1, 2) = \psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1), \quad (4.7)$$

es *simétrica* con respecto a los dos electrones y no varía si éstos se intercambian; esto es, $\psi_S(1, 2) = \psi_S(2, 1)$. Por otra parte, la función de onda orbital con signo menos

$$\psi_A(1, 2) = \psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1), \quad (4.8)$$

es *antisimétrica* con respecto a los dos electrones y cambia de signo si éstos se intercambian, esto es, $\psi_A(1, 2) = -\psi_A(2, 1)$.

Esta característica de simetría se refleja en otra propiedad importante: la energía del átomo asociada con ψ_S no puede ser la misma que la energía correspondiente a ψ_A . Observemos que si los electrones 1 y 2 están muy cerca uno del otro los dos términos que componen ambas funciones son casi idénticos, y por consiguiente ψ_A es muy pequeño o cero. Luego la función de onda antisimétrica ψ_A describe un estado en el cual los electrones nunca están muy cerca y en consecuencia tienen en promedio una energía de repulsión relativamente pequeña. Por otra parte, la función de onda simétrica ψ_S no excluye la posibilidad de que los electrones puedan estar muy juntos en ciertos instantes, y en consecuencia el promedio de energía de repulsión en el estado descrito por ψ_S es mayor que el de ψ_A . Concluimos entonces que:

Los átomos como el helio pueden estar en dos estados diferentes, con funciones de onda orbitales ψ_S y ψ_A del átomo, correspondientes al mismo conjunto de números cuánticos orbitales a y b asignados a los dos electrones en el modelo de partículas independientes.

En otras palabras, un átomo de dos electrones tiene dos conjuntos de estados estacionarios y niveles de energía, uno descrito por funciones de ondas orbitales simétricas y el otro por funciones de onda orbitales antisimétricas. Este efecto puramente cuántico es una consecuencia del hecho de que los electrones son indistinguibles.

La sola excepción a la proposición anterior es el caso en el cual los dos conjuntos de números cuánticos orbitales son idénticos; esto es, $a = b$. Entonces

$\psi_A = \psi_a(1)\psi_a(2) - \psi_a(2)\psi_a(1) = 0$. Por lo tanto, cuando los dos electrones tienen el mismo conjunto de números cuánticos orbitales, sólo el estado orbital simétrico es posible.

Hasta aquí hemos considerado sólo funciones de onda que describen la distribución espacial de los electrones. Una descripción completa del estado del átomo requiere que tomemos en cuenta el espín de los electrones. Cada electrón tiene un espín de $\frac{1}{2}$. El espín de un electrón puede ser *paralelo* o *antiparalelo* al espín de otro, dando un espín total de uno ($S = 1$) ó cero ($S = 0$).^{*} Los estados de espín con $S = 0$ se llaman *singletes* porque se pueden obtener de una manera única (singular), como se ilustra en la fig. 4-3. Sin embargo, cuando $S = 1$, el vector espín resultante puede tener tres orientaciones en el espacio, que corresponden a $M_S = +1, 0$ y -1 . Estos estados se muestran por medio de diagramas en la fig. 4-3. Por consiguiente, los estados de espín con $S = 1$ tienen tres funciones de onda de espín y se denominan *tripletes*.

Se puede probar que la función de onda del espín total del estado singlete ($S = 0$) es *antisimétrica* con respecto a los dos electrones, mientras que las tres funciones de onda del espín total del estado triplete ($S = 1$) son *simétricas* con respecto a los dos electrones. Estas funciones de onda de espín se expresan mediante las funciones de onda de espín de un electrón χ_s introducidas en la sección 3.7 de acuerdo a

$$\begin{aligned} \chi_A &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)], & M_S &= 0, \\ \chi_S &= \begin{cases} \chi_+(1)\chi_+(2), & M_S = +1, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_+(2)\chi_-(1)], & M_S = 0, \\ \chi_-(1)\chi_-(2), & M_S = -1. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Para cada función de onda se ha dado el valor de $M_S = m_{s_1} + m_{s_2}$ correspondiente a la componente S_z del espín total; $1/\sqrt{2}$ es un factor de normalización. Obsérvese que las funciones de onda corresponden a las situaciones descritas en la fig. 4-3. En resumen, tenemos

Estado singlete ($S = 0$): función de onda antisimétrica de espín χ_A .

Estado triplete ($S = 1$): funciones de onda simétricas de espín χ_S .

La función de onda total del átomo se obtiene combinando la función de onda orbital, dada por ψ_S ó ψ_A y la función de onda de espín, dada por χ_S ó χ_A ; esto es,

$$\psi_{\text{total}} = (\text{función de onda orbital}) \times (\text{función de onda de espín}).$$

Es evidente que la simetría de ψ_{total} depende de la simetría de cada uno de los factores, y como hay dos clases de funciones de onda orbitales y dos clases de funciones de onda de espín, resultan cuatro posibles combinaciones entre ellas.

^{*} Los valores de los números cuánticos para el momentum angular orbital total, espín total o sus componentes se designan con letras mayúsculas. Las cantidades correspondientes para electrones individuales se designan con letras minúsculas.

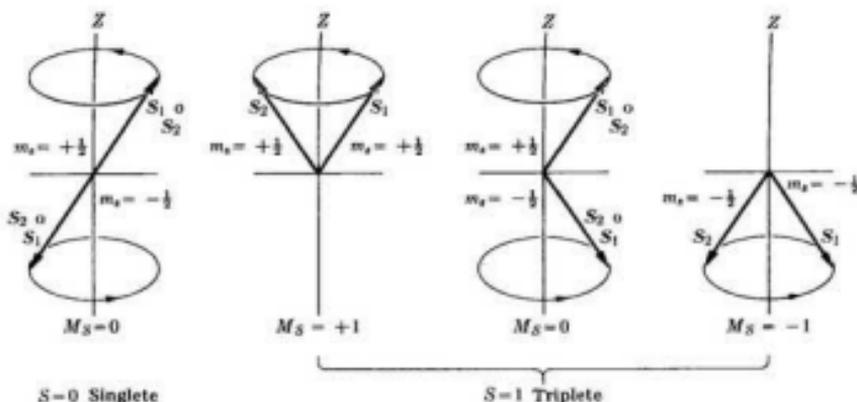


Fig. 4-3. Estados de espín para un sistema de dos electrones.

Ahora bien, un examen de los niveles de energía del átomo de helio revela que los estados descritos por funciones de onda ψ_S orbitales simétricas son siempre singletes ($S = 0$) y por lo tanto corresponden a funciones de onda χ_A de espín antisimétricas, mientras que los estados descritos por funciones de onda ψ_A orbitales antisimétricas son siempre tripletes ($S = 1$), y de este modo corresponden a funciones de onda χ_S de espín, simétricas. Parece entonces que los únicos estados permitidos en la naturaleza son

$$\psi_{\text{total}} = \begin{pmatrix} \text{función de onda} \\ \text{orbital} \\ \text{simétrica} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \text{función de onda} \\ \text{de espín} \\ \text{antisimétrica} \end{pmatrix} = \psi_S \chi_A, \quad \text{singletes,} \quad (4.10)$$

$$\psi_{\text{total}} = \begin{pmatrix} \text{función de onda} \\ \text{orbital} \\ \text{antisimétrica} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \text{función de onda} \\ \text{de espín} \\ \text{simétrica} \end{pmatrix} = \psi_A \chi_S, \quad \text{tripletes.} \quad (4.11)$$

En un caso o en el otro ψ_{total} es antisimétrica, ya que es el producto de un factor simétrico y uno antisimétrico. Esta es una conclusión de mucha importancia que se puede establecer en forma general para cualquier número de electrones como sigue:

La función de onda total de un sistema de electrones debe ser antisimétrica.

Lo que implica esta proposición con respecto a los átomos con muchos electrones será cuidadosamente analizado en la próxima sección. Ahora discutiremos brevemente cómo afecta a los niveles de energía de átomos como el helio.

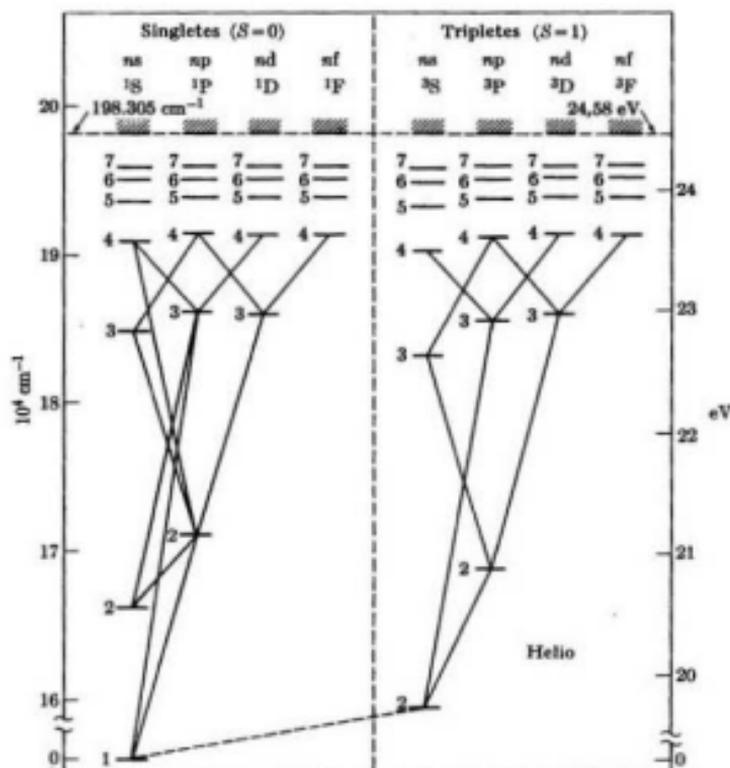


Fig. 4-4. Niveles de energía del helio, mostrando algunas transiciones.

La fig. 4-4 muestra los niveles de energía del helio cuando uno de sus electrones está en el estado fundamental $1s$ (números cuánticos orbitales $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$) y el otro está en el mismo estado o en un estado excitado. Los números cuánticos orbitales del electrón excitado aparecen en la parte superior de la figura designados ns , np , nd , etc. Los valores de la energía se dan con respecto al estado fundamental. También se muestra algunas de las posibles transiciones. Los átomos con $S = 0$ constituyen el *parahelio* y aquéllos con $S = 1$, el *ortohelio*. Observar que entre los estados singletes y los triplete no se indican transiciones. Tales transiciones son muy improbables, porque involucran un reordenamiento del espín, lo cual sería posible sólo si hubiera fuerzas intensas dependientes del espín. De este modo, en cierto sentido, podemos considerar el ortohelio y el parahelio como dos gases diferentes. La proporción de átomos de cada clase es tres a uno. Observar que el estado $n = 1$ existe sólo cuando $S = 0$, porque en este estado ambos electrones tienen necesariamente los mismos nú-

meros cuánticos orbitales y en consecuencia la función de onda orbital debe ser simétrica.

Cada estado del átomo del helio se designa por una letra mayúscula S, P, D, F, etc., correspondiente a un momentum angular orbital total del átomo (que es la suma del momentum angular orbital de los dos electrones) igual a 0, 1, 2, 3, etc. En cada uno de los casos ilustrados en la fig. 4-4, el momentum angular orbital total es igual al momentum angular orbital del electrón excitado, ya que el otro electrón tiene un momentum angular orbital igual a cero. El número escrito en la parte superior de cada letra S, P, D, ... da el valor $2S + 1$ ó *multiplicidad*, el cual es igual a 1 para los estados singletes y a 3 para los estados tripletes.

Debido a la interacción espín-órbita, los estados tripletes consisten en tres niveles muy cercanos correspondientes a las tres posibles orientaciones del espín total con respecto al momentum angular orbital total. Esto se llama *estructura fina* y no aparece indicada en la figura. Los estados S no tienen evidentemente ninguna estructura fina. Además de los estados que se muestran en la fig. 4-4, puede haber otros muchos estados estacionarios, en los cuales ambos electrones están excitados. Sin embargo, no los estudiaremos aquí.

EJEMPLO 4.1. Normalizar las funciones de onda ψ_S y ψ_A dadas por las ecs. (4.7) y (4.8).

Solución: Designemos bien ψ_S o bien ψ_A por ψ . Entonces, considerando que la integral es sobre las coordenadas de ambos electrones, tenemos

$$\begin{aligned} \int \psi^* \psi \, d\tau &= \int_1 \int_2 [\psi_a^*(1)\psi_b^*(2) \pm \psi_b^*(2)\psi_a^*(1)] [\psi_a(1)\psi_b(2) \pm \psi_b(2)\psi_a(1)] \, d\tau_1 \, d\tau_2 \\ &= \int_1 \psi_a^*(1)\psi_a(1) \, d\tau_1 \int_2 \psi_b^*(2)\psi_b(2) \, d\tau_2 \\ &+ \int_1 \psi_b^*(1)\psi_b(1) \, d\tau_1 \int_2 \psi_a^*(2)\psi_a(2) \, d\tau_2 \\ &\pm \int_1 \psi_a^*(1)\psi_b(1) \, d\tau_1 \int_2 \psi_b^*(2)\psi_a(2) \, d\tau_2 \\ &\pm \int_1 \psi_b^*(1)\psi_a(1) \, d\tau_1 \int_2 \psi_a^*(2)\psi_b(2) \, d\tau_2. \end{aligned}$$

Sin embargo, como las funciones propias ψ_a y ψ_b son ortogonales (recordar la ec. (2.41)), tenemos que

$$\int \psi_a^*(i)\psi_b(i) \, d\tau_i = \int \psi_b^*(i)\psi_a(i) \, d\tau_i = 0, \quad i = 1, 2.$$

Además, las funciones propias están normalizadas, esto es,

$$\int_a \psi_a^*(i)\psi_a(i) \, d\tau_i = \int_b \psi_b^*(i)\psi_b(i) \, d\tau_i = 1, \quad i = 1, 2.$$

Por consiguiente encontramos que $\int \psi^* \psi \, d\tau = 2$. Esto prueba que las funciones ψ_S y ψ_A no están normalizadas. Para normalizar las funciones de onda es suficiente multiplicarlas por el factor $1/\sqrt{2}$, dando

$$\begin{aligned} \psi_S(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_b(2)\psi_a(1)], \\ \psi_A(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_b(2)\psi_a(1)]. \end{aligned} \tag{4.12}$$

Esto explica también el factor $1/\sqrt{2}$ que aparece en la función de onda de espín, ec. (4.9).

EJEMPLO 4.2. Cálculo de la energía del átomo de helio usando las funciones de onda normalizadas (4.12).

Solución: El operador hamiltoniano total para el átomo de helio puede ser escrito en la forma $H = H_1 + H_2 + H_{12}$, donde

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \quad \text{y} \quad H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}$$

son los hamiltonianos para cada electrón en el campo coulombiano del núcleo y

$$H_{12} = e^2/4\pi\epsilon_0 r_{12}$$

corresponde a la interacción entre los dos electrones. Observar que

$$H_i \psi_a(i) = E_a \psi_a(i) \quad \text{y} \quad H_i \psi_b(i) = E_b \psi_b(i), \quad i = 1, 2,$$

donde E_a y E_b serían la energía de cada electrón si se despreciara su interacción con el otro. Por lo tanto $(H_1 + H_2)\psi = (E_a + E_b)\psi$, donde ψ se refiere a cualquiera de las funciones de onda normalizadas ψ_a ó ψ_b definidas por la ec. (4.12). De este modo podemos obtener la energía del átomo de helio usando la ec. (2.50), esto es,

$$E = \int \psi^* H \psi \, d\tau = E_a + E_b + \int \psi^* H_{12} \psi \, d\tau.$$

Un cálculo directo, recordando las formas normalizadas de ψ_S y ψ_A dadas en la ec. (4.12), da

$$\int \psi^* H_{12} \psi \, d\tau = C \pm K,$$

donde

$$C = \int_1 \int_2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} |\psi_a(1)|^2 \, d\tau_1 |\psi_a(2)|^2 \, d\tau_2$$

y

$$K = \int_1 \int_2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \psi_a^*(1) \psi_b(1) \, d\tau_1 \psi_b^*(2) \psi_a(2) \, d\tau_2.$$

Por consiguiente

$$E = E_a + E_b + C \pm K.$$

Obtenemos así dos valores posibles para la energía que corresponden, respectivamente, a la función de onda simétrica ψ_S (signo positivo) y a la función de onda antisimétrica ψ_A (signo negativo). Como se puede probar que K es positiva, el estado descrito por ψ_A tiene energía menor que la correspondiente a ψ_S (siendo $2K$ la diferencia), de acuerdo con nuestra discusión intuitiva previa. La cantidad C se llama *integral de Coulomb*; da la energía de interacción de los dos electrones, suponiendo que están distribuidos con densidades eléctricas $\rho_1 = -e|\psi_a(1)|^2$ y $\rho_2 = -e|\psi_a(2)|^2$, respectivamente. La cantidad K , se llama *integral de intercambio*, da la energía de interacción de cargas con densidades

$$\rho_1^i = -e\psi_a^*(1)\psi_b(1) \quad \text{y} \quad \rho_2^i = -e\psi_b^*(2)\psi_a(2).$$

Este término no tiene explicación clásica; es un efecto cuántico puro que resulta de la identidad de los electrones. El cálculo de C y K es un proceso por demás tedioso porque las variables no están separadas debido a la presencia del factor r_{12} .

4.3 Principio de exclusión

La discusión del átomo de helio y similares hecha en la sección precedente ilustra la clase de razonamiento que se debe aplicar en el estudio de los átomos con muchos electrones. Como punto de partida razonable, usemos de nuevo el modelo de partículas independientes y consideremos que cada electrón se mueve en el campo eléctrico atractivo producido por el núcleo más el promedio del campo eléctrico de repulsión debido a los otros electrones. Por consiguiente podemos describir el estado dinámico de cada electrón por los cuatro números cuánticos: n , l , m_l y m_s .* Los tres primeros números cuánticos dan el movimiento orbital y el cuarto la orientación del espín. La energía del movimiento orbital depende sólo de n y l , y de este modo cada estado electrónico se identifica con el símbolo nl .

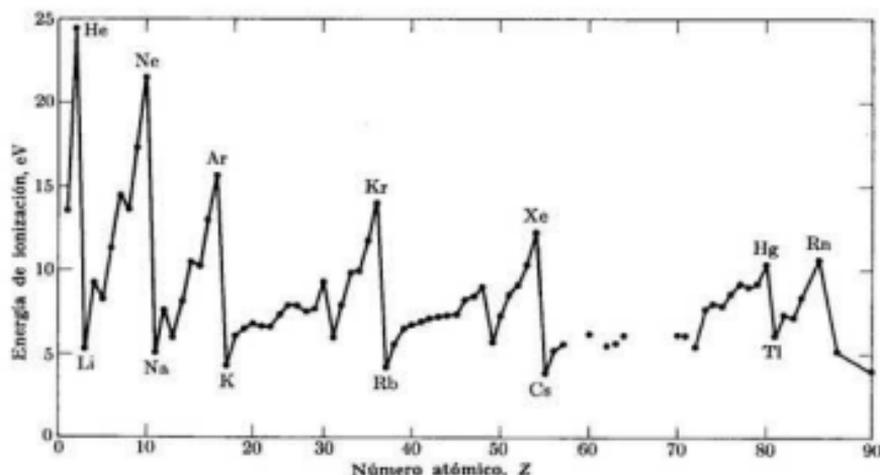


Fig. 4-5. Energía de ionización de los elementos en función del número atómico.

Todos los electrones que tienen los mismos números cuánticos nl se llaman *equivalentes*. El estado completo del átomo se especifica indicando el número de electrones equivalentes en cada estado nl , lo que se denomina una *configuración*. Si hay x electrones en el estado nl , esto se indica por nl^x . Por ejemplo, la configuración del estado fundamental del helio es $1s^2$ y la primera configuración excitada es $1s2s$.

El modelo de partículas independientes suministra una aproximación excelente cuando se combina con otro principio que explicaremos ahora. Se sabe que los elementos químicos presentan ciertas regularidades en sus propiedades físicas y químicas. Estas propiedades se repiten en elementos diferentes en forma más o

* En algunos átomos el efecto espín-órbita es suficientemente fuerte como para requerir el uso de los números cuánticos n , l , j y m . Esta situación se llama *acoplamiento j-j*.

menos cíclica, y ciclos sucesivos o períodos se completan en los números atómicos $Z = 2, 10, 18, 36, 54$ y 86 , correspondientes a los llamados gases nobles: helio, neón, argón, criptón, xenón y radón. Los gases nobles se caracterizan químicamente por la débil o casi inexistente capacidad de entrar en combinación con otros elementos. La periodicidad en las propiedades de los elementos se ejemplifica de un modo directo por las energías de ionización, como se ilustra en la fig. 4-5, donde vemos una tendencia que más o menos se repite después de cada gas noble.

Los químicos del siglo XIX ya notaron esta periodicidad; el científico ruso Dmitri Mendeléev propuso en 1870 su célebre clasificación periódica de los elementos en ciclos o períodos compuestos de ocho elementos cada uno. Esta clasificación, sin embargo, no es funcional y algunos elementos, tales como los elementos de transición y las tierras raras, no entran fácilmente dentro de este esquema simplificado.

Estas regularidades en las propiedades atómicas sugieren cierta periodicidad en el movimiento de los electrones en el átomo. Para explicar estas regularidades el físico suizo Wolfgang Pauli (1900-1958) propuso, alrededor de 1925, una nueva regla que se ha llamado desde entonces *principio de exclusión*. Este principio no sólo explica el comportamiento físico y químico de los elementos de una manera simple y elegante sino que también correlaciona otros muchos hechos experimentales e importantes de la estructura atómica. Usando el modelo de partículas independientes el principio de exclusión de Pauli establece que

dos electrones en un átomo no pueden tener el mismo conjunto de números cuánticos.

Esta regla importante es equivalente al principio más general que se introdujo en la sección 4.2 que establecía que

la función de onda total de un sistema de electrones debe ser antisimétrica.

Se puede considerar esta forma como una alternativa más general del principio de exclusión. Una consideración matemática simple revela que la antisimetría de la función de onda implica la validez del principio de exclusión como se expresa en el primer enunciado. Sin embargo, la antisimetría de la función de onda total es un enunciado más general que se aplica aún cuando el modelo de partículas independientes no sea una aproximación adecuada.*

Ilustraremos a continuación un modo simple de escribir una función antisimétrica usando el modelo de partículas independientes. Supongamos un átomo con N electrones. Designemos por una letra minúscula (digamos a) todos los números cuánticos orbitales y de espín n, l, m_l, m_s , de un estado dado de partículas independientes del átomo. Entonces, una configuración en la cual una

* El principio de antisimetría de la función de onda total se aplica no sólo a los electrones sino también a otras partículas fundamentales, tales como protones y neutrones. Todas las partículas descritas por funciones de onda totales antisimétricas se denominan *fermiones*, por razones que se explicarán en el capítulo 13.

partícula se encuentra en el estado a , otra en el estado b , y así sucesivamente, se puede expresar por una función de onda en forma de determinante:

$$\psi_{abc\dots} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_a(1) & \psi_a(2) & \psi_a(3) & \dots \\ \psi_b(1) & \psi_b(2) & \psi_b(3) & \dots \\ \psi_c(1) & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}. \quad (4.13)$$

Esta función de onda es antisimétrica, porque intercambiar dos electrones (digamos 1 y 2), equivale a intercambiar dos columnas y entonces el determinante cambia de signo. Por otra parte, si dos electrones tienen el mismo conjunto de números cuánticos (digamos $a = b$), el determinante resulta con dos columnas idénticas y por lo tanto es idénticamente igual a cero. Esto prueba la equivalencia de los dos enunciados del principio de exclusión cuando se usa el modelo de partículas independientes. El factor $1/\sqrt{N!}$ es solamente para normalizar la función.

Como ejemplo concreto, consideremos la función ψ_{AZS} , donde ψ_A está dada por la ec. (4.12) y χ_S por la ec. (4.9) con $M_S = 1$. Entonces

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_{AZS} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)]\chi_{+}(1)\chi_{+}(2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_a(1)\chi_{+}(1) & \psi_a(2)\chi_{+}(2) \\ \psi_b(1)\chi_{+}(1) & \psi_b(2)\chi_{+}(2) \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Este es un determinante del tipo de la ec. (4.13) con $N = 2$, excepto que las partes orbital y de espín de las funciones de onda de partículas independientes se indican separadamente.

4.4 Estructura atómica

Consideraremos ahora cómo podemos usar el principio de exclusión de Pauli para determinar la configuración electrónica de los átomos. Calculemos primero las posibles combinaciones de los números cuánticos m_l y m_s para cada valor del momentum angular l . Esto dará el número máximo de electrones que se pueden acomodar en el estado nl . Sabemos que para cada valor de l hay $2l + 1$ valores de m_l , y para cada par l, m_l debemos tener el electrón con el espín hacia arriba o hacia abajo ($m_s = \pm \frac{1}{2}$). Luego, el máximo número de electrones que se puede acomodar en el estado nl sin violar el principio de exclusión es $2(2l + 1)$. Esto se indica explícitamente en la tabla siguiente.

Momentum angular, l :	0	1	2	3	4
Símbolo:	s	p	d	f	g
Número de ocupación, $2(2l + 1)$:	2	6	10	14	18

Entonces, al pasar de átomos con $Z = 1$ hasta $Z = 92$ (y mayor), los electrones van ocupando los estados de energía más bajos disponibles, llenando cada uno hasta el máximo número permitido por el principio de exclusión. Una vez que un estado nl ha recibido su cuota completa de electrones, comienza a llenarse el próximo.

El orden en el cual se llenan los estados nl sucesivos se indica en la fig. 4-6. En algunos átomos pueden presentarse ligeros cambios, pero en general el orden que se sigue es el indicado. Observamos en primer lugar ciertas "brechas de energía", esto es, regiones donde la diferencia de energía entre dos estados o niveles es mayor que la que existe entre niveles por debajo del más bajo o por encima del superior. Las brechas de energía aparecen entre $1s$ y $2s$, entre $2p$ y $3s$, $3p$ y $4s$, $4p$ y $5s$, y así sucesivamente. Los niveles de energía agrupados entre dos espaciamientos constituyen una *capa*.* Cada estado nl constituyente de una capa se llama *subcapa*. El número máximo de electrones en capas sucesivas completas ocurre precisamente en $Z = 2$, 10 , 18 , 36 , 54 y 86 , que son los gases nobles tal como lo exige la evidencia experimental. Quizá haya otro gas noble en $Z = 118$, pero no se ha hallado en la naturaleza ni se ha producido artificialmente un átomo con tan elevado número atómico.

En la tabla 4-1 se da la configuración electrónica del estado fundamental de los átomos de diversos elementos químicos.

Es instructivo ver más detalladamente cómo están constituidos los 10 primeros elementos. Esto se muestra en el diagrama en bloques de la fig. 4-7.

Las subcapas s tienen un bloque para acomodar dos electrones con espines opuestos, y las subcapas p tres bloques ($m_l = +1, 0, -1$) para acomodar seis electrones. Se debe observar que para llenar una subcapa p , siempre hemos colocado tantos electrones con espines paralelos como es posible. Esto se debe al hecho experimentalmente conocido de que

el espín resultante del estado fundamental de los átomos tiene el máximo valor posible compatible con el principio de exclusión,

* Los espectroscopistas usan también el término *capa* para designar todos los estados en los átomos con muchos electrones correspondientes al mismo n . En ese sentido, estados con $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ constituyen las capas K, L, M, N, \dots Esta es la misma terminología que se usó en el capítulo 3 para los átomos con un solo electrón.

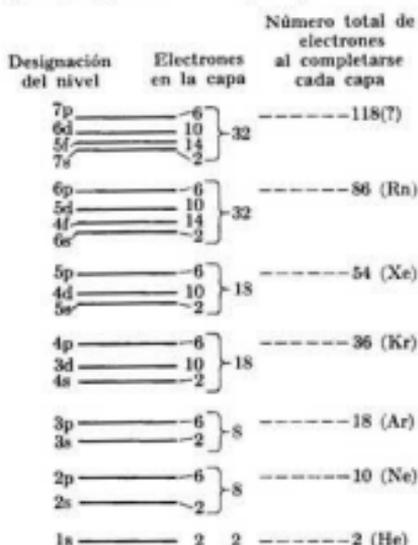


Fig. 4-6. Estructura en capas de los niveles de energía atómicos.

TABLA 4-1 Configuración electrónica de los átomos*

Z	Símbolo	Estado fundamental	Configuración fundamental	Energía de ionización, eV	Z	Símbolo	Estado fundamental	Configuración fundamental	Energía de ionización, eV
1	H	¹ S	1s	13,595	52	Te	¹ P _{1/2}	4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	9,01
2	He	¹ S	1s ²	24,581	53	I	² P _{1/2}	4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵	10,454
3	Li	² S	[He] 2s	5,390	54	Xe	¹ S	4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶	12,127
4	Be	¹ S	2s ²	9,320	55	Cs	¹ S	[Xe] 6s	3,893
5	B	² P _{1/2}	2s ² 2p	8,296	56	Ba	¹ S	6s ²	5,210
6	C	³ P _{1/2}	2s ² 2p ²	11,256	57	La	² D _{3/2}	5d 6s ²	5,61
7	N	⁴ S	2s ² 2p ³	14,545	58	Ce	¹ G _{3/2}	4f 5d 6s ²	6,54
8	O	³ P _{1/2}	2s ² 2p ⁴	13,614	59	Pr	⁴ F _{3/2}	4f 6s ²	5,48
9	F	² P _{1/2}	2s ² 2p ⁵	17,418	60	Nd	⁴ I _{3/2}	4f ² 6s ²	5,51
10	Ne	¹ S	2s ² 2p ⁶	21,559	61	Pm	² H _{1/2}	4f ² 6s ²	
11	Na	¹ S	[Ne] 3s	5,138	62	Fm	⁷ F _{3/2}	4f ² 6s ²	5,6
12	Mg	¹ S	3s ²	7,644	63	Eu	¹ S	4f ⁷ 6s ²	5,67
13	Al	² P _{1/2}	3s ² 3p	5,984	64	Gd	⁸ D _{3/2}	4f ⁷ 5d 6s ²	6,16
14	Si	³ P _{1/2}	3s ² 3p ²	8,149	65	Tb	⁶ H _{11/2}	4f ⁷ 6s ²	6,74
15	P	⁴ S	3s ² 3p ³	10,484	66	Dy	¹ I _{3/2}	4f ⁹ 6s ²	6,82
16	S	³ P _{1/2}	3s ² 3p ⁴	10,357	67	Ho	⁴ I _{13/2}	4f ⁹ 6s ²	
17	Cl	² P _{1/2}	3s ² 3p ⁵	13,01	68	Er	⁴ H _{11/2}	4f ¹⁰ 6s ²	
18	Ar	¹ S	3s ² 3p ⁶	15,755	69	Tm	⁶ F _{7/2}	4f ¹⁰ 6s ²	
19	K	¹ S	[Ar] 4s	4,339	70	Yb	¹ S	4f ¹⁴ 6s ²	6,22
20	Ca	¹ S	4s ²	6,111	71	Lu	² D _{3/2}	4f ¹⁴ 5d 6s ²	6,15
21	Sc	² D _{3/2}	3d 4s ²	6,54	72	Hf	² F _{5/2}	4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	7,0
22	Ti	³ F ₄	3d ² 4s ²	6,83	73	Ta	² F _{5/2}	4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	7,88
23	V	⁴ F _{3/2}	3d ³ 4s ²	6,74	74	W	² D _{3/2}	4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	7,98
24	Cr	¹ S	3d ⁵ 4s	6,764	75	Re	¹ S	4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	7,87
25	Mn	¹ S	3d ⁵ 4s ²	7,432	76	Os	² D _{3/2}	4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	8,7
26	Fe	⁵ D ₄	3d ⁶ 4s ²	7,87	77	Ir	² F _{7/2}	4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	9,2
27	Co	⁴ F _{3/2}	3d ⁷ 4s ²	7,86	78	Pt	¹ D ₂	4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	8,88
28	Ni	³ F ₄	3d ⁸ 4s ²	7,633	79	Au	¹ S	[Xe, 4f ¹⁴ 5d ¹⁰] 6s	9,22
29	Cu	¹ S	3d ¹⁰ 4s	7,724	80	Hg	¹ S	6s ²	10,434
30	Zn	¹ S	3d ¹⁰ 4s ²	9,391	81	Tl	² F _{5/2}	6s ² 6p	6,106
31	Ga	² P _{1/2}	3d ¹⁰ 4s ² 4p	6,00	82	Pb	² F _{5/2}	6s ² 6p ²	7,415
32	Ge	³ P _{1/2}	3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	7,88	83	Bi	¹ S	6s ² 6p ³	7,287
33	As	⁴ S	3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	9,81	84	Po	² F _{5/2}	6s ² 6p ³	8,43
34	Se	³ P _{1/2}	3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	9,75	85	At	³ F ₄	6s ² 6p ³	
35	Br	² P _{1/2}	3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	11,84	86	Rn	¹ S	6s ² 6p ⁴	10,745
36	Kr	¹ S	3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	13,996	87	Fr	¹ S	[Rn] 7s	
37	Rb	¹ S	[Kr] 5s	4,176	88	Ra	¹ S	7s ²	5,277
38	Sr	¹ S	5s ²	5,692	89	Ac	² D _{3/2}	6d 7s ²	6,9
39	Y	² D _{3/2}	4d 5s ²	6,377	90	Th	² F _{5/2}	6d ² 7s ²	
40	Zr	³ F ₄	4d ² 5s ²	6,835	91	Pa	⁴ K _{15/2}	5f 6d 7s ²	
41	Nb	² D _{3/2}	4d ⁴ 5s	6,881	92	U	³ F ₄	5f 6d 7s ²	4,0
42	Mo	¹ S	4d ⁵ 5s	7,10	93	Np	⁴ G _{7/2}	5f 6d 7s ²	
43	Tc	¹ S	4d ⁵ 5s ²	7,228	94	Pu	⁵ F ₀	5f ² 7s ²	
44	Ru	³ F ₄	4d ⁷ 5s	7,365	95	Am	¹ S	5f ⁷ 7s ²	
45	Rh	² F _{5/2}	4d ⁸ 5s	7,461	96	Cm	² D _{3/2}	5f ⁷ 6d 7s ²	
46	Pd	¹ S	4d ¹⁰	8,33	97	Bk		(5f ⁶ 6d 7s ²)	
47	Ag	¹ S	4d ¹⁰ 5s	7,574	98	Cf		(5f ⁶ 6d 7s ²)	
48	Cd	¹ S	4d ¹⁰ 5s ²	8,991	99	E		(5f ⁶ 6d 7s ²)	
49	In	² P _{1/2}	4d ¹⁰ 5s ² 5p	5,785	100	Fm		(5f ⁶ 6d 7s ²)	
50	Sn	³ P _{1/2}	4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	7,342	101	Mv			
51	Sb	⁴ S	4d ¹⁰ 5s ² 5p ³	8,639	102	No			
					103	Lw			

* Los símbolos químicos entre corchetes indican las configuraciones equivalentes de los restantes electrones que ocupan las capas llenas. Las configuraciones entre paréntesis son inciertas.

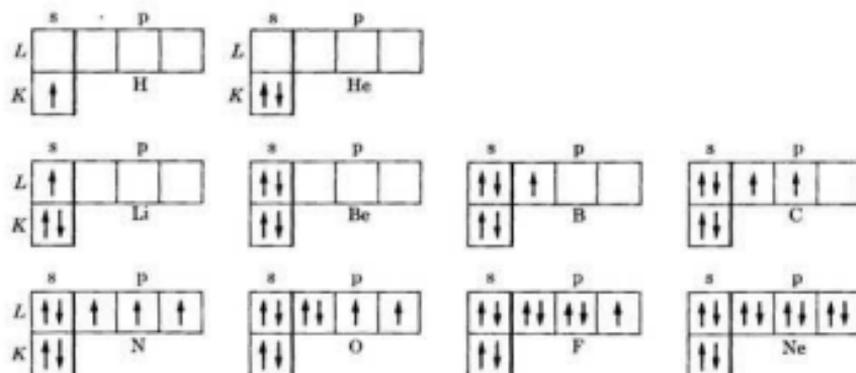


Fig. 4-7. Configuraciones electrónicas del estado fundamental de los diez primeros elementos, mostrando cómo se forman.

resultado conocido como *regla de Hund*. Esta propiedad se puede explicar como sigue. Sabemos por nuestra discusión del átomo de helio, que el estado fundamental debe ser aquel en el cual la repulsión de los electrones sea lo más pequeña posible y esto requiere una antisimetría máxima en la parte orbital de la función de onda. Como la función de onda total debe ser antisimétrica, concluimos que al estado fundamental corresponde la simetría máxima de la función de onda del espín, lo cual ocurre cuando los espines de los electrones son lo más paralelos posible.

Hay otros aspectos interesantes que merecen mencionarse en relación con la fig. 4-7. Por ejemplo, el hidrógeno tiene un solo electrón $1s$ y el litio un solo electrón $2s$, pero en el átomo de litio el electrón $2s$ tiene a su disposición los niveles $2p$ que están relativamente cerca, además de tener una energía de ionización menor (5,5 eV comparada con 13,6 eV para el hidrógeno). Estas diferencias explican el comportamiento definitivamente metálico del litio, que no presenta el hidrógeno. Análogamente, el helio y el berilio tienen completos los niveles $1s$ y $2s$, respectivamente. Sin embargo, el helio es un gas noble, mientras que el berilio no lo es. Esto se debe a que uno de los electrones $2s$ en el átomo de berilio puede ser excitado al nivel $2p$ vecino, con lo cual resulta el estado excitado que se muestra en la fig. 4-8, el cual corresponde a la valencia 2 observada en los compuestos de berilio.* Esta excitación necesita una energía de cerca de 2,7 eV, mientras que en el caso del helio la energía mínima de excitación es de 20 eV aproximadamente. Análogamente en el caso del boro, el primer estado excitado se puede obtener moviendo un electrón $2s$ al estado $2p$, como se ilustra en la fig. 4-8, lo cual requiere una energía de 3,6 eV. Este estado explica la trivalencia del boro. La situación en los átomos de carbono, oxígeno y nitrógeno es más complicada porque se puede producir nuevos estados excitados reorientando el espín

* El concepto de valencia y de enlace químico será estudiado en el capítulo 5.

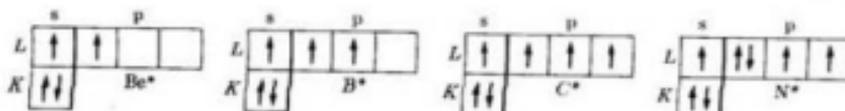


Fig. 4-8. Configuraciones electrónicas excitadas del berilio, boro, carbono y nitrógeno.

y los momentos angulares de los electrones p . En la figura 4-8 se muestra un estado excitado particularmente importante del carbono, el cual explica la tetravalencia del carbono en muchos de sus compuestos.

Podemos resumir nuestro análisis diciendo que las propiedades químicas y físicas de un elemento químico dependen de la configuración electrónica del estado fundamental, así como la de los niveles excitados vecinos. Por ejemplo, lo que caracteriza un gas noble es que está compuesto de capas completas y que, para excitar uno de sus electrones, se requiere una energía comparativamente grande debido al gran espaciamiento de energía que separa los últimos niveles completos del primer nivel desocupado. Por otra parte, átomos como el litio, sodio, potasio, etc. — con $Z = 3, 11, 19, \dots$ — están compuestos de capas cerradas más un electrón en el primer nivel por encima de una brecha de energía. Así el litio tiene una capa K completa y un electrón $2s$; el sodio tiene las capas K y L completas y un electrón $3s$, y así sucesivamente. El último electrón no está fuertemente ligado y determina el comportamiento metálico de estos elementos. Cuando aumenta el número de electrones que quedan más allá de la última capa completa, la situación se hace más y más compleja.

4.5 Acoplamiento L - S

El momentum angular total de un átomo es una propiedad muy importante porque determina (entre otras cosas) las propiedades magnéticas del átomo y las probabilidades de transición en los procesos radiativos. Si el átomo está aislado, su momentum angular total es constante. Lo designaremos por el número cuántico J tal que

$$J^2 = J(J + 1)\hbar^2. \quad (4.14)$$

La componente Z de J se determina por el número cuántico M tal que

$$J_z = M\hbar \quad (4.15)$$

con

$$M = \pm J, \pm (J - 1), \dots \quad (4.16)$$

A cada configuración electrónica pueden corresponder varios valores posibles de J , cada uno asociado con una energía diferente del átomo. Un problema importante de estructura atómica es la determinación de los valores permitidos de J y las correspondientes funciones de onda para cada configuración.

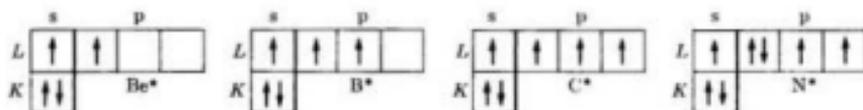


Fig. 4-8. Configuraciones electrónicas excitadas del berilio, boro, carbono y nitrógeno.

y los momentos angulares de los electrones p. En la figura 4-8 se muestra un estado excitado particularmente importante del carbono, el cual explica la tetravalencia del carbono en muchos de sus compuestos.

Podemos resumir nuestro análisis diciendo que las propiedades químicas y físicas de un elemento químico dependen de la configuración electrónica del estado fundamental, así como la de los niveles excitados vecinos. Por ejemplo, lo que caracteriza un gas noble es que está compuesto de capas completas y que, para excitar uno de sus electrones, se requiere una energía comparativamente grande debido al gran espaciamiento de energía que separa los últimos niveles completos del primer nivel desocupado. Por otra parte, átomos como el litio, sodio, potasio, etc. — con $Z = 3, 11, 19, \dots$ — están compuestos de capas cerradas más un electrón en el primer nivel por encima de una brecha de energía. Así el litio tiene una capa K completa y un electrón $2s$; el sodio tiene las capas K y L completas y un electrón $3s$, y así sucesivamente. El último electrón no está fuertemente ligado y determina el comportamiento metálico de estos elementos. Cuando aumenta el número de electrones que quedan más allá de la última capa completa, la situación se hace más y más compleja.

4.5 Acoplamiento L - S

El momentum angular total de un átomo es una propiedad muy importante porque determina (entre otras cosas) las propiedades magnéticas del átomo y las probabilidades de transición en los procesos radiativos. Si el átomo está aislado, su momentum angular total es constante. Lo designaremos por el número cuántico J tal que

$$J^2 = J(J + 1)\hbar^2. \quad (4.14)$$

La componente Z de J se determina por el número cuántico M tal que

$$J_z = M\hbar \quad (4.15)$$

con

$$M = \pm J, \pm (J - 1), \dots \quad (4.16)$$

A cada configuración electrónica pueden corresponder varios valores posibles de J , cada uno asociado con una energía diferente del átomo. Un problema importante de estructura atómica es la determinación de los valores permitidos de J y las correspondientes funciones de onda para cada configuración.

Un método de hacer esta determinación es el llamado *acoplamiento L-S* o *Russell-Saunders*. Usando el modelo de partículas independientes con funciones de ondas dadas por la ec. (4.13), en la cual cada estado electrónico se caracteriza por los números cuánticos n , l , m_l , y m_s , podemos primero encontrar el momentum angular orbital total del átomo tal que $\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{L}_i$ y $L_z = \sum_i L_{zi}$. Si L y M_L son los números cuánticos asociados con L^2 y L_z , entonces

$$L^2 = L(L+1)\hbar^2, \quad L_z = M_L\hbar, \quad M_L = \pm L, \pm(L-1), \dots, \quad (4.17)$$

con $M_L = \sum_i m_{li}$. A una configuración dada pueden corresponder varios valores de L , dependiendo de la orientación relativa de los vectores \mathbf{L}_i . Análogamente, el espín total del átomo está dado por $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{S}_i$ y $S_z = \sum_i S_{zi}$. Si S y M_S son los números cuánticos asociados con S^2 y S_z , entonces

$$S^2 = S(S+1)\hbar^2, \quad S_z = M_S\hbar, \quad M_S = \pm S, \pm(S-1), \dots \quad (4.18)$$

con $M_S = \sum_i m_{si}$. De nuevo, a una configuración dada pueden corresponder varios valores de S , dependiendo de la orientación relativa de los vectores \mathbf{S}_i .

Una vez hallados \mathbf{L} y \mathbf{S} , el momentum angular total para la configuración está dada por $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Los valores posibles del número cuántico J (que dependen de la orientación relativa de \mathbf{L} y \mathbf{S}), son

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|. \quad (4.19)$$

Estos procedimientos se ilustran para tres electrones en la fig. 4-9. Se supone que los vectores \mathbf{L}_i y \mathbf{S}_i precesan alrededor de sus resultantes \mathbf{L} y \mathbf{S} , respectivamente. A su vez, \mathbf{L} y \mathbf{S} tienen movimiento de precesión alrededor de \mathbf{J} .

El estado de un átomo se caracteriza por un conjunto de números cuánticos L , S , J . Los estados de una configuración con el mismo L y S constituyen un *término*. Cada término de una configuración tiene una energía diferente. La energía de los diferentes términos de una configuración se obtiene por medio de métodos por demás elaborados que no explicaremos aquí. Pero es fácil darse cuenta que la energía de una configuración debe depender del valor de L . Cada valor de L corresponde a una orientación relativa diferente de los momenta angulares orbitales de los electrones y por consiguiente a una orientación relativa diferente de sus movimientos. Esto debe originar un valor diferente para su interacción coulombiana o eléctrica y por lo tanto un valor diferente para la energía del átomo. Los estados de un término que tengan los mismos valores L y S , pero distintos valores de J , tienen prácticamente la misma energía y constituyen un *multiplete*. El desdoblamiento de un

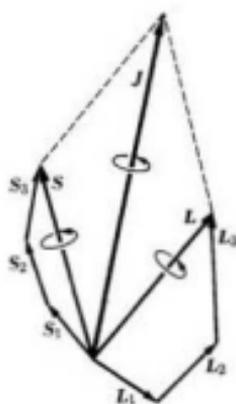


Fig. 4-9. Acoplamiento L-S.

término L - S de acuerdo a los valores de J es un efecto espín-órbita. Normalmente $S \leq L$; en consecuencia el número total de valores distintos de J asociados con un término L - S (llamado la *multiplicidad* del término) es $2S + 1$.

Un término se designa por los símbolos S , P , D , F , ... (dependiendo de si $L = 0, 1, 2, 3, \dots$) con un superíndice a la izquierda que indica la multiplicidad $2S + 1$; esto es, un término se escribe ^{2S+1}L . Algunas veces se añade un subíndice a la derecha para indicar el valor de J . En la tabla 4-1 se indicó el símbolo correspondiente al estado fundamental de cada uno de los elementos.

Consideremos algunos ejemplos que ilustran cómo hallar los términos de una configuración. En la configuración $(ns)(n's)$, que está compuesta de dos electrones s no equivalentes, debemos tener $L = 0$, ya que $l_1 = l_2 = 0$. Los espines de dos electrones son paralelos o antiparalelos, según sea $S = 1$ ó $S = 0$, respectivamente. En cada caso $J = S$. Luego, los posibles términos de la configuración $(ns)(n's)$ son el triplete 3S_1 y el singlete 1S_0 . Como segundo ejemplo, consideremos la configuración $(np)(n'p)$ de dos electrones p no equivalentes. Como $l_1 = 1$ y $l_2 = 1$, los valores posibles para el momentum angular orbital resultante son $L = 0, 1, 2$, dando lugar a estados S , P y D . En cada estado los espines pueden ser paralelos o antiparalelos, lo cual da $S = 1$ ó 0 . De este modo los posibles términos de la configuración $(np)(n'p)$ son 1S , 3S , 1P , 3P , 1D , 3D .

TABLA 4-2 Términos de electrones equivalentes

Configuración	Términos	Configuración	Términos
s	1S	d, d^9	1D
s^2	1S	d^2, d^8	$^1S, ^1D, ^1G, ^3P, ^3F$
p, p^5	3P	d^3, d^7	$^3P, ^3D, ^3F, ^3G, ^3H, ^3P, ^3F$
p^2, p^4	$^1S, ^1D, ^3P$	d^4, d^6	$^1S, ^1D, ^1F, ^1G, ^1I, ^3P, ^3D, ^3F, ^3G, ^3H, ^3D$
p^3	$^4S, ^2P, ^2D$	d^5	$^2S, ^2P, ^2D, ^2F, ^2G, ^2H, ^2I, ^4P, ^4F, ^4D, ^4G$

Cuando los electrones son equivalentes, no todos los términos son posibles debido a las limitaciones impuestas por el principio de exclusión. Por ejemplo, la configuración ns^2 admite sólo el término 1S , como vimos en el caso del helio. Observando este ejemplo desde un punto de vista ligeramente diferente, notamos que en la configuración ns^2 , si los números cuánticos n, l, m_l , y m_s de un electrón son $(n, 0, 0, +\frac{1}{2})$, los del otro deben ser $(n, 0, 0, -\frac{1}{2})$, dando $M_S = 0$, lo cual exige que $S = 0$ ó un término singlete. Análogamente para la configuración np^2 , los únicos términos posibles son 1S , 1D , y 3P . Esto se explica en el ejemplo 4.3. La tabla 4-2 da los términos correspondientes a varias configuraciones de electrones equivalentes.

El orden de los términos de una configuración se puede hallar fácilmente usando dos reglas empíricas debidas a Hund: (1) de todos los términos posibles, aquéllos con multiplicidad máxima (máximo S) tienen la mínima energía; de todos los términos con la misma multiplicidad, los de mínima energía son aquéllos

con el máximo valor de L . (2) El orden de los niveles del multiplete de cada término será *normal* (es decir, el mínimo J tiene mínima energía) cuando la subcapa está llena hasta menos de la mitad. El orden se *invierte* si la subcapa está llena hasta más de la mitad. Por ejemplo, en la configuración np^2 los niveles de energía creciente están en el orden 3P , 1D y 1S y el triplete 3P es normal, siendo $J = 0$ el más bajo. Estas reglas no son rigurosas y algunas veces no se cumplen.

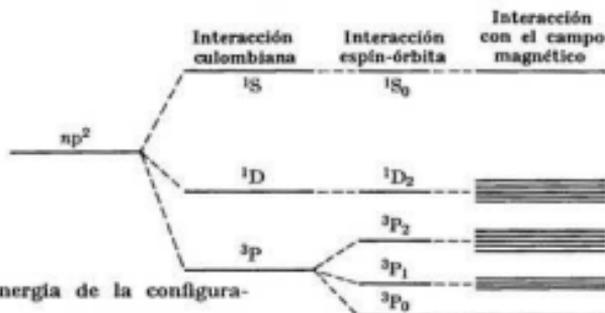


Fig. 4-10. Niveles de energía de la configuración np^2 .

El promedio del momento magnético resultante de un átomo es proporcional a J , lo cual significa que una sustancia compuesta de átomos individuales será paramagnética si $J \neq 0$ y diamagnética si $J = 0$. En presencia de un campo magnético externo los niveles de energía de un estado $L S J$ se desdoblan en $2J + 1$ subniveles, correspondientes a diferentes orientaciones posibles del momento magnético del átomo respecto al campo magnético, dando lugar al efecto Zeeman. La fig. 4-10 muestra el desdoblamiento de los niveles de energía en la configuración np^2 debido a los varios efectos mencionados.

La fig. 4-11 indica algunos de los niveles de energía del átomo de carbono, a fin de ilustrar la complejidad de los niveles de energía excitados en los átomos de muchos electrones. La configuración fundamental del carbono es $1s^2 2s^2 2p^2$; el término del estado fundamental es 3P , con los términos vecinos excitados 1D y 1S . Los términos que siguen corresponden a la excitación de uno de los electrones $2p$ (dando lugar a las configuraciones $1s^2 2s^2 2p ns$, $1s^2 2s^2 2p np$ y $1s^2 2s^2 2p nd$, como se ve en las tres primeras columnas. En las dos últimas se muestra los términos provenientes de la excitación de uno de los electrones $2s$ dando lugar a las configuraciones $1s^2 2s 2p^3$ y $1s^2 2s 2p^2 3s$. Los símbolos que aparecen al tope de cada columna corresponden al estado del ion que queda cuando sale el electrón excitado. El estado 5S de la configuración $1s^2 2s 2p^3$ corresponde a la situación mostrada en la fig. 4-8.

En la fig. 4-12 aparecen algunos niveles de energía del átomo de oxígeno. La configuración fundamental del oxígeno es $1s^2 2s^2 2p^4$; el término del estado fundamental es 3P , con los términos vecinos excitados 1D y 1S de la misma configuración. Los niveles que se muestran corresponden solamente a la excitación de uno de los electrones $2p$, resultando las configuraciones $1s^2 2s^2 2p^3 ns$, $1s^2 2s^2 2p^3 np$, etc. El gran número de niveles de energía posibles muestra claramente que los espec-

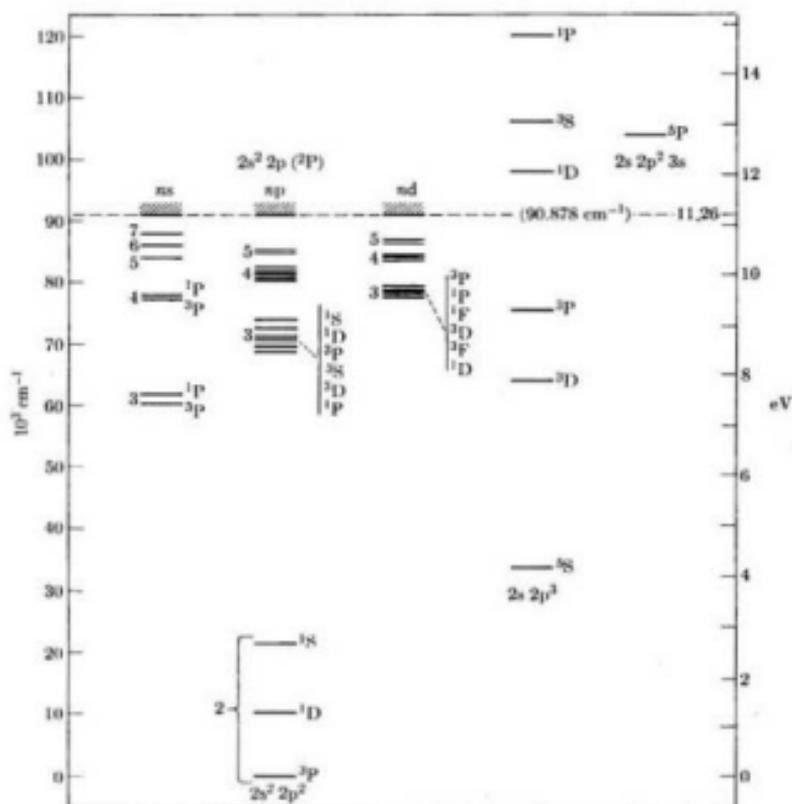


Fig. 4-11. Niveles de energía del átomo de carbono.

tros de los átomos de muchos electrones son más complejos que los de átomos con un solo electrón. Varias reglas de selección limitan las transiciones posibles. Para las transiciones dipolares eléctricas las reglas de selección son las siguientes:

$$\begin{aligned}
 \Delta L &= \pm 1, & \Delta S &= 0, \\
 \Delta J &= 0, \pm 1 \text{ (no } 0 \rightarrow 0), \\
 \Delta M &= 0, \pm 1.
 \end{aligned}
 \tag{4.20}$$

La posibilidad $J = 0 \rightarrow J' = 0$ está prohibida por la ley de la conservación del momentum angular, ya que se puede probar que un fotón tiene un momentum angular intrínseco o espín de una unidad (ver sección 9.2). Por lo tanto es imposible que haya una transición $J = 0 \rightarrow J' = 0$ con emisión (o absorción) de un

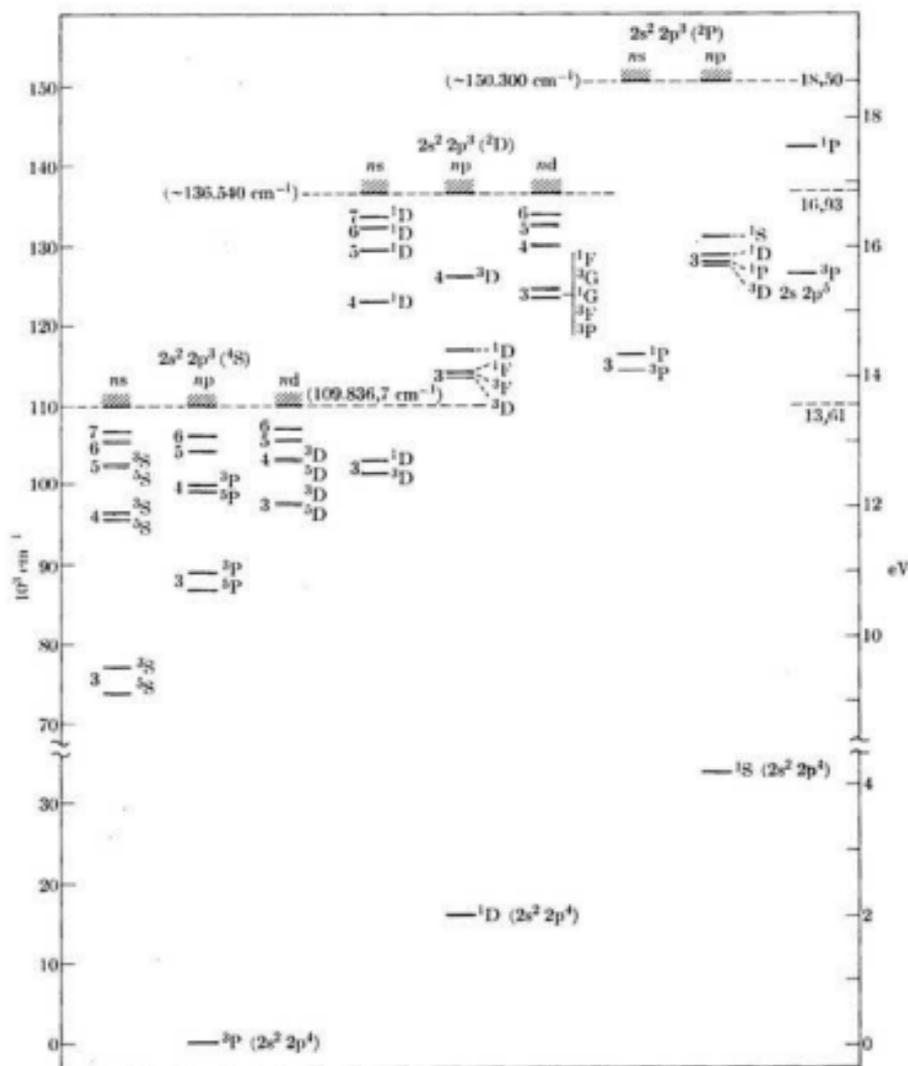


Fig. 4-12. Niveles de energía del átomo de oxígeno.

fotón que transporta la unidad de momentum angular sin violar la conservación del momentum angular. Además no es posible $\Delta M = 0$ con $\Delta J = 0$, porque en este caso la conservación del momentum angular requiere, de nuevo, un cambio

en la dirección de \mathbf{J} , lo cual implica un cambio en J_z con la correspondiente variación de M .

TABLA 4-3 Posibles valores m_l y m_s para la configuración np^3

$M_L \backslash M_S$	-1	0	+1
+2		(1, +) (1, -)	
+1	(1, -) (0, -)	(1, +) (0, -) (1, -) (0, +)	(1, +) (0, +)
0	(1, -) (-1, -)	(1, +) (-1, -) (0, +) (0, -) (1, -) (-1, +)	(1, +) (-1, +)
-1	(0, -) (-1, -)	(0, +) (-1, -) (0, -) (-1, +)	(0, +) (-1, +)
-2		(-1, +) (-1, -)	

EJEMPLO 4.3. Análisis de la configuración np^3 .

Solución: En esta configuración, correspondiente a $l = 1$, los números cuánticos de los electrones son (n, l, m_l, m_s) y (n, l, m'_l, m'_s) . Para cumplir con el principio de exclusión, los dos conjuntos de números cuánticos deben ser diferentes y por consiguiente deben diferir en m_s , en m_l o en ambos. Los posibles valores de m_l y m'_l son $+1, 0, -1$, y los de m_s y m'_s son $+\frac{1}{2}$ ó $-\frac{1}{2}$. Para simplificar la notación, los valores del espín se designarán como más (+) o menos (-) y se omitirán los números cuánticos comunes n y $l (= 1)$. La tabla 4-3 presenta las 15 combinaciones de números cuánticos compatibles con el principio de exclusión. Cada entrada da una combinación posible (m_l, m_s) y (m'_l, m'_s) . Estas están ordenadas de acuerdo a los valores comunes de $M_L = m_l + m'_l$ y $M_S = m_s + m'_s$. Cada conjunto de números cuánticos corresponde a una función de onda del tipo dado por la ec. (4.13).

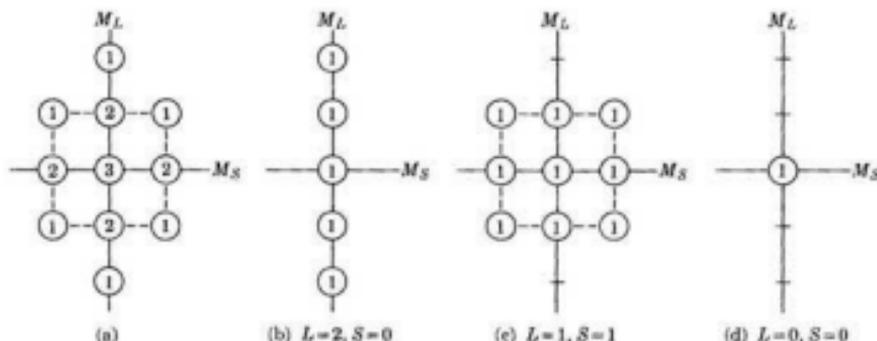


Fig. 4-13. Método de Slater para obtener los términos de la configuración np^3 .

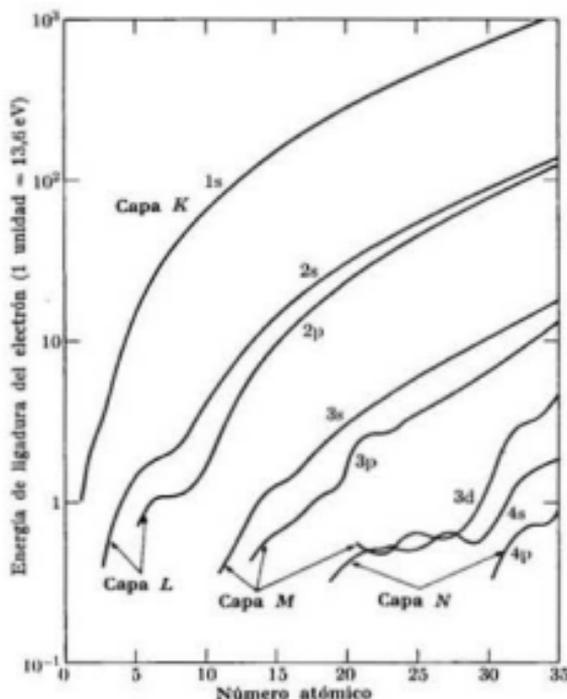


Fig. 4-14. Energía de unión de los electrones internos en función del número atómico.

La fig. 4-13(a), en la cual se usó un método desarrollado por J. C. Slater para analizar configuraciones, muestra el número de funciones de onda diferentes correspondientes a cada valor de M_L y M_S . En la tabla o en la figura se puede ver que el máximo valor de M_L es 2, y éste debe corresponder a $L = 2$ ó al término D. El valor $M_L = 2$ se asocia únicamente con M_S , y debe corresponder a $S = 0$, constituyendo un término 1D . Este estado requiere cinco funciones de onda con $M_L = -2, 1, 0, -1, -2$, y $M_S = 0$. Estas funciones de onda se indican en la fig. 4-13(b). Las diez funciones restantes están agrupadas convenientemente en las figs. 4-13(c) y (d). El ordenamiento (c) contiene las nueve combinaciones de $M_L = +1, 0, -1$, con $M_S = +1, 0, -1$, y en consecuencia corresponde a un término con $L = 1$ y $S = 1$ ó 3P . Finalmente, en (d) tenemos la última función de onda, con $M_L = 0$ y $M_S = 0$, que debe corresponder a un término con $L = 0$ y $S = 0$ ó 1S . De este modo los únicos términos posibles de la configuración np^3 son 1S , 1D y 3P .

4.6 Átomos con uno o dos electrones de valencia

La teoría general de la estructura atómica desarrollada en las secciones anteriores puede ser ilustrada de un modo muy simple en el caso de los átomos compuestos de capas completas más uno o dos electrones. Los electrones que ocupan las

capas completas constituyen el carozo del átomo; los restantes se llaman electrones de *valencia*. La energía de unión de los electrones de las capas completas es mayor que la de los electrones de valencia y aumenta rápidamente con el número atómico, como se ilustra en la fig. 4-14. La figura da la energía de unión de los electrones 1s, 2s, 2p, etc., en función del número atómico. En consecuencia, los electrones de las capas completas están ligados fuertemente y no experimentan prácticamente perturbación en la mayoría de los procesos en los cuales participa el átomo. Los electrones de valencia son, principalmente, los responsables de las propiedades químicas de los átomos; son ellos los que participan en las reacciones y enlaces químicos.

Se puede probar fácilmente que una capa con su cuota completa de electrones, tiene necesariamente $L_z = 0$ y $S = 0$. En otras palabras, una capa completa no contribuye ni al momentum angular orbital ni al espín del átomo. Luego el momentum angular orbital y el espín del átomo se deben enteramente a los electrones de valencia. Por ejemplo, en el caso de los átomos con un electrón de valencia, el espín del átomo es $S = \frac{1}{2}$ y todos los niveles de energía en los cuales sólo el electrón de valencia está excitado son dobletes ($2S + 1 = 2$). Para estos átomos $L = l$, donde l es el momentum angular orbital del electrón de valencia.

El átomo más simple con un solo electrón de valencia es el litio ($Z = 3$), que tiene un electrón en su capa más externa (electrón de valencia) y $Z - 1 = 2$ electrones en las capas internas. Los dos electrones ocupan el nivel $n = 1$, teniendo una configuración $1s^2$. Si el electrón de valencia se moviera de tal modo que no penetrara las capas internas, el campo efectivo a que quedaría sometido es el debido a la carga $+3e$ del núcleo y la $-2e$ de los electrones internos, con lo cual resulta una carga efectiva de $+e$. Por consiguiente, el movimiento y los niveles de energía del electrón de valencia serían similares a los que se hallaron para el átomo de hidrógeno. Según el estudio de la sección 3.5 sobre las funciones de onda esto ocurre sólo aproximadamente cuando el momentum angular es grande. Pero para valores bajos del momentum angular, y especialmente para los estados s ($l = 0$) la órbita del electrón de valencia penetra y se extiende a través de las capas internas, llegando hasta muy cerca del núcleo.

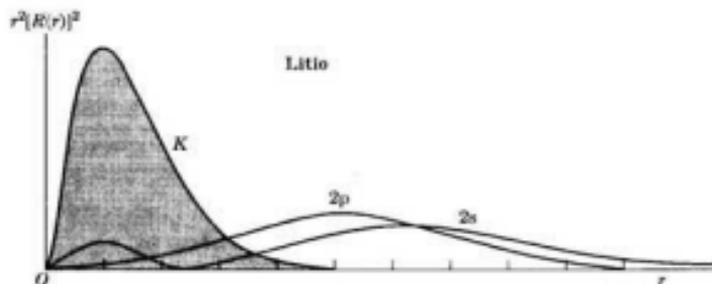


Fig. 4-16. Distribución radial de carga del carozo y del electrón de valencia en los estados 2s y 2p en el átomo de litio.

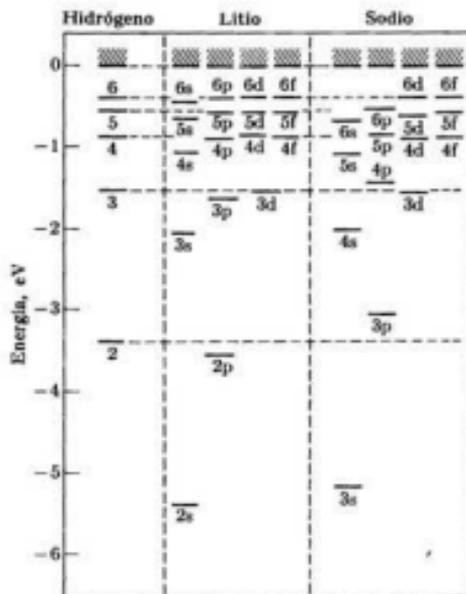


Fig. 4-16. Niveles de energía del hidrógeno, el litio y el sodio.

La fig. 4-15 muestra la distribución radial de carga de las capas internas del átomo de litio, junto con la distribución radial de carga del electrón de valencia para los estados 2s y 2p. (La distribución radial de carga es proporcional a $r^2[R(r)]^2$; ver la fig. 3-13.) Vemos así que en su movimiento el electrón de valencia demora algún tiempo dentro de las capas internas, siendo la profundidad de penetración mayor para una órbita s que para una órbita p. La carga efectiva que actúa sobre el electrón de valencia durante su movimiento en una órbita que penetra las capas internas varía desde $+\epsilon$ cuando el electrón se encuentra muy afuera, hasta $+3\epsilon$ cuando ha penetrado profundamente en las capas internas. Su energía, por tanto, está comprendida entre la del hidrógeno ($Z = 1$) y la del Li^{2+} ($Z = 3$). Como la profundidad de penetración depende del momentum angular, la energía del electrón de valencia también depende del mismo. A menor momentum angular, mayor profundidad de penetración; esto es, menor (más negativa) energía. De modo que en lugar del esquema de niveles que se ilustra en la fig. 3-2, en el cual todos los estados con el mismo n tienen la misma energía, independientemente de su momentum angular, tenemos la situación que se indica en la fig. 4-16 para los átomos de litio y sodio con un electrón de valencia. Para que se comparen, se indica también los niveles de energía del hidrógeno. Observamos que a mayor valor de n y del momentum angular l , más cercanos están los niveles de energía del litio y del sodio a los del hidrógeno, debido a

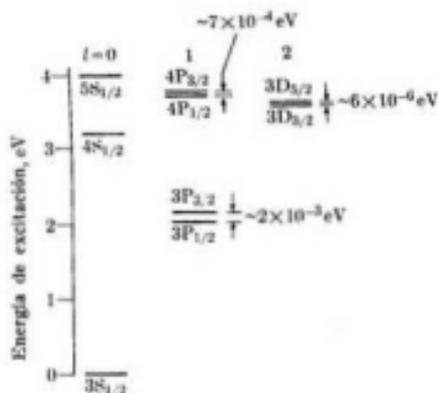


Fig. 4-17. Estructura fina de los niveles de energía del átomo de sodio debida a la interacción espín-órbita.

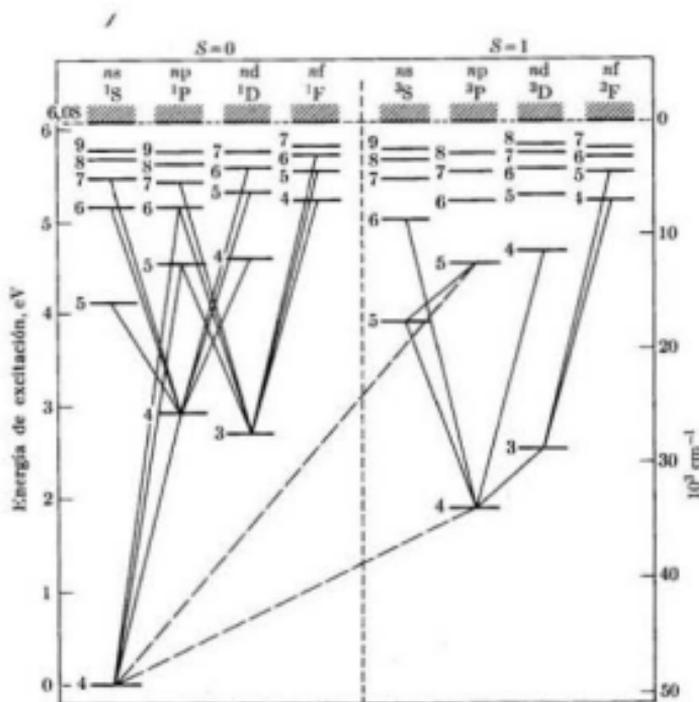


Fig. 4-18. Niveles de energía del calcio, mostrando algunas transiciones.

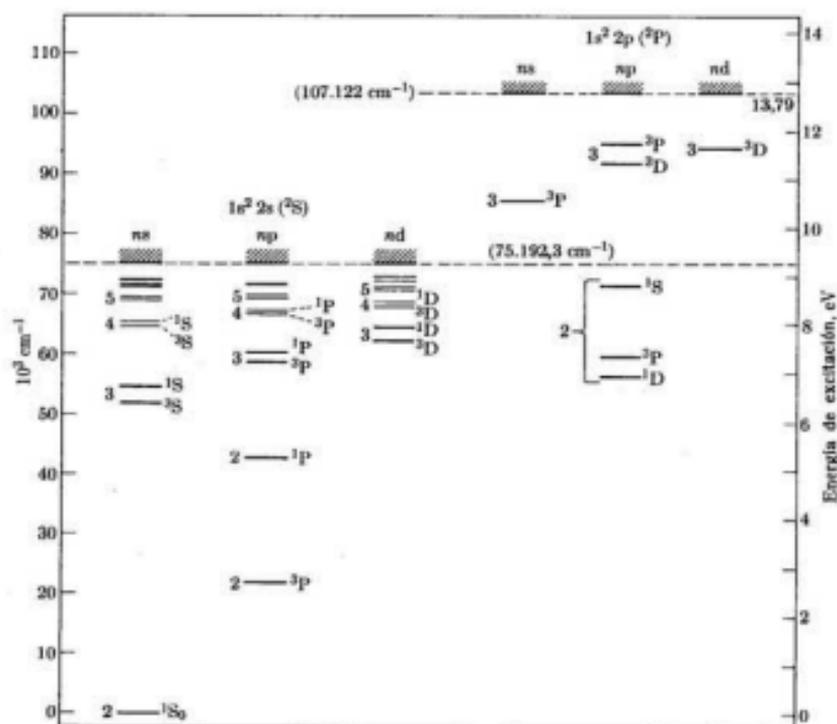


Fig. 4-19. Niveles de energía del átomo de berilio.

que las órbitas son menos penetrantes y el campo coulombiano efectivo corresponde a $Z = 1$. Sin embargo, las órbitas más penetrantes tienen niveles de energía que se apartan bastante de los del hidrógeno.

Las transiciones posibles del electrón de valencia están reguladas por las reglas de selección (3.17), resultando las siguientes series espectrales:

Serie definida: $ns \rightarrow n'p$,

Serie principal: $np \rightarrow n's$,

Serie difusa: $nd \rightarrow n'p$,

Serie de Bergmann: $nf \rightarrow n'd$,

y así sucesivamente. Debido a las interacciones espín-orbita, todos los niveles de energía mostrados en la fig. 4-16 (excepto los niveles s) son dobletes, con una separación proporcional a $S \cdot L$. Así, por ejemplo, los niveles de energía reales

del sodio, en los cuales únicamente los electrones de valencia están excitados, son como se ilustra en la fig. 4-17.

En el caso de átomos con dos electrones de valencia, la situación es muy similar a la del átomo de helio. El espín resultante de dos electrones puede ser 0 ó 1, y los niveles de energía están en dos grupos, singletes ($S = 0$) y tripletes ($S = 1$). Los singletes corresponden a los dos electrones de valencia con sus espines anti-paralelos, y los tripletes a los dos electrones de valencia con sus espines paralelos. Este es el caso de átomos tales como el berilio, el magnesio, el calcio, etc. La fig. 4-18 muestra los niveles de energía del átomo de calcio, los cuales corresponden al caso en el cual únicamente un electrón de valencia está excitado. Como en el estado fundamental del calcio los electrones de valencia tienen la configuración $4s^2$, los estados excitados corresponden a $4s n\ell$, con $n = 4, 5, 6, \dots$. Los valores $n\ell$ del electrón excitado están indicados en la parte superior de la figura. También se indica algunas de las transiciones posibles. Estas deben ajustarse a las reglas de selección (3.17). Las líneas de trazos representan transiciones de un estado triplete a uno singlete; éstas violan las reglas de selección $\Delta S = 0$, y son por lo tanto muy débiles.

Desde luego, existe la posibilidad de excitar ambos electrones de valencia y esto da lugar a nuevos niveles de energía, como se ilustra en la fig. 4-19 para el berilio, que tiene la configuración $1s^2 2s^2$ para el estado fundamental. Las tres primeras columnas corresponden a la excitación de un solo electrón de valencia, como en la fig. 4-18 para el calcio, y las configuraciones son $1s^2 2s n\ell$. Las tres columnas restantes corresponden al caso en el cual un electrón de valencia se ha excitado hasta el estado $2p$ y el otro hasta el $n\ell$, de modo que las configuraciones son $1s^2 2p n\ell$. Desde luego, existen muchos más estados excitados.

Este análisis de átomos con uno y dos electrones de valencia será suficiente para demostrar las muchas complejidades involucradas en el estudio de la estructura atómica.

4.7 *Espectros de rayos X*

Hasta ahora hemos considerado excitaciones de los electrones de valencia únicamente, las cuales dan por resultado lo que comúnmente se denomina *espectro óptico*. Pero también es posible excitar a los electrones de las capas completas. Estas excitaciones son responsables de los rayos X característicos emitidos o absorbidos por los átomos.

La fig. 1-14 da la distribución de intensidad en función de la longitud de onda de la radiación de frenado (Bremsstrahlung) proveniente de un anticátodo de molibdeno en un tubo de rayos X, para varios voltajes aplicados. Cuando el voltaje crece se observan ciertos picos muy agudos de intensidad de rayos X, que corresponden a longitudes de onda bien definidas. En la fig. 1-14 los primeros picos aparecen cuando el voltaje aplicado es de 25 kV. (El voltaje de excitación real es de 20,1 kV). Estos picos se llaman *rayos X característicos*. Las longitudes de onda de los picos son independientes de los voltajes aplicados, pero dependen del material del cátodo.

Los rayos X característicos se explican de un modo simple. La energía de los electrones que llegan al blanco en el tubo de rayos X puede ser suficiente para sacar uno de los electrones de las capas internas. Supongamos que el electrón sacado sea de la capa K . Cuando un electrón de la capa K sale deja un estado vacío o hueco en ella. Otro electrón de las capas internas en un nivel de energía superior (o quizás un electrón de valencia, o un electrón libre) puede caer en el estado vacante de la capa K . Como la energía involucrada es una cantidad bastante grande, la radiación emitida por el electrón en su caída al estado vacante yace en la región del espectro de rayos X. El electrón que ocupa la vacante de la capa K puede provenir de las capas L , M , N , etc., y por lo tanto tenemos una serie de líneas de rayos X designadas por K_{α} , K_{β} , K_{γ} , etc. Si el estado vacante está en la capa L , los electrones pueden caer desde las capas M , N , etc. dando lugar a las líneas L_{α} , L_{β} , etc., de rayos X y así sucesivamente. Las transiciones de los rayos X en un átomo con $Z \sim 36$ están ilustradas esquemáticamente en la fig. 4-20. Obsérvese que la emisión de rayos X es posible sólo si se produce una vacante en una capa interna, ya que el principio de exclusión prohíbe una transición desde un nivel de mayor energía a uno de menor energía completamente ocupado. El espacio vacante en una capa interna se puede producir también por absorción de radiación, con lo cual resulta un efecto fotoeléctrico para los electrones de las capas K , L , M , etc.

Las transiciones de rayos X son realmente más complejas de lo que se pudiera imaginar al observar la fig. 4-20, debido a que la energía liberada depende de los

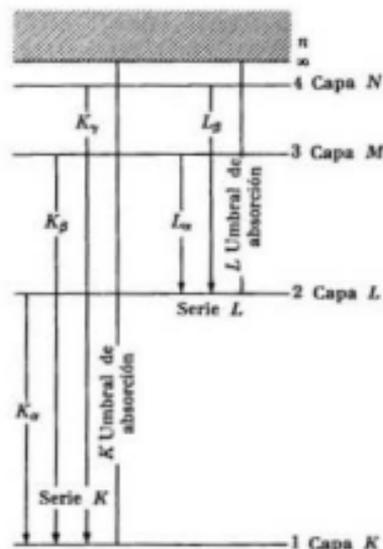


Fig. 4-20. Transiciones de rayos X en un átomo de número atómico $Z \sim 36$.

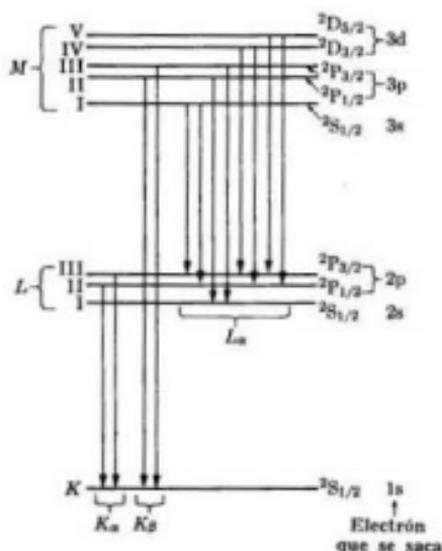


Fig. 4-21. Estructura fina de transiciones de rayos X.

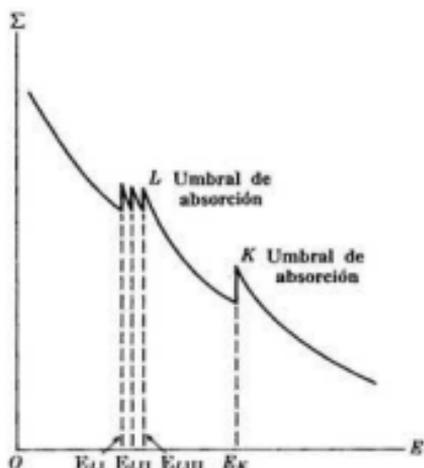
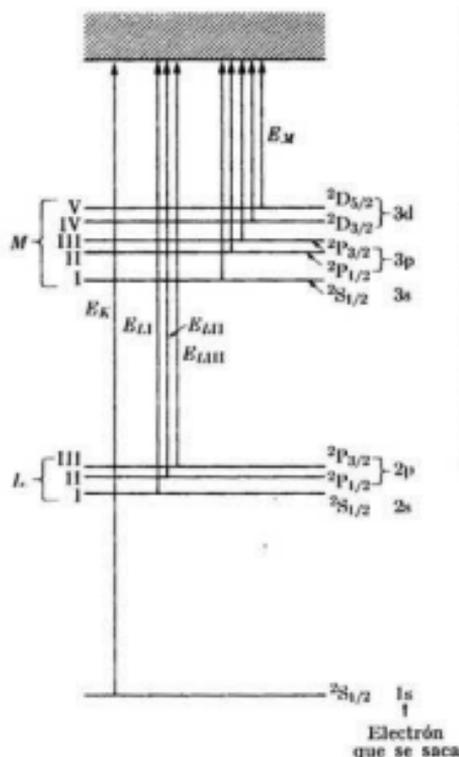


Fig. 4-23. Variación del coeficiente de absorción lineal para los rayos X y γ en función de la energía del fotón.

Fig. 4-22. Transiciones resultantes de la absorción de rayos X; esta absorción está acompañada por emisión electrónica.

estados inicial y final. Por ejemplo, cuando se saca un electrón $1s$ de la capa K , la energía del ion que se produce es única. Pero si el electrón proviene de una capa completa L , puede ser un electrón $2s$ ó $2p$. En el primer caso la configuración de los electrones que quedan en la capa es $2s\ 2p^5$, que corresponde al estado $^2S_{1/2}$, pero en el segundo caso, la configuración de los electrones que quedan en la capa es $2s^2\ 2p^5$, que corresponde a los estados $^2P_{1/2}$ ó $^2P_{3/2}$. Por consiguiente, hay tres posibles estados de la capa L con un electrón menos, cada uno con una energía diferente. Para la capa M con un electrón menos hay cinco estados posibles, y así sucesivamente. La fig. 4-21 muestra estos estados y algunas de las transiciones de rayos X resultantes. De este modo las líneas K_{α} y K_{β} son dobletes, la línea L está compuesta de ocho líneas muy juntas, y así sucesivamente.

Esta estructura fina de los niveles de energía también se refleja en el coeficiente de absorción lineal para el efecto fotoeléctrico. En la fig. 4-22 podemos ver que se necesita una cantidad precisa de energía mínima E_K para ionizar un átomo por extracción de un electrón K . Pero si se quita un electrón L , puede haber tres valores posibles para la energía de ionización E_{LI} , E_{LII} , E_{LIII} , dependiendo del estado en que se dejó la capa. Análogamente, hay cinco valores para

la energía de ionización si el electrón procede de la capa M , y así sucesivamente. Esto significa que cuando una radiación electromagnética incide sobre un material, el coeficiente de absorción lineal o sección eficaz macroscópica Σ para el efecto fotoeléctrico (sección 1.9) varía en función de la energía de la radiación, como se muestra en la fig. 4-23. En general, Σ tiende a disminuir cuando la energía del fotón aumenta o la longitud de onda disminuye. Cuando la energía del fotón cae por encima del valor mínimo necesario para extraer un electrón L , ocurre un rápido aumento en el valor de Σ , ya que ahora hay más electrones con los cuales los fotones pueden interactuar; sólo en este caso hay tres picos muy juntos unos de otros, que corresponden a $E_{L\text{I}}$, $E_{L\text{II}}$ y $E_{L\text{III}}$, respectivamente. Cuando la energía del fotón cae por encima del valor E_K aparece otro aumento violento en el valor de Σ porque los fotones tienen suficiente energía para sacar un electrón K . Estos cambios rápidos en Σ se llaman *umbrales de absorción*. La arista K de absorción para el plomo también está representada en la fig. 1-19. Obsérvese que, en general, las energías (o longitudes de onda) involucradas en la emisión y absorción de rayos X no son exactamente las mismas porque los respectivos niveles de energía son diferentes. Tanto la emisión como la absorción de rayos X son instrumentos muy útiles para recabar información acerca de las capas internas de un átomo.

En algunos casos el fotón emitido en una transición de rayos X es absorbido por otro electrón del mismo átomo; este electrón es emitido como consecuencia de un efecto fotoeléctrico interno. Este proceso de conversión interna de rayos X en fotoelectrones se denomina *efecto Auger*.

Bibliografía

1. "Spectra Inform Us About Atoms", W. Meggers, *The Physics Teacher* **2**, 303 (1964)
2. "Basic Concepts of Self-Consistent Field Theory", S. Blinder, *Am. J. Phys.* **33**, 431 (1965)
3. "Terms Obtained from Configurations of Equivalent Electrons", E. Tuttle, *Am. J. Phys.* **35**, 26 (1967)
4. "Physical Basis for Hund's Rule", N. Karayianis, *Am. J. Phys.* **32**, 216 (1964) y **33**, 201 (1965)
5. "H. G. J. Moseley", L. Redman, *The Physics Teacher* **3**, 151 (1965)
6. "The Scientific Career of Charles Barkla", R. Stephenson, *Am. J. Phys.* **35**, 140 (1967)
7. *Atomic Spectra and Atomic Structure*, G. Herzberg. Dover, New York, 1955, caps. 1 y 2
8. *Atomic Spectra*, R. Johnson. John Wiley, New York, 1950
9. *The Behavior of Electrons in Atoms*, R. Hochstrasser. Benjamin, New York, 1965.
10. *Elements of Wave Mechanics*, N. Mott. Cambridge University Press, Cambridge, 1962, cap. 5, secs. 2.2, 2.3, 4.5 y 4.6
11. *Structure of Matter*, W. Finkelburg. Academic Press, New York, 1964, cap. 3, secs. 8 y 11-17

12. *Quantum Theory of Matter*, J. Slater. McGraw-Hill, New York, 1951, caps. 6 y 7
13. *A Source Book in Physics*, W. Magie. Harvard University Press, Cambridge, Mass., 1963, pág. 600 (Roentgen)
14. *Atomic Spectra*, W. Hindmarsh. Pergamon Press, New York, 1967.
15. *Principles of Modern Physics*, R. Leighton. McGraw-Hill, New York, 1959, caps. 7 y 8

Problemas

4.1 Cuando uno de los electrones de los átomos semejantes al átomo de helio está en el estado fundamental ($n = 1$) y el otro en un estado excitado ($n > 1$), se podría expresar los niveles de energía por medio de

$$E = -RhcZ^2 - \frac{Rhc(Z-1)^2}{n^2}$$

En la cual se supone que el electrón en el estado fundamental blindará completamente una carga nuclear. Discutir la verosimilitud de esta expresión. Calcular los niveles de energía para el helio cuando $n = 2, 3, 4$ y comparar con el resultado experimental. ¿Por qué aumenta la precisión de la expresión anterior de E cuando n aumenta?

4.2 Escribir en forma de determinante las tres funciones de onda $\psi_{S\chi_A}$ de la ec. (4.10). Observar que la función de onda para $M_S = 0$ consta de dos determinantes.

4.3 El estado fundamental del litio tiene la configuración electrónica $1s^2 2s$. Escribir en forma de determinante la función de onda de ese estado cuando $M_S = \frac{1}{2}$.

4.4 Escribir en forma de determinante las funciones de onda para la configuración p^3 (ver la tabla 4-2) correspondientes a $M_L = 2, M_S = 0$ y $M_L = 1, M_S = 1$.

4.5 Considerar un sistema de tres electrones en la configuración sp^3 en la aproximación de electrones independientes. Escribir la función de onda total en forma de determinante de modo que la función de onda corresponda a $M_L = 1$ y $M_S = \frac{1}{2}$.

4.6 Dada la configuración electrónica de un átomo: $4s 4p 3d$, escribir todas

las posibles funciones de onda que corresponden a $M_L = 1$ y $M_S = \frac{1}{2}$. Usar la forma de determinante.

4.7 Encontrar la configuración del estado fundamental de los siguientes átomos: (a) Si; (b) Mn; (c) Rb; (d) Ni. Escribir también sus respectivos términos del estado fundamental.

4.8 Determinar la configuración del estado fundamental y el número de electrones no apareados de los siguientes átomos: (a) S, (b) Ca, (c) Fe, (d) Br.

4.9 (a) Sobre un diagrama similar al de la fig. 4-7, mostrar los estados ocupados en el caso de los átomos de Si, Cl y As cuando están en la respectiva configuración de estado fundamental. (b) Escribir la configuración electrónica y los términos del estado fundamental de cada uno.

4.10 Calcular el ángulo entre el momento angular total y el orbital para el estado $^4D_{3/2}$.

4.11 Hallar los términos de las siguientes configuraciones e indicar en cada caso cuál término tiene la mínima energía (a) ns , (b) np^3 , (c) $(np)^2 (n's)$, (d) np^3 , (e) $(nd)^2 (n'p)$, (f) $(nd) (n'd)$.

4.12 Hacer una lista de las posibles transiciones radiativas para el oxígeno (ver fig. 4-12) cuando la configuración excitada es $2s^3 2p^3 (^4D) 3d (^6G)$.

4.13 Mirar las figuras 4-11 y 4-12. Dibujar algunas de las transiciones posibles compatibles con las reglas de selección. Determinar los números de onda de estas transiciones y comparar con los valores experimentales, que se pueden encontrar en el *Handbook of Chemistry and Physics*.

4.14 Calcular los términos para la configuración np^2 .

4.15 Dar los valores de S , L y J para los términos ${}^3S_{1/2}$, ${}^3S_{3/2}$, 1P_1 , 3P_0 , 3P_1 , 3P_2 , 1F_3 , 3D_1 , 1D_2 y 3F_4 .

4.16 Hallar los términos correspondientes a la configuración nd^2 . Utilizar el resultado para determinar el estado fundamental y el primero excitado del titanio.

4.17 Probar que una capa nl completa debe tener necesariamente $L = S = 0$.

4.18 Dos electrones p equivalentes tienen acoplamiento espín-órbita fuerte. Hallar los posibles valores del momento angular resultante J si el problema se considera como un acoplamiento $l-l$. Repetir el problema considerando un acoplamiento $L-S$. ¿Aparece igual valor de J el mismo número de veces en cada caso?

4.19 En el acoplamiento $L-S$, se puede obtener el momento magnético de un átomo en la forma $\vec{M} = - (e/2mc)g\vec{J}$, donde \vec{J} se refiere al momento angular total del átomo y g está dado por la ec. (3.40), con l , s y j reemplazados por L , S y J . Hallar g para el calcio y el aluminio. Discutir el desdoblamiento de un término $3p$ bajo la acción de un campo magnético débil. Hallar el desdoblamiento cuando el campo magnético es fuerte.

4.20 Estudiar el efecto Zeeman bajo la acción de campos magnéticos débiles y fuertes para las transiciones ${}^3F \rightarrow {}^3D$ y ${}^1F \rightarrow {}^1D$ en el calcio.

4.21 La transición $4 {}^1D_2 \rightarrow 4 {}^1P_1$ en el calcio produce una sola línea a 6439 Å. ¿Qué longitud de onda se observará si se coloca calcio en un campo magnético de 1,40 T?

4.22 La separación relativa entre los diferentes niveles de un multiplete $L S J$ debido a la interacción espín-órbita se puede considerar como proporcional a $S \cdot L$. Aplicar la relación a los multipletes 3F y 3D . Dibujar los niveles de energía de cada multiplete e indicar con flechas las transiciones ${}^3F \rightarrow {}^3D$ permitidas.

4.23 Repetir el problema precedente para el caso de las transiciones ${}^4D \rightarrow {}^4P$ y ${}^4P \rightarrow {}^4S$.

4.24 Usando los valores dados en la figura 4-17, calcular la separación de las líneas D del sodio. A partir de este resultado, estimar la constante a en $E_{SL} = aS \cdot L$ para los estados $3 {}^4P$.

4.25 Analizar la transición $3 {}^1D \rightarrow 3 {}^3P$ en el sodio. Determinar la separación en longitud de onda, si la hay, para esta transición.

4.26 Calcular la energía en electron-volts, de los fotones "rojo" (6500 Å) y "azul" (4000 Å). Usando la escala de energía de la fig. 4-18, determinar cuáles de las transiciones singletes y tripletes para el calcio están en la región visible del espectro. Comparar estos valores burdamente estimados con una tabla de longitudes de onda.

4.27 Una expresión adecuada para calcular los niveles de energía del electrón de valencia en los átomos con un electrón de valencia es

$$E_n = -Rhc(Z - \delta)^2 / (n - \delta)^2,$$

donde δ es la constante de pantalla y δ es el defecto cuántico (que depende de los valores de n y l del electrón de valencia de que se trate). Los valores de δ para el litio y el sodio son:

	s	p	d
Li ($Z = 3$)	0,40	0,04	0,00
Na ($Z = 11$)	1,37	0,88	0,01

Para δ se toma un valor igual al número de electrones en las capas internas. Hallar la energía del estado fundamental y de los dos primeros estados excitados del electrón de valencia en el litio y el sodio. [Sugerencia: ver la fig. 4-16].

4.28 La transición desde el nivel $3p$ al $3s$ del sodio da por resultado una línea con una longitud de onda de 5890 Å. (Ignoramos la estructura doblete.) Usando los valores de los niveles de energía dados por la expresión del problema 4.27, calcular la longitud de onda de dicha línea y comparar con el valor experimental. Repetir para la transición $2p \rightarrow 2s$ en el litio.

4.29 A partir de la información contenida en la fig. 4-14, estimar la energía de los umbrales de absorción K y L para el aluminio y el oxígeno. Hacer el

gráfico de la curva de absorción de los rayos X para estas dos sustancias en aquella región.

4.30 Se han medido las siguientes líneas K :

magnesio: 9,87 Å	azufre: 5,36 Å
calcio: 3,35 Å	cromo: 2,29 Å
cobalto: 1,79 Å	cobre: 1,54 Å
rubidio: 0,93 Å	tungsteno: 0,21 Å

Hacer el gráfico de la raíz cuadrada de la frecuencia K_{α} en función del número atómico del elemento. H. G. Moseley, joven alumno graduado de Ernest Rutherford, encontró, en 1912, una relación empírica de la forma $\sqrt{\nu} = A(Z - c)$. (Esta relación permitió aclarar el concepto de número atómico.) Verificar, utilizando su gráfico, esta relación y estimar los valores de A y c . Desarrollar una explicación para la relación de Moseley.

4.31 Calcular las longitudes de onda y energías para las líneas K_{α} de rayos X del aluminio, potasio, hierro, níquel, zinc, molibdeno y plata. Comparar los valores de la energía con los mostrados

en la fig. 4-14. Usar la relación de Moseley del problema anterior.

4.32 La línea K_{α} del cobalto es de 1,785 Å. ¿Cuál es la diferencia de energía entre los orbitales $1s$ y $2p$ en el cobalto? Comparar con la diferencia de energía para los orbitales $1s$ y $2p$ del hidrógeno (esto es, la primera línea Lyman). ¿Por qué la diferencia es mayor para el cobalto que para el hidrógeno?

4.33 (a) El umbral de absorción K para el tungsteno es 0,178 Å y las longitudes de onda medias de las líneas de la serie K son $K_{\alpha} = 0,210$ Å, $K_{\beta} = 0,184$ Å y $K_{\gamma} = 0,179$ Å. Construir el diagrama de niveles de energía de rayos X para el tungsteno, similar al que aparece en la fig. 4-20. (b) ¿Qué energía mínima se necesita para excitar la serie L del tungsteno? Determinar la longitud de onda de la línea L_{α} .

4.34 El umbral de absorción L_{I} en el tungsteno es 1,02 Å. Suponer que un fotón K_{α} es absorbido por uno de los electrones $2s$ en un proceso Auger. Determinar la velocidad del fotoelectrón emitido.

MOLECULAS

- 5.1 *Introducción*
- 5.2 *Molécula de hidrógeno ionizada*
- 5.3 *Orbitales moleculares de moléculas diatómicas*
- 5.4 *Configuración electrónica de algunas moléculas diatómicas*
 - 5.5 *Moléculas poliatómicas*
 - 5.6 *Moléculas conjugadas*
 - 5.7 *Rotaciones moleculares*
 - 5.8 *Vibraciones moleculares*
- 5.9 *Transiciones electrónicas en moléculas*
 - 5.10 *Conclusión*

5.1 Introducción

La estructura de las moléculas es un problema importante relacionado con la estructura de la materia. ¿Por qué los átomos de carbono se combinan con cuatro átomos de hidrógeno para formar el metano, pero nunca con tres o cinco átomos de hidrógeno? ¿Por qué la molécula de CO_2 es lineal mientras que la de H_2O es en ángulo y la de NH_3 es una pirámide? ¿Por qué el benceno (C_6H_6) tiene la forma de un hexágono con todos los átomos de hidrógeno en su plano? ¿Cómo pueden los átomos de hidrógeno unirse para formar la molécula H_2 pero nunca forman H_3 ? ¿Por qué son tan complejos los espectros moleculares en comparación con los atómicos, yendo desde las microondas hasta el ultravioleta? Hasta que se desarrolló la teoría cuántica no se podía contestar satisfactoriamente éstas y muchas otras preguntas. Uno de los éxitos más espectaculares de la teoría cuántica es su respuesta a muchas de las preguntas que los físicos y los químicos se han estado haciendo acerca de la estructura molecular. Sin embargo, no podemos decir que nuestra descripción de la estructura molecular sea un capítulo cerrado de la física.

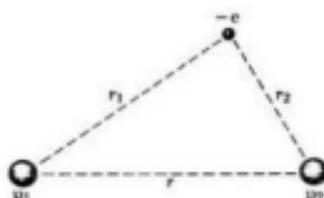
Comencemos nuestro estudio de las moléculas preguntándonos: ¿Qué es una molécula? El primer impulso es decir que una molécula es un grupo de átomos ligados mediante algún tipo de interacción. Pero esto da origen inmediatamente a nuevas preguntas: ¿Conservan los átomos su individualidad? ¿Cómo se afecta el movimiento electrónico al formarse una molécula? ¿Qué tipo de interacción da lugar a una molécula? Podemos adoptar también un punto de vista opuesto diciendo que una molécula es un grupo de núcleos rodeados de electrones en forma tal que se produce una disposición estable. Esto es la extensión natural del concepto de átomo, que es un núcleo rodeado de electrones. Luego, en vez de considerar la molécula de H_2 como dos átomos de hidrógeno, la podemos considerar como dos protones y dos electrones dispuestos conforme a las leyes de la mecánica cuántica y mantenidos juntos por fuerzas electromagnéticas. Desde un punto de vista estructural, esta segunda hipótesis es más fundamental que la primera.

Sin embargo, como ocurre en muchos casos, lo más conveniente es una posición intermedia. Cuando dos átomos se combinan para formar una molécula, los electrones más fuertemente ligados de cada átomo, o interiores (que llenan completamente las capas de sus respectivos carozos), prácticamente no son afectados, permaneciendo unidos a sus núcleos originales. Sólo son afectados los electrones exteriores o de valencia que se encuentran en las capas sin llenar, los cuales se mueven bajo la acción de las fuerzas resultantes debidas a los iones, compuestos de los núcleos y carozos, y a sus repulsiones mutuas. Los electrones de valencia son los responsables de la unión química y de la mayoría de las propiedades físicas de las moléculas. Esta posición intermedia es el modelo que adoptaremos en el presente capítulo, ya que constituye una aproximación excelente para analizar la estructura molecular.

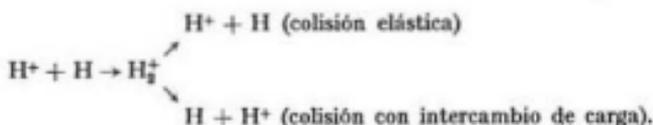
5.2 Molécula de hidrógeno ionizada

La más simple de todas las moléculas es el ion H_2^+ , o molécula de hidrógeno ionizada, el cual está formado por dos protones y un electrón. Los químicos escriben la constitución de esta molécula en la forma $H + H^+ \rightarrow H_2^+$, donde H^+ es simplemente un protón. En otras palabras: la molécula H_2^+ se forma cuando un átomo de hidrógeno captura un protón. Pero una vez formada la molécula H_2^+ ya no es posible decir cuál es el átomo de hidrógeno y cuál el protón. Nuestra imagen de dicha molécula es la mostrada en la fig. 5-1: un electrón moviéndose en el campo eléctrico de dos protones que están a una distancia r .

Fig. 5-1. El ion H_2^+ de la molécula de hidrógeno.



Podríamos decir que el electrón no recuerda a qué protón pertenecía inicialmente. Las colisiones con intercambio de carga revelan claramente esta falta de memoria. Supongamos que el electrón está asociado inicialmente con el protón p_1 y que el protón p_2 se aproxima por la derecha al átomo de hidrógeno viniendo de una gran distancia (fig. 5-2). En la región de máxima aproximación la molécula H_2^+ dura sólo un tiempo corto y luego se rompe. Cuando esto ocurre hay una cierta probabilidad de que el protón incidente se lleve consigo el electrón. Podemos entonces escribir el proceso en la forma



Es posible calcular la probabilidad relativa de estos dos procesos en función de la energía del protón incidente. El resultado está de acuerdo con la evidencia experimental.

Para discutir los estados estacionarios de la molécula H_2^+ , supongamos primero que los dos protones están en reposo relativo y establezcamos la ecuación de Schrödinger con la energía potencial

$$E_p = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r} \right). \quad (5.1)$$

Los dos primeros términos del paréntesis dan la energía potencial de atracción entre el electrón y los dos protones, y el tercero es la energía potencial de repul-

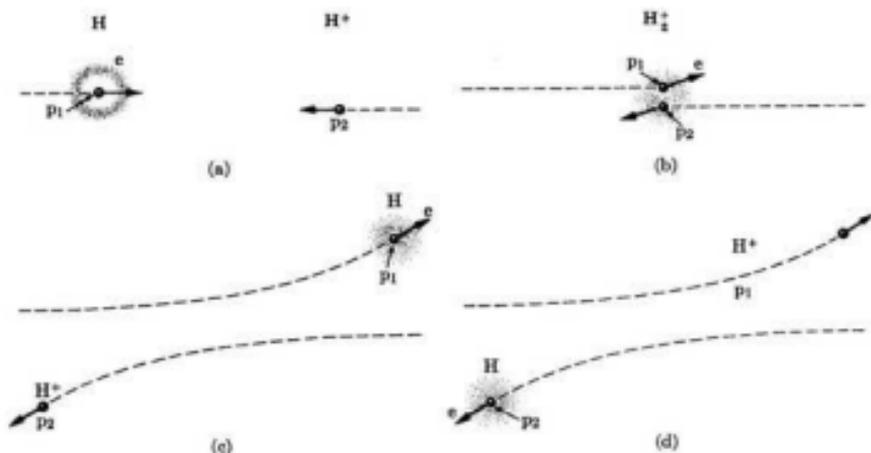


Fig. 5-2. Colisión de un átomo de hidrógeno (H) con un protón (H^+) vista en el sistema de referencia CM. (c) Colisión elástica. (d) Colisión con intercambio de carga.

sión entre los dos protones. En la fig. 5-3 se muestra la variación de la energía potencial electrónica a lo largo de la línea que une los dos protones. Se parece al pozo doble de potencial considerado en la sección 2.8 en conexión con la molécula de NH_2 .

En el ejemplo 5.2 se bosquejará la solución, bastante compleja, de la ecuación de Schrödinger para H_2^+ . Por el momento seguiremos un razonamiento más intuitivo. Consideraremos primero la situación en que el electrón está inicialmente dando vueltas alrededor del protón p_1 , formando un átomo de hidrógeno en su estado fundamental $1s$, y el protón p_2 (o H^+) está muy lejos a la derecha. Prácticamente, el protón p_2 no perturba la función de onda del electrón, que coincide entonces con la función $1s$ del hidrógeno dibujada en la fig. 3-9. Por lo tanto, dibujando la función de onda del electrón a lo largo de la línea que une los dos protones en función de la distancia a p_1 , obtenemos la curva de la fig. 5-4(a), que muestra que el electrón se encuentra predominantemente alrededor del protón p_1 . Supongamos ahora que inicialmente el electrón está rotando alrededor del protón p_2 formando un átomo de hidrógeno en el estado $1s$ y que el protón p_1 está muy lejos a la izquierda. Entonces la función de onda del electrón es como se muestra en la fig. 5-4(b).

A medida que disminuye la separación entre los dos protones, se perturba la función de onda del electrón porque el protón que se aproxima (p_2 en la fig. 5-4a y p_1 en la fig. 5-4b) trata de arrancar el electrón del otro protón. La simetría de la energía potencial del electrón, mostrada en la fig. 5-3, sugiere que la distribución de probabilidad del electrón debe tener la misma simetría. Así, una vez formada la molécula H_2^+ , la función de onda del electrón debe tener máximos

pronunciados alrededor de cada protón, donde la energía potencial es menor según la fig. 5-3. En la fig. 5-4(c) y (d) se muestra las dos funciones de onda posibles para H_2^+ que tienen la simetría necesaria en su distribución de probabilidad. La función de onda es par en (c) e impar en (d) respecto al centro O de la molécula. Estas funciones de onda serán designadas ψ_{par} y ψ_{impar} , respectivamente.

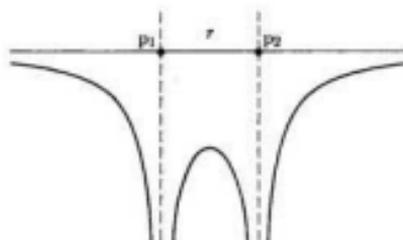


Fig. 5-3. Energía potencial a lo largo de la línea que une los dos núcleos en H_2^+ y H_2 .

Podemos expresar cualquiera de ellas en forma aproximada combinando linealmente las funciones de onda del hidrógeno (u orbitales atómicos) ψ_1 y ψ_2 correspondientes a un electrón girando alrededor del protón 1 y alrededor del protón 2:

$$\psi_{par} \approx \psi_1 + \psi_2, \quad \psi_{impar} \approx \psi_1 - \psi_2. \quad (5.2)$$

Estas funciones de onda se denominan orbitales moleculares y se abrevian OM. La teoría que estamos desarrollando para escribir los orbitales moleculares se denomina combinación lineal de orbitales atómicos, y se abrevia CLOA.

Los estados correspondientes a los orbitales moleculares ψ_{par} y ψ_{impar} de la fig. 5-4 se designan $\sigma_p 1s$ y $\sigma_u 1s$ por razones que daremos más adelante. Estos

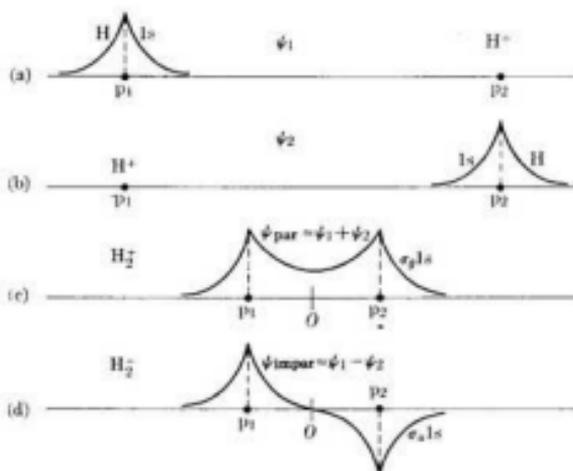


Fig. 5-4. Orbitales moleculares par e impar en el H_2^+ .

estados deben tener energías diferentes, como se desprende de las consideraciones que siguen. Ambas funciones de onda dan probabilidad máxima de encontrar el electrón cerca de cualquiera de los dos protones, pero ψ_{par} tiene un valor apreciable entre los dos protones mientras que ψ_{impar} es muy pequeña (o nula) en esa región, como se ve en la fig. 5-5. La fig. 5-5(a) ilustra la variación de la densidad de probabilidad del electrón a lo largo de la línea que une los dos protones; la fig. 5-5(b) muestra las líneas de igual probabilidad sobre un plano que pasa por los dos protones, y en la fig. 5-5(c) el sombreado indica la probabilidad relativa de encontrar el electrón en diferentes lugares.

Cuando el electrón está entre los dos protones, tiende a juntarlos compensando su repulsión eléctrica. Cuando el electrón está a uno de los lados ayuda a separar los dos protones. En otras palabras: cuando el electrón está entre los dos protones, actúa como un "cemento" que los une dando lugar a una configuración estable. En términos de energía podemos decir que el estado $\sigma_g 1s$ correspondiente

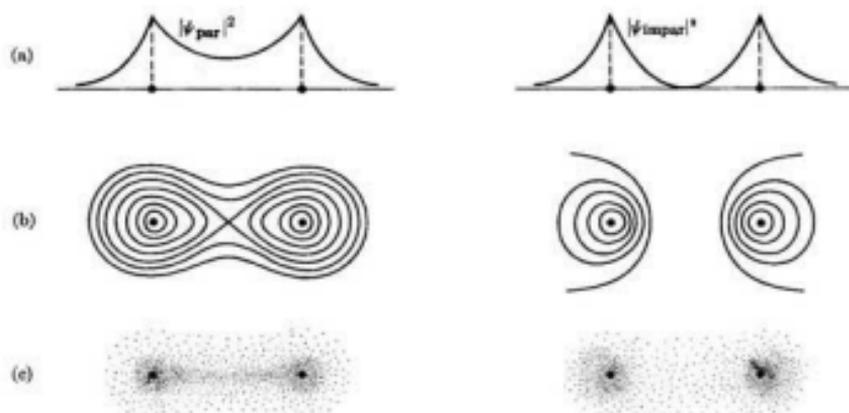


Fig. 5-5. Densidad de probabilidad correspondiente a los orbitales moleculares par e impar en el H_2^+ . (a) Distribución a lo largo de la línea que une los protones; (b) y (c) distribución en un plano que contiene los dos protones.

a ψ_{par} tiene una energía más baja que $\sigma_u 1s$ correspondiente a ψ_{impar} . Obsérvese la similitud entre nuestra discusión de las funciones de onda de H_2^+ y la del doble pozo de potencial hecha en el ejemplo 2.7.

La diferencia de energía entre los estados $\sigma_g 1s$ y $\sigma_u 1s$ depende de la separación de los dos protones. Supongamos que se comienza con un átomo de hidrógeno y un protón H^+ muy lejos uno de otro. A medida que disminuye la distancia entre ellos, obtenemos dos energías diferentes para cada distancia: una correspondiente al estado $\sigma_g 1s$ con función de onda ψ_{par} y otra al estado $\sigma_u 1s$ con función de onda ψ_{impar} . Como la energía potencial negativa de atracción del electrón domina la energía potencial positiva de repulsión de los protones en el estado

$\sigma_g 1s$, la energía total disminuye al disminuir r . Lo contrario ocurre para $\sigma_u 1s$ y la energía aumenta al disminuir r . Sin embargo, para distancias menores que cierto valor r_0 los protones están tan cerca que aún en el estado $\sigma_g 1s$ su energía potencial de repulsión comienza a predominar sobre la energía potencial del electrón. Luego, para distancias menores que r_0 la energía correspondiente a ψ_{par} aumenta al disminuir r . La fig. 5-6 muestra las dos curvas de energía resultantes.

Vemos inmediatamente que la curva de energía para $\sigma_g 1s$ o ψ_{par} tiene un mínimo en r_0 que corresponde a la separación de equilibrio de los dos protones y

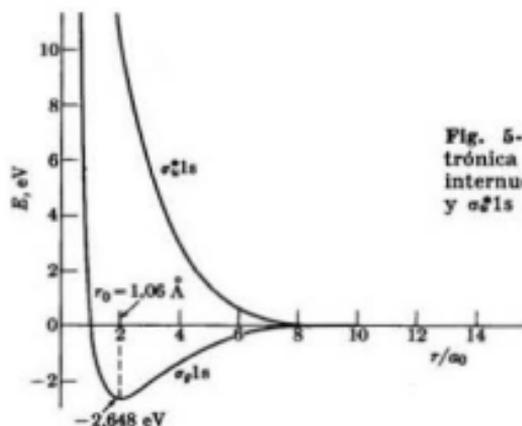


Fig. 5-6. Energía potencial electrónica en función de la distancia internuclear para los estados $\sigma_g 1s$ y $\sigma_u 1s$ del H_2^+ .

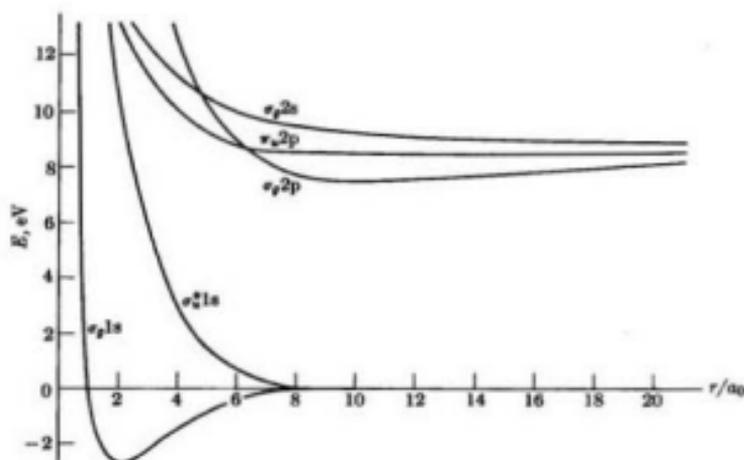


Fig. 5-7. Energías potenciales electrónicas para el estado fundamental y algunos estados excitados del H_2^+ .

que hace posible una configuración estable para H_2^+ . En cambio, la curva para $\sigma_{\text{p}}1s$ o ψ_{impar} no tiene un mínimo por lo que no da lugar a una configuración estable (o molécula). Podemos decir entonces que ψ_{par} es una *función de onda ligante* mientras que ψ_{impar} es una *función de onda antiligante*. Los estados y funciones de onda antiligantes se designan con un asterisco por lo que escribiremos σ_{p}^*1s . La separación de equilibrio de los protones del H_2^+ en el estado ligante $\sigma_{\text{p}}1s$ es $1,06 \times 10^{-10}$ m y la energía de este estado en el mínimo es $-2,648$ eV respecto al sistema H (estado fundamental) + H^+ a distancia infinita. Para la misma separación, la energía del estado antiligante σ_{p}^*1s es $10,2$ eV respecto al mismo estado de referencia.

Los estados de la molécula H_2^+ que hemos discutido corresponden al caso en que el átomo de hidrógeno estaba inicialmente en su estado fundamental. Hay empero otras curvas similares a las de la fig. 5-6 que corresponden a estados electrónicos excitados de la molécula y que están asociadas con un átomo de hidrógeno inicialmente en un estado excitado. La fig. 5-7 muestra algunas de las curvas de energía potencial posibles que corresponden a estados electrónicos excitados de H_2^+ . Más adelante explicaremos la designación de los estados.

EJEMPLO 5.1. Discusión de la colisión con intercambio de carga $H + H^+ \rightarrow H^+ + H$.

Solución: Supongamos que un haz de protones, o iones H^+ , rápidos, atraviesa hidrógeno gaseoso en estado atómico (para lo cual la temperatura debe ser por lo menos 2400 K y la presión 10 micrones de mercurio o menos). Se observa a un ángulo fijo los protones dispersados. En el proceso de dispersión algunos de los protones incidentes capturan el electrón de los átomos de hidrógeno. Se ha encontrado que la probabilidad de captura del electrón por los protones incidentes varía con la energía de éstos, presentando máximos pronunciados a ciertas energías. La fig. 5-8 muestra los datos obtenidos por Lockwood y Everhart; se ha representado la probabilidad de captura del electrón en función de la inversa de la velocidad del protón. Los

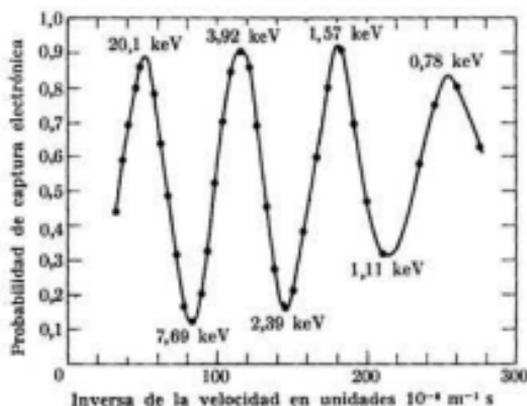


Fig. 5-8. Probabilidad de captura electrónica en colisiones con intercambio de carga, en función de la inversa de la velocidad del protón incidente.

máximos de probabilidad ocurren a las energías indicadas. Lo interesante es que los máximos están igualmente espaciados si se toma $1/v$ como abscisa.

La explicación cuántica es muy simple. Inicialmente, cuando el protón está muy lejos del átomo de hidrógeno, la función de onda del electrón es muy parecida a la función ψ_1 de la fig. 5-4, es decir

$$\psi(t=0) = \psi_1 \approx \frac{1}{2}(\psi_{\text{par}} + \psi_{\text{impar}}).$$

A medida que el protón se aproxima al átomo de hidrógeno, la función de onda comienza a depender del tiempo. De acuerdo con la ec. (2.29), se puede escribir la función de onda dependiente del tiempo en la forma

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \frac{1}{2}(\psi_{\text{par}}e^{-iEt/\hbar} + \psi_{\text{impar}}e^{-iE't/\hbar}) \\ &= \frac{1}{2}(\psi_{\text{par}} + \psi_{\text{impar}}e^{-i\Delta E t/\hbar})e^{-iEt/\hbar}, \end{aligned}$$

donde $\Delta E = E' - E$ es la diferencia de energía entre los estados σ_2^+1s y σ_2^-1s del sistema protón más átomo de hidrógeno. Al tiempo $t = \pi\hbar/\Delta E$ obtenemos

$$\psi(t = \pi\hbar/\Delta E) = \frac{1}{2}(\psi_{\text{par}} - \psi_{\text{impar}})e^{-iEt/\hbar} \approx \psi_2 e^{-iEt/\hbar}$$

y el electrón ha saltado el protón incidente, ya que el sistema corresponde a la función de onda ψ_2 . Al tiempo $t = 2\pi\hbar/\Delta E$ está de vuelta junto a su protón original. Podemos decir entonces que mientras el protón p_2 , que hace de proyectil, está pasando cerca del protón p_1 , que hace de blanco, el electrón salta de un protón a otro con período

$$P = 2\pi\hbar/\Delta E = \hbar/\Delta E.$$

Para que haya captura del electrón es necesario que cuando el protón incidente p_2 deje atrás al protón que hace de blanco, el electrón esté cerca de p_2 . Para las energías mostradas en la fig. 5-8, el protón proyectil p_2 debe pasar muy cerca (aproximadamente 10^{-12} m) del protón blanco p_1 . Podemos suponer que hay perturbación de la función de onda del electrón sólo mientras p_2 está dentro de un segmento de la trayectoria, de longitud a .

Si v es la velocidad del protón, el tiempo durante el cual tiene lugar la interacción es $\tau = a/v$. Supongamos que hay un máximo de probabilidad de captura para la velocidad v_1 . El tiempo de interacción es $\tau_1 = a/v_1$. El máximo siguiente de probabilidad de captura debe aparecer al tiempo

$$\tau_2 = \tau_1 + P,$$

de modo que el electrón tenga tiempo suficiente para realizar una oscilación completa más y esté de nuevo cerca del protón proyectil. Luego, $P = \tau_2 - \tau_1$ o sea

$$\frac{\hbar}{\Delta E} = a \left(\frac{1}{v_2} - \frac{1}{v_1} \right).$$

Por lo tanto, la diferencia $(1/v_2 - 1/v_1)$ entre máximos sucesivos debe tener un valor constante. Se ha encontrado experimentalmente que tiene un valor promedio de $6,6 \times 10^{-7} \text{ m}^{-1} \text{ s}$. Obtenemos entonces

$$a\Delta E \approx 10^{-47} \text{ m J} \approx 6,3 \times 10^{-8} \text{ m eV}.$$

La cantidad ΔE (o sea la diferencia de energía entre las curvas para σ_2^+1s y σ_2^-1s) no es fija, ya que depende de la separación de los protones (ver fig. 5-6). Análogamente, la cantidad a no está bien definida. Tomando para ΔE un promedio de 10 eV , lo cual es razonable teniendo en cuenta las curvas de la fig. 5-6, tenemos que $a \sim 6 \times 10^{-10} \text{ m}$, o sea alrededor de seis veces el diámetro molecular, el cual también es un valor razonable.

Un análisis más detallado requiere el cálculo teórico de la cantidad ΔE en vez de los valores estimados que hemos dado. El acuerdo con los resultados experimentales es bastante satisfactorio.

EJEMPLO 5.2. Cálculo de la energía del estado fundamental de H_2^+ utilizando las funciones de onda dadas por la ec. (5.2).

Solución: El operador hamiltoniano del electrón en movimiento más los dos protones supuestos en reposo es

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r} \right), \quad (5.3)$$

donde el primer término es el operador energía cinética del electrón, conforme a la tabla 2-4, y los tres últimos términos dan la energía potencial del ion como se indica en la ec. (5.1). Llamando ψ a cualquiera de las dos funciones de onda $\psi_{\text{par}} = \psi_1 + \psi_2$ y $\psi_{\text{impar}} = \psi_1 - \psi_2$, el valor medio de la energía del electrón en el H_2^+ es, según la ec. (2.51),

$$E = \frac{\int \psi^* H \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau}. \quad (5.4)$$

Supongamos para simplificar que las dos funciones de onda atómicas ψ_1 y ψ_2 corresponden al mismo estado atómico de energía E_a . Por ejemplo: en el estado fundamental de H_2^+ las dos son funciones de onda $1s$ hidrogenoides. Si ψ_1 y ψ_2 son reales (como en el caso de las funciones de onda $1s$), un cálculo simple usando la ec. (5-4) (el cual omitimos) nos permite hallar la siguiente expresión para el valor medio de la energía del electrón

$$E = E_a + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{A \pm B}{1 \pm S}, \quad (5.5)$$

donde el signo positivo corresponde a ψ_{par} y el negativo a ψ_{impar} . En esta ecuación $S = \int \psi_1 \psi_2 d\tau$ se denomina *integral de superposición* y su valor depende de la medida en que los orbitales atómicos ψ_1 y ψ_2 asociados con protones diferentes se superponen en el espacio, esto es, de la medida en que ψ_1 y ψ_2 tienen valores apreciables en la misma región del espacio. Evidentemente, S es función de la separación r entre los dos protones y aumenta al disminuir r . También:

$$A = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\psi_1^2}{r_2} d\tau = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\psi_2^2}{r_1} d\tau$$

y

$$B = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\psi_1 \psi_2}{r_1} d\tau = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\psi_1 \psi_2}{r_2} d\tau.$$

Las integrales A y B son funciones de la separación nuclear r . Representando E dada por la ec. (5.5) en función de r resultan curvas similares a las de la fig. 5-6. Obtenemos entonces dos estados de energía posibles, tal como se había predicho intuitivamente, correspondiendo ψ_{par} a la energía más baja.

En la ec. (5.5), el primer término da la energía del átomo formado por un protón y el electrón, y el segundo término da la energía de repulsión entre los dos protones. Además, A es la energía de atracción entre el electrón y el otro protón, y B y S son términos puramente cuánticos que no tienen análogo clásico. Obsérvese que B es apreciable solamente si ψ_1 y ψ_2 se superponen fuertemente. Si la superposición de ψ_1 y ψ_2 es depreciable, tanto B como S son muy pequeñas y la energía es $E = E_a + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - A$, que representada en función de r no presenta mínimo alguno. Por lo tanto, es la superposición, combinada con la simetría de la función de onda, la que da lugar a una molécula estable.

5.3 Orbitales moleculares de moléculas diatómicas

Después de la molécula H_2^+ que tiene un solo electrón, la molécula más simple es la que tiene sólo dos electrones, tal como H_2 . El análisis de esta molécula es muy similar al de H_2^+ pero con algunas diferencias importantes. Cuando tengamos más de un electrón, debemos usar el principio de exclusión que, como se recordará del caso atómico (sección 4.3), requiere que tengamos en cuenta el espín del electrón además de su movimiento orbital.

Comencemos por discutir el movimiento orbital de los electrones. En una molécula diatómica (como en cualquier molécula lineal) los electrones no se mueven en un campo de fuerzas centrales por lo que el momentum angular orbital L del electrón no permanece constante durante el movimiento. Tomemos como eje Z (fig. 5-9) la línea que pasa por los dos núcleos; la fuerza resultante que actúa sobre el electrón está dirigida siempre hacia el eje Z ; en otras palabras: la fuerza es axial. En este caso, el torque respecto a O que actúa sobre el electrón es perpendicular al eje Z por lo que la componente Z del momentum angular del electrón, L_z , es constante. Como sabemos, esta componente del momentum angular puede tener los valores $L_z = m_l \hbar$, donde $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. El signo de m_l determina el sentido de rotación del electrón alrededor del eje Z ; sin embargo, la energía del electrón es independiente del sentido de rotación. Por lo tanto, para especificar el estado de un electrón sólo es necesario dar el valor absoluto de m_l (o sea $\lambda = |m_l|$). Se designa los diferentes estados de momentum angular conforme al siguiente esquema:

m_l :	0	± 1	± 2	± 3	...
λ :	0	1	2	3	...
símbolo:	σ	π	δ	ϕ	...

Así, excepto los estados σ , todos los otros estados de momentum angular tienen

degeneración de segundo orden a causa del signo doble de m_l . Además, en cada uno de estos estados el electrón puede tener su espín hacia arriba o hacia abajo respecto al eje molecular (correspondientes a $m_s = +\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$ respectivamente); los estados de momentum angular pueden entonces acomodar dos electrones: uno con espín hacia arriba y otro con espín hacia abajo, y los estados restantes π, δ, ϕ, \dots pueden acomodar hasta cuatro electrones cada uno, dos con espín hacia arriba y dos con espín hacia abajo. Usaremos para los estados orbitales moleculares la notación $\lambda n l$ (esto es, $\sigma n l, \pi n l, \delta n l$, etc.), donde $n l$ sirve para indicar los orbitales atómicos con los cuales se construyó cada orbital molecular

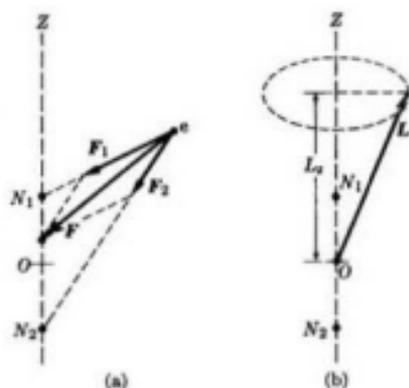
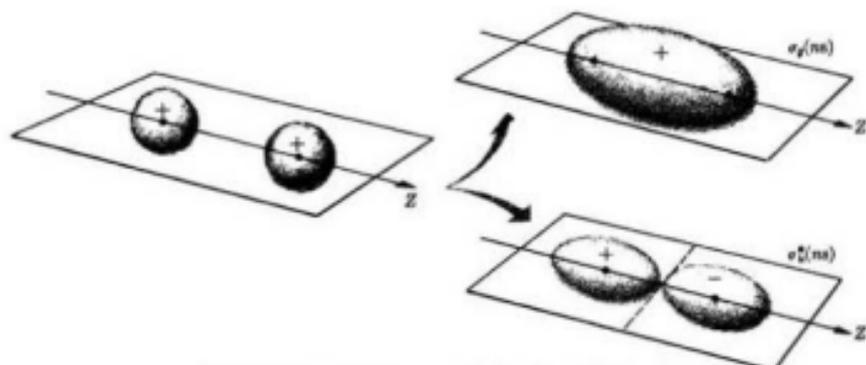


Fig. 5-9. Momentum angular orbital electrónico en una molécula diatómica.



(a) Orbitales moleculares resultantes de orbitales atómicos s

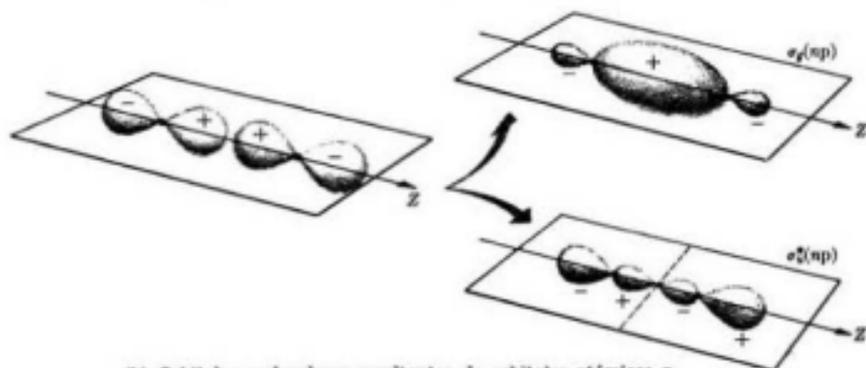
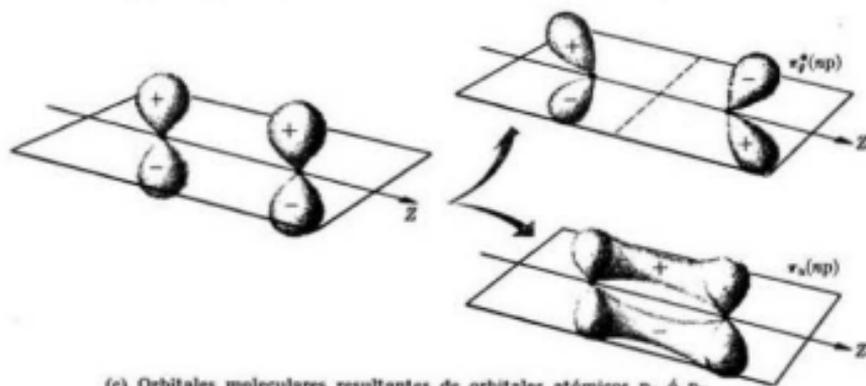
(b) Orbitales moleculares resultantes de orbitales atómicos p_z (c) Orbitales moleculares resultantes de orbitales atómicos p_x ó p_y

Fig. 5-10. Orbitales moleculares en moléculas diatómicas homonucleares.

mediante combinación lineal. Cada uno de estos estados orbitales moleculares corresponde a una energía diferente.

En el caso de moléculas compuestas de dos núcleos idénticos, tales como H_2^+ y H_2 , llamadas moléculas *homonucleares*, hay que considerar una simetría importante. Estas moléculas tienen un centro de simetría O : la distribución de probabilidad de un electrón debe ser la misma en puntos situados simétricamente respecto a O . Por lo tanto la función de onda del electrón debe ser la misma en puntos simétricos o debe tener el mismo valor pero signos opuestos. Por ejemplo, esta situación se dio para H_2^+ , correspondiendo a las funciones de onda ψ_{par} y ψ_{impar} ilustradas en la fig. 5-4. Los estados de momento angular descritos por funciones de onda del tipo ψ_{par} se denominan estados *g* y los descritos por funciones de onda del tipo ψ_{impar} se denominan estados *u* (del alemán *gerade*, par, y *ungerade*, impar). Para las moléculas homonucleares tenemos entonces estados σ_g , σ_u , π_g , π_u , etc. Esto explica la notación introducida en la sección 5.2.

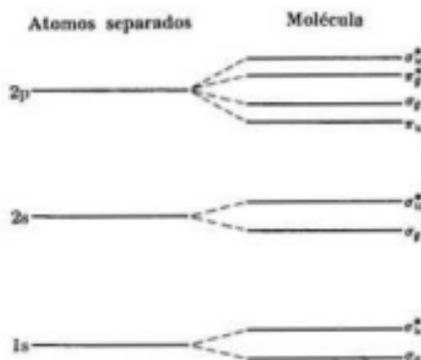


Fig. 5-11. Niveles de energía electrónicos en moléculas diatómicas homonucleares.

Para comprender cómo los átomos se unen para formar una molécula es necesario conocer la variación espacial de la distribución de probabilidad del electrón correspondiente a cada uno de sus estados de momento angular. En la fig. 5-5(b) se ha representado distribución para los estados $\sigma_g 1s$ y $\sigma_u^* 1s$ de H_2^+ . Comenzaremos considerando los átomos a una gran distancia uno de otro y trataremos de imaginar cómo las funciones ψ_1 y ψ_2 se combinan linealmente para formar una *función de onda u orbital molecular* ψ , a medida que los átomos se acercan.

La fig. 5-10 ilustra unas pocas funciones de onda u orbitales que resultan de combinar linealmente algunas funciones de onda atómicas (u orbitales atómicos). En esta figura sólo se muestra la distribución angular de las funciones de onda. La fig. 5-10(a) muestra el caso en que se combinan dos funciones de onda atómicas s , que poseen simetría esférica. Las dos funciones de onda moleculares obtenidas combinando ψ_1 y ψ_2 en las formas $\psi_1 \pm \psi_2$ están a la derecha; corresponden a los estados σ_g y σ_u ya discutidos para el caso de H_2^+ . En la fig. 5-10(b) tenemos las dos funciones de onda moleculares que resultan de combinar dos funciones de onda p_z atómicas, y en la fig. 5-10(c) las que resultan de combinar funciones de

onda p_x o p_y atómicas. Todas estas funciones están moduladas por la parte radial de la función de onda. Así, las funciones σ_p que se obtienen de los orbitales atómicos $1s$, $2s$, etc., tienen la misma distribución angular, pero difieren en la variación radial. Los orbitales moleculares que tienen un plano nodal (indicado mediante una línea de trazos) perpendicular a la línea que une los dos núcleos son antiligantes y los otros son ligantes. La fig. 5-11 muestra esquemáticamente la secuencia de niveles de una molécula. La separación y el orden de los niveles de energía pueden variar de molécula a molécula y dependen además de la distancia internuclear.

5.4 Configuración electrónica de algunas moléculas diatómicas

Analicemos ahora algunas moléculas diatómicas homonucleares simples. En la sección 5.2 hemos estudiado la más simple: H_2^+ ; sabemos que su estado fundamental consiste en un electrón en el estado $\sigma_g 1s$. Consideraremos a continuación la molécula H_2 , compuesta de dos electrones y dos protones (fig. 5-12). Esta molécula es aún lo suficientemente simple como para que sea posible analizarla en detalle sin resolver realmente la ecuación de Schrödinger. La energía potencial eléctrica total del sistema es

$$E_p = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_1'} - \frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_2'} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r} \right). \quad (5.6)$$

Los dos primeros términos corresponden a la interacción del electrón e_1 con los protones p_1 y p_2 , el tercero y el cuarto a la interacción de e_2 con p_1 y p_2 , el quinto a la repulsión entre los dos electrones y el último a la repulsión entre los dos protones. Obsérvese que debido a la identidad de los dos electrones ya no podemos decir que el electrón e_1 pertenece al protón p_1 y el electrón e_2 al protón p_2 . En cierto sentido los átomos han perdido su individualidad para dar lugar a un nuevo ente: la molécula.

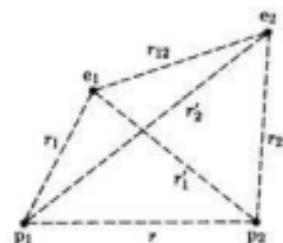


Fig. 5-12. Molécula H_2 .

El paso siguiente sería establecer la ecuación de Schrödinger correspondiente a la energía potencial dada anteriormente, procediendo como lo hicimos para la molécula H_2^+ en la sección 5.2.

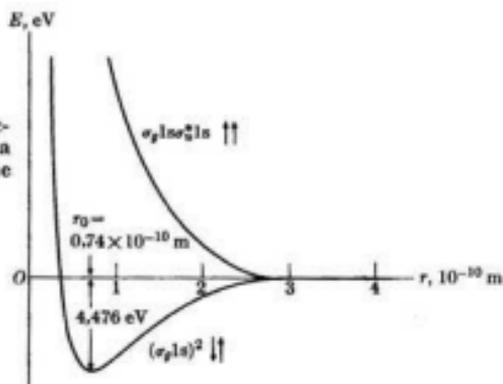
No seguiremos, sin embargo, este método sino que aprovecharemos la discusión hecha en la sección precedente. Podemos entonces considerar que conforme al principio de exclusión se puede acomodar los dos electrones en el nivel ligante $\sigma_g 1s$ con espines opuestos, resultando la configuración $(\sigma_g 1s)^2$. Ambos electrones están en un estado ligante y dan lugar a una molécula estable. En la fig. 5-13 se da la energía molecular de esta configuración en función de la distancia internuclear. La separación de equilibrio de los núcleos es $0,74 \times 10^{-10}$ m y la energía de disociación en dos átomos de hidró-

geno en sus estados fundamentales es 4,476 eV. Si los dos electrones tienen el mismo espín, uno de ellos debe estar en el estado ligante $\sigma_g 1s$ y el otro en el estado antiligante $\sigma_u^* 1s$, resultando la configuración $(\sigma_g 1s)(\sigma_u^* 1s)$. El efecto antiligante domina al efecto ligante por lo que no resulta una configuración estable, como se muestra en la curva correspondiente de la fig. 5-13 que no tiene mínimo.

Consideremos ahora He_2^+ que tiene tres electrones. Dos electrones están acomodados en el estado ligante $\sigma_g 1s$ y el tercero en el estado antiligante $\sigma_u^* 1s$, por lo que la configuración es $(\sigma_g 1s)^2(\sigma_u^* 1s)$. El resultado es una molécula estable con energía de disociación igual a 2,5 eV. La molécula H_2^- también tiene tres electrones pero como la carga nuclear es relativamente pequeña, su energía de disociación también es muy pequeña y su vida media es muy corta. Sin embargo, ha sido observada espectroscópicamente.

La molécula He_2 tiene cuatro electrones, dos en el estado ligante $\sigma_g 1s$ y dos en el estado antiligante $\sigma_u^* 1s$, es decir que es $(\sigma_g 1s)^2(\sigma_u^* 1s)^2$. El resultado es que no se produce una configuración estable. Esto explica por qué el helio es un gas monoatómico. Sin embargo, se puede formar una molécula He_2 excitada si se excita uno de los electrones $\sigma_u^* 1s$ al estado ligante $\sigma_g 2s$, dando $(\sigma_g 1s)^2 \sigma_u^* 1s \sigma_g 2s$.

Fig. 5-13. Energía potencial electrónica en función de la distancia internuclear para los estados ligante y antiligante del H_2 .



La tabla 5-1 muestra la configuración electrónica de las moléculas diatómicas homonucleares hasta Ne_2 . La tabla indica también la energía de enlace y la longitud del enlace del estado fundamental de estas moléculas. En esta tabla se pueden ver algunas características interesantes. En general hay unión molecular cuando entre los dos átomos que se combinan se concentran dos electrones con espines opuestos, o sea, que ocupan orbitales moleculares ligantes. Sin embargo, esto no es una regla estricta, ya que He_2^+ tiene sólo tres electrones, y en B_2 y O_2 el último par de electrones está en un orbital π y sus espines son paralelos en vez de opuestos. Esta característica de B_2 y O_2 se debe al hecho de que los orbitales pueden acomodar hasta cuatro electrones, dos con espín hacia arriba y dos con espín hacia abajo, mientras que estas moléculas tienen sólo dos electrones en ese nivel de energía. Recordemos del caso atómico (sección 4.3) que la

TABLA 5-1 Configuración electrónica de moléculas diatómicas homonucleares

Molécula	Configuración	Energía de disociación, eV	Longitud de enlace, Å	Estado fundamental
	$\sigma_g 1s \quad \sigma_g^* 1s \quad \sigma_g 2s \quad \sigma_g^* 2s \quad \pi_u 2p \quad \sigma_g 2p \quad \pi_g^* 2p \quad \sigma_g^* 2p$			
H ₂ ⁺	\uparrow	2,65	1,06	$^2\Sigma_g$
H ₂	$\uparrow\downarrow$	4,48	0,74	$^1\Sigma_g$
He ₂ ⁺	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow$	3,1	1,08	$^2\Sigma_u$
He ₂	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	Inestable		$^1\Sigma_g$
Li ₂	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	1,03	2,67	$^1\Sigma_g$
Be ₂	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	Inestable		$^1\Sigma_g$
B ₂	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\uparrow$	3,6	1,59	$^3\Sigma_g$
C ₂	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$	3,6	1,31	$^1\Sigma_g$
N ₂	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	7,37	1,09	$^1\Sigma_g$
O ₂	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\uparrow$	5,08	1,21	$^3\Sigma_g$
F ₂	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$	2,8	1,44	$^1\Sigma_g$
Ne ₂	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	Inestable		$^1\Sigma_g$

repulsión entre los electrones favorece las funciones de onda espaciales más anti-simétricas. Esto exige, conforme al principio de exclusión, las funciones de onda de espín más simétricas, lo cual significa en este caso que los dos electrones tienen sus espines paralelos. Como el espín resultante de O₂ es uno, la molécula de oxígeno tiene un momento dipolar magnético permanente, lo cual explica por qué el oxígeno es un gas paramagnético, mientras que la mayoría de los gases diatómicos homonucleares son diamagnéticos. Podemos esperar también que la estabilidad de la molécula dependa del número relativo de pares de electrones ligantes y antiligantes. Por ejemplo, hemos indicado que He₂ tiene el mismo número de pares de electrones ligantes y de antiligantes, no siendo estable. Lo mismo ocurre con Be₂; en consecuencia las dos moléculas son inestables. Por

otra parte, la estabilidad de N_2 , O_2 , F_2 y Ne_2 (medida por la energía de disociación) decrece porque la diferencia entre pares ligantes y antiligantes es en estas moléculas: 3, 2, 1 y 0, respectivamente.

La componente del momentum angular orbital total de los electrones según el eje molecular está dada por $M_L \hbar$, donde $M_L = \sum m_l$. La energía de un estado dado depende de $\Lambda = |M_L|$. Se designa el estado con los símbolos Σ , Π , Δ , Φ , etc., según que $\Lambda = 0, 1, 2, 3, \dots$. Si S es el espín resultante de los electrones de la molécula, el símbolo de un estado o término es $^{2S+1}\Lambda$. En la última columna de la tabla 5-1 se indica el término del estado fundamental de cada molécula.

Cuando los dos núcleos que componen una molécula son diferentes, tal como en el caso de HCl, CO y NaCl, la molécula se llama *heteronuclear*. En estas moléculas la interacción coulombiana de cada núcleo con los electrones es diferente y la molécula no tiene un centro de simetría. Luego, aunque los estados electrónicos se continúan llamando σ , π , δ , \dots , etc., no se clasifican en g y u . En general, como se indicó al principio del capítulo, cuando se estudia estas moléculas sólo se considera los electrones que están en la última capa sin llenar.

Tomemos como ejemplo el caso del NaCl. El problema consiste en describir el movimiento de los 11 electrones del átomo de sodio y de los 17 del de cloro en el campo eléctrico producido por los núcleos de Na y de Cl a la distancia de equilibrio (en la fase gaseosa) de alrededor de $2,51 \times 10^{-10}$ m. Supongamos, para simplificar el problema, que como los electrones de las capas cerradas están firmemente ligados a sus respectivos núcleos no son afectados por la presencia de un segundo núcleo. Además, conforme a la discusión precedente, es de esperar que los electrones que están en capas sin llenar, pero que tienen sus espines aco-

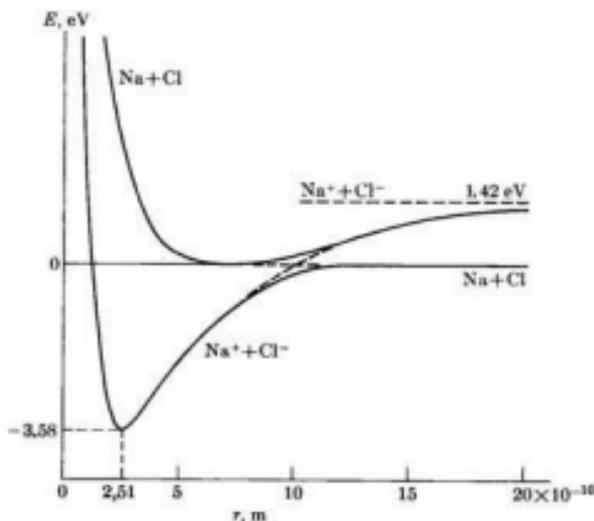


Fig. 5-14. Curvas de energía potencial para el NaCl y el Na^+Cl^- .

plados, no participen fuertemente en la unión de la molécula. Nos quedan entonces solamente dos electrones no apareados: el electrón 3s del Na y un electrón 3p del Cl.

Aplicando el mismo razonamiento usado para las moléculas homonucleares, podríamos decir que se produce una estructura estable cuando los dos electrones están concentrados entre los dos átomos. Sin embargo, como las cargas nucleares son diferentes, la distribución no es simétrica. En el caso de la molécula de NaCl la carga electrónica está desplazada hacia el núcleo de Cl, ya que éste produce un campo atractivo más intenso. Esto da lugar a una molécula que tiene una distribución de carga no uniforme y que en consecuencia está polarizada. El momento dipolar eléctrico del NaCl en la fase gaseosa es $3,0 \times 10^{-29}$ m C aproximadamente. Si el electrón 3s del Na se transfiriera completamente al Cl, la molécula sería un dipolo de carga $e = 1,6 \times 10^{-19}$ C y longitud igual a la separación de equilibrio $2,5 \times 10^{-10}$ m o sea de momento dipolar igual a $4,0 \times 10^{-29}$ mC. Concluimos entonces que alrededor del 75 % de la distribución electrónica del electrón de valencia del Na está desplazada hacia el átomo de Cl y podemos considerar que la molécula está compuesta de dos iones mantenidos juntos por medio de su interacción coulombiana. Podemos indicar esta situación escribiendo Na^+Cl^- . Este tipo de unión molecular se denomina *enlace iónico*, mientras que la situación descrita antes para el caso de las moléculas homonucleares, con una distribución electrónica simétrica, se denomina *enlace covalente*.

TABLA 5-2 Energías de disociación D , longitudes del enlace r_0 y momentos dipolares eléctricos p de algunas moléculas diatómicas*

Covalente				Iónico			
Molécula	D , eV	r_0 , Å	p , D	Molécula	D , eV	r_0 , Å	p , D
H ₂	4,48	0,74	0	NaCl	3,58	2,51	8,5
Li ₂	1,03	2,67	0	HCl	4,43	1,27	1,07
O ₂	5,08	1,21	0	LiH	2,5	1,60	5,88
N ₂	7,37	1,09	0	KBr	3,96	2,94	1,29
Cl ₂	2,47	1,99	0	KF	5,9	2,55	8,60
HI	3,06	1,61	0,38	CsCl	3,76	3,06	9,97
CO	11,11	1,13	0,12	KCl	4,92	2,79	8,0
NO	5,3	1,15	0,15	KI	3,0	3,23	9,24

* Las moléculas están agrupadas conforme al carácter dominante de la unión. Los momentos dipolares eléctricos están expresados en *debyes* (D). Un D es $3,3 \times 10^{-30}$ m C.

La fig. 5-14 muestra la energía potencial del sistema sodio-cloro (en la fase gaseosa) en función de la distancia internuclear. A grandes distancias, los dos sistemas interactuantes son los átomos de Na y de Cl, siendo su interacción muy pequeña por lo que la energía potencial es prácticamente constante. A una separación de alrededor de $12,5 \times 10^{-10}$ m comienza a entrar en acción la transferencia de carga del Na al Cl. Reduciendo aún más la separación la energía poten-

cial de interacción se asemeja al potencial coulombiano de atracción entre los iones Na^+ y Cl^- . A distancias internucleares muy pequeñas se hace apreciable la repulsión entre los núcleos y las capas cerradas de los dos iones, llegando a sobrepasar la atracción iónica entre Na^+ y Cl^- . El mínimo de la energía potencial o sea la posición de equilibrio corresponde a una separación de $2,5 \times 10^{-10}$ m.

El orbital o función de onda molecular de una molécula diatómica heteronuclear no puede ser del tipo dado en la ec. (5.2), que trata a los dos núcleos de un modo simétrico. Luego (si A y B designan los dos núcleos), en vez de escribir la ec. (5.2) para un orbital molecular ligante, debemos escribir

$$\psi = \psi_A + \lambda \psi_B,$$

donde ψ_A y ψ_B son las funciones de onda atómicas del electrón respecto a cada núcleo. El parámetro λ se elige de modo que la energía calculada concuerde con el valor experimental. Según sea el valor de λ , la distribución electrónica se intensifica en la región entre los dos núcleos ϕ hacia uno de ellos. En el primer caso el enlace es predominantemente covalente y en el segundo es principalmente iónico. Para la mayoría de las moléculas diatómicas heteronucleares el enlace es intermedio entre el covalente puro y el iónico puro. En general, cuanto más iónico es el enlace mayor es el momento dipolar eléctrico de la molécula. Por ejemplo, en la molécula de CO, en la cual ambos núcleos tienen cargas parecidas, el carácter iónico del enlace es menos notable que el covalente. Esto está evidenciado por el momento dipolar eléctrico relativamente pequeño, $0,40 \times 10^{-30}$ m C, de la molécula. La tabla 5-2 da las energías de disociación, las longitudes del enlace y los momentos dipolares eléctricos de algunas moléculas diatómicas e indica también el carácter dominante del enlace.

EJEMPLO 5.3. Discutir el potencial de Morse.

Solución: El potencial de Morse es una expresión empírica que reproduce con bastante precisión la energía potencial de un estado ligado de una molécula diatómica para una configuración electrónica dada. Su forma es

$$E_p(r) = D[1 - e^{-a(r-r_0)}]^2, \quad (5.7)$$

donde las constantes D , a y r_0 son parámetros ajustables característicos de cada molécula. En la fig. 5-15 se muestra el gráfico de $E_p(r)$. El mínimo de E_p se obtiene hallando dE_p/dr e igualándola a cero. Se tiene

$$-2Da e^{-a(r-r_0)}[1 - e^{-a(r-r_0)}] = 0,$$

que requiere que $e^{-a(r-r_0)} = 1$ o sea $r = r_0$, lo cual indica que r_0 es la separación de equilibrio. El valor de E_p en el mínimo es cero. Para valores muy grandes de r la exponencial es despreciable y E_p tiende al valor constante D . Podríamos decir entonces que D es la energía necesaria para separar o disociar la molécula si está

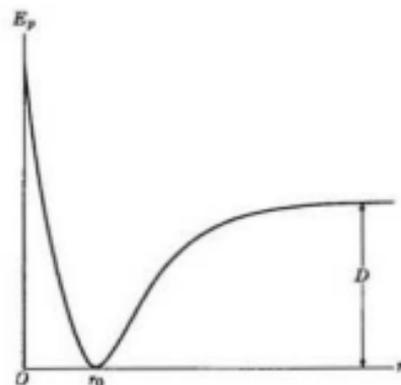


Fig. 5-15. Potencial de Morse.

inicialmente en el estado de energía potencial mínima. Sin embargo, hay que considerar esto con más cuidado debido a la llamada *energía vibracional en el punto cero* (ver sección 5.8).

Para r pequeño, E_p tiende al valor $D(1 - e^{2\alpha r})^2$ en vez de infinito, lo que constituye una limitación del potencial de Morse. Para obtener el significado de la constante α debemos esperar hasta que estudiemos las vibraciones moleculares (ejemplo 5.7).

EJEMPLO 5.4. Determinación de los términos posibles del estado fundamental de algunas de las moléculas de la tabla 5-1.

Solución: Cuando un orbital molecular $\lambda n l$ ha completado su cuota de electrones permitida por el principio de exclusión, el único estado posible es $M_L = 0$ y $S = 0$ ó estado ${}^1\Sigma$. Las moléculas H_2 , He_2 , Li_2 , Be_2 , C_2 y F_2 de la tabla 5-1 tienen completos todos sus orbitales moleculares y su estado fundamental es ${}^1\Sigma$. Si hay un solo electrón en el orbital molecular de más energía $\lambda n l$, es evidente que $\Lambda = \lambda$ y $S = \frac{1}{2}$. Esto es lo que ocurre en H_2^+ y He_2^+ , que tienen $\lambda = 0$ y el término del estado fundamental es ${}^2\Sigma$. Cuando un orbital molecular no está completamente lleno pero tiene más de un electrón, como en B_2 y O_2 , que tienen la configuración $(\pi 2p)^2$, hay diversos términos posibles. El orbital molecular $\pi 2p$ se forma con funciones de onda atómicas con $m_l = \pm 1$. Además $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Los posibles arreglos de números cuánticos (o de orbitales atómicos) compatibles con el principio de exclusión están dados en la tabla que sigue, en la cual los símbolos corresponden a las funciones de onda (m_l, m_s) , $(m_l, m_s)_2$.

$M_S \backslash M_L$	-1	0	+1
+2		(1, +) (1, -)	
+1			
0	(1, -) (-1, -)	(1, +) (-1, -) (1, -) (-1, +)	(1, +) (-1, +)
-1			
-2		(-1, +) (-1, -)	

Vemos que en esta tabla tenemos funciones de onda suficientes como para formar los siguientes estados moleculares:

$$\begin{array}{lll}
 M_L = \pm 2, & M_S = 0: & \text{estado } {}^1\Delta \\
 M_L = 0, & M_S = \pm 1, 0: & \text{estado } {}^3\Sigma \\
 M_L = 0, & M_S = 0: & \text{estado } {}^1\Sigma
 \end{array}$$

Entonces la configuración $(\pi 2p)^2$ tiene tres términos posibles, de los cuales el estado fundamental es el de multiplicidad más alta: ${}^3\Sigma$. Este es el estado fundamental de B_2 y de O_2 .

EJEMPLO 5.5. Discusión de la energía potencial de una molécula diatómica en el caso de unión iónica.

Solución: La expresión que sigue da una descripción bastante precisa de la energía potencial en la unión iónica:

$$E_p(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{b}{r^9}. \quad (5.8)$$

El primer término es la atracción coulombiana pura entre los iones y el segundo da cuenta de la repulsión de los núcleos y de las capas cerradas. Se elige el exponente 9 porque es el que produce el mejor ajuste de los datos experimentales mediante una función r^{-9} . Como el segundo término depende de r^{-9} disminuye muy rápidamente cuando la distancia internuclear aumenta y sólo es importante a pequeñas distancias. La separación de equilibrio r se obtiene hallando el mínimo de E_p . Se tiene

$$\left(\frac{dE_p}{dr}\right)_{r=r_0} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} - \frac{9b}{r_0^{10}},$$

que da $b = e^2 r_0^{10} / 36\pi\epsilon_0$. Designando con D_i la correspondiente energía E_p en el mínimo, se tiene $D_i = -(8/9)e^2 / 4\pi\epsilon_0 r_0$. Esta es la energía de disociación de la molécula. Es igual a la energía necesaria para disociar la molécula inicialmente en su estado fundamental, en dos iones en reposo a distancia infinita uno de otro. En el caso del NaCl, D_i da la energía necesaria para separar la molécula en los iones Na^+ y Cl^- . La energía del sistema formado por Na^+ y Cl^- a distancia infinita corresponde a la línea de trazos en la fig. 5-14. Poniendo $r_0 = 2,51 \times 10^{-10}$ m, encontramos para el NaCl una energía de disociación de 5,12 eV. Sin embargo, estamos interesados en la energía necesaria para disociar el NaCl en dos átomos neutros, Na y Cl. Se necesita una energía de 5,14 eV para ionizar un átomo de Na, mientras que cuando se forma el ion Cl^- se libera una energía de 3,72 eV. Por lo tanto, el sistema formado por Na^+ y Cl^- a distancia infinita tiene una energía en exceso sobre la del sistema Na y Cl a distancia infinita igual a 5,14 eV - 3,72 eV = 1,42 eV. Esto significa que la energía D_0 de disociación del NaCl cuando se lo divide en átomos neutros es

$$D_0 = 5,12 \text{ eV} - 1,42 \text{ eV} = 3,70 \text{ eV},$$

que es algo mayor que el valor experimental de 3,58 eV. Se puede obtener un mejor ajuste de los datos experimentales si se reemplaza el término repulsivo que depende de la inversa de r por un término exponencial de la forma $b \exp(-r/r_0)$.

5.5 Moléculas poliatómicas

Un nuevo elemento importante entra en el análisis del movimiento electrónico en moléculas con más de dos átomos: la disposición geométrica de los electrones y los núcleos (en otras palabras, la simetría molecular). Debemos recordar del caso diatómico que se favorece la unión cuando los electrones de enlace pueden acomodarse en la región que está entre los dos átomos. Esto requiere que las funciones de ondas atómicas pertenecientes a los dos átomos y que forman el orbital molecular se extiendan o "traslapen" lo máximo posible a lo largo de la línea que une los dos núcleos, favoreciendo el que un par de electrones (uno de cada átomo) esté concentrado entre los dos átomos. Podemos establecer como sigue este requisito de "máximo traslape" de las funciones de onda atómicas:

Hay unión entre dos átomos en la dirección en que las respectivas funciones de onda atómicas que forman el orbital molecular están concentradas o traslapadas; la intensidad de la unión depende del grado de traslape de las funciones de onda atómicas.

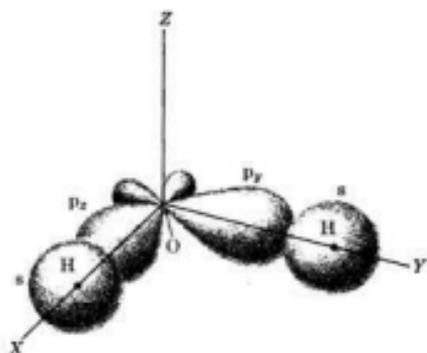


Fig. 5-16. Distribución electrónica en la molécula de H_2O .

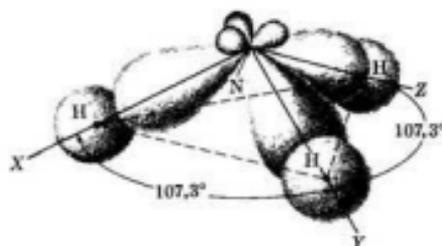
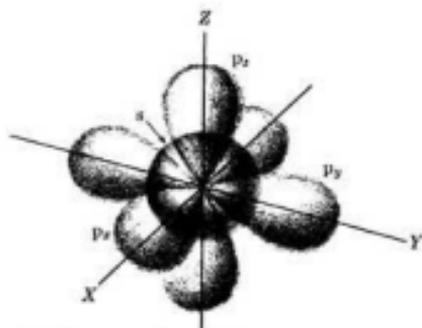
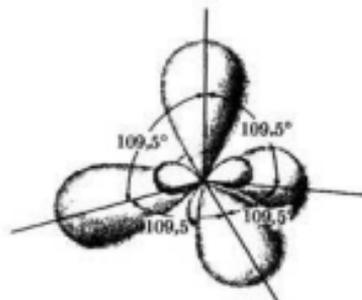


Fig. 5-17. Distribución electrónica en la molécula de NH_3 .

El principio de máximo traslape es muy útil cuando queremos determinar la forma o geometría de una molécula. Tomemos el caso de la molécula de agua H_2O , por ejemplo: contiene 10 electrones y tres núcleos. En el átomo de oxígeno podemos como antes olvidar (en primera aproximación) todos los electrones excepto los dos electrones p no apareados que están en la capa L (fig. 4-7). Como estos dos electrones tienen, como se muestra en la fig. 4-7, sus espines paralelos, deben diferir en su movimiento orbital. Recordando la fig. 3-10, que muestra la distribución angular de los electrones p , podemos suponer que uno de los electrones está concentrado en la dirección del eje X y el otro en la del eje Y , o sea que los electrones $2p$ no apareados ocupan estados p_x y p_y (El resto de los electrones $2p$ del O están en la dirección del eje Z , o sea en un estado p_z , con sus espines apareados). Los dos átomos de H , cada uno con un electrón $1s$, están ubicados de modo que sus respectivos electrones se acoplen de la mejor manera posible (esto es, con máximo traslape de sus funciones de onda) con los dos electrones no



(a) Funciones de onda s , p_x , p_y y p_z



(b) Funciones de onda híbridas sp^3

Fig. 5-18. Funciones de onda resultantes de la hibridación sp^3 .

apareados del O. Concluimos entonces que para que haya traslape máximo los dos átomos de H deben estar ubicados en los ejes X e Y, respectivamente, a igual distancia del átomo de O. Esto da lugar a una molécula en ángulo recto como se muestra en la fig. 5-16.

Obsérvese que en la fig. 5-16 la distribución de los electrones p del O no es exactamente igual a la mostrada en la fig. 3-10. La razón es que la presencia de los átomos de H deforma, o polariza, algo el movimiento de los electrones p del O. Además el ángulo entre los dos enlaces O-H es ligeramente mayor que 90° (en realidad es $104,5^\circ$) a causa de la repulsión entre los dos átomos de H. Un cálculo detallado muestra que los electrones 1s del hidrógeno son atraídos hacia el átomo de O por lo que los centros de masa de las cargas negativas y positivas no coinciden, produciendo una molécula polarizada con un momento dipolar eléctrico resultante de $6,2 \times 10^{-30}$ m C, según la bisectriz del ángulo del enlace. Es evidente que si la molécula H_2O fuera lineal, el momento dipolar sería cero.

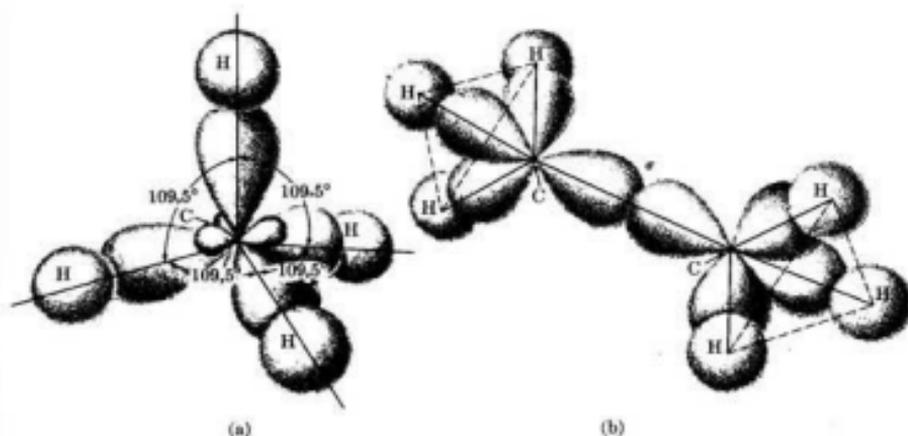


Fig. 5-19. Enlaces de orbitales moleculares sp^3 localizados en (a) metano, (b) etano.

Consideremos ahora la molécula de amoníaco, NH_3 . Los tres electrones 2p del átomo de N que no están apareados (ver fig. 4-7) están concentrados según los ejes X, Y y Z, ocupando estados p_x , p_y y p_z , de modo que la molécula NH_3 tiene una estructura piramidal, estando el átomo de N en un vértice y los átomos de H en los otros vértices que forman la base (fig. 5-17). En el vértice N los ángulos de la pirámide son $107,3^\circ$ en vez de 90° debido a la repulsión entre los átomos de H. La estructura piramidal da lugar a un momento dipolar eléctrico de $5,0 \times 10^{-30}$ m C según el eje de la pirámide. El momento dipolar sería cero si la molécula fuera plana.

El átomo de carbono es muy interesante. En su estado fundamental tiene sólo dos electrones 2p no apareados y esto no puede explicar muchos compuestos del carbono. Uno de los primeros estados excitados del carbono consiste, como

se muestra en las figs. 4-8 y 4-11, en un electrón 2s y tres electrones 2p no apareados, con sus orbitales dispuestos como en la fig. 5-18(a). Los electrones 2p actuarían análogamente a los del amoníaco, pero el electrón 2s (por su falta de direccionalidad) no produciría una unión de la misma intensidad, haciendo difícil explicar moléculas tales como el metano, CH_4 . Sin embargo, es posible construir mediante la técnica llamada *hibridización de funciones de onda*, nuevas funciones de onda atómicas orientadas en las direcciones deseadas. La función de onda 2s y las tres 2p del carbono no tienen exactamente la misma energía, pero la diferencia es muy pequeña. Haciendo combinaciones lineales apropiadas de las cuatro funciones, podemos obtener nuevas funciones de onda híbridas que corresponden todas a la misma energía y que tienen un máximo pronunciado en la dirección deseada. Un posible juego de combinaciones lineales de las funciones s, p_x , p_y y p_z da cuatro nuevas funciones de onda híbridas con máximos que apuntan hacia los vértices de un tetraedro, como se muestra en la fig. 5-18(b). Las direcciones según las cuales las nuevas funciones de onda tienen sus máximos forman ángulos de $109^\circ 28'$. Se obtienen a partir de las funciones de onda s y p en la forma

$$\begin{aligned}\psi_1 &= \frac{1}{4}(s + p_x + p_y + p_z), \\ \psi_2 &= \frac{1}{4}(s + p_x - p_y - p_z), \\ \psi_3 &= \frac{1}{4}(s - p_x + p_y - p_z), \\ \psi_4 &= \frac{1}{4}(s - p_x - p_y + p_z).\end{aligned}\quad (5.9)$$

Este tipo de hibridización se designa sp^3 . Obsérvese que como las funciones de onda s y p corresponden a valores diferentes del momentum angular, las funciones de onda híbridas no describen estados de momentum angular definido.

Consideremos ahora la molécula de metano: CH_4 . Concluimos que se obtiene máxima intensidad de las uniones cuando los electrones 1s de cada átomo de hidrógeno alcanzan máximo traslape con cada una de las cuatro funciones híbridas sp^3 del carbono. Esto da lugar a la molécula tetraédrica mostrada en la

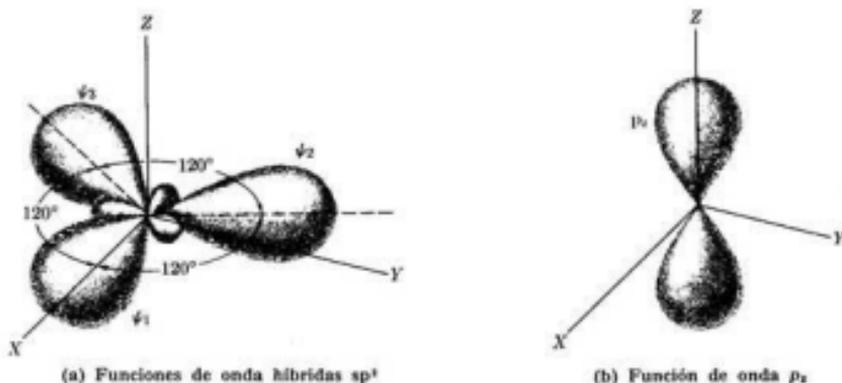
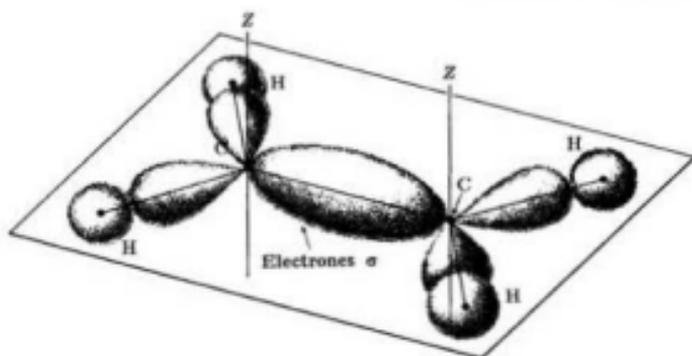
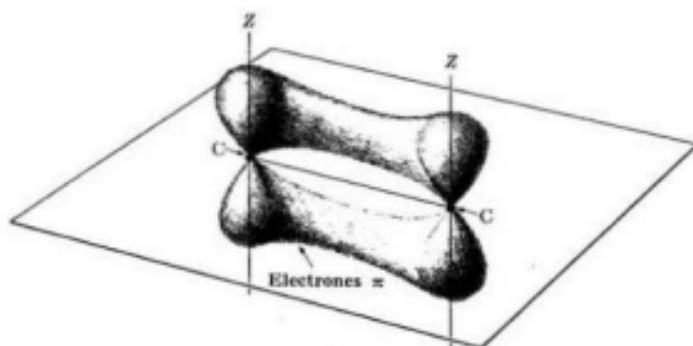


Fig. 5-20. Funciones de onda que resultan de la hibridización sp^3 .



(a)



(b)

Fig. 5-21. Distribución electrónica en el etileno usando hibridación sp^2 : (a) enlace σ , (b) enlace π .

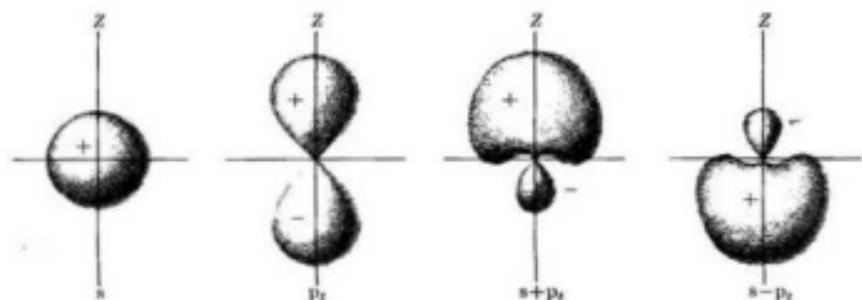


Fig. 5-22. Funciones de onda resultantes de la hibridación sp .

fig. 5-19(a). Análogamente, la molécula de etano ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$) tiene la estructura indicada en la fig. 5-19(b). En esta molécula, los dos átomos de carbono están unidos por el traslape de dos funciones de onda híbridas sp^3 . Esto se denomina *enlace σ* debido a su analogía con los orbitales σ de las moléculas diatómicas.

Es importante reconocer que la hibridización se aplica no sólo al carbono sino también a cualquier átomo o ion que tenga la misma configuración electrónica. Por ejemplo, el ion N^+ tiene la misma distribución electrónica que el carbono y la estructura del radical N^+H_4 es similar a la de CH_4 , con el ion N^+ en vez del átomo de carbono.

Hay, además de la hibridización sp^3 , otras posibilidades de hibridización que incluyen funciones de onda cuyos momentos angulares tienen valores mayores que uno. Discutiremos sólo las hibridizaciones sp^2 y sp por la importancia que tienen. En la hibridización sp^2 las funciones de onda s , p_x y p_y se combinan para producir tres funciones de onda en el plano XY con sus máximos en direcciones que forman ángulos de 120° , como se indica en la fig. 5-20. Estas funciones de onda están dadas en términos de las funciones de onda s y p por las expresiones

$$\begin{aligned}\psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}} (s + \sqrt{2} p_x), \\ \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(s - \frac{1}{\sqrt{2}} p_x + \sqrt{\frac{3}{2}} p_y \right), \\ \psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(s - \frac{1}{\sqrt{2}} p_x - \sqrt{\frac{3}{2}} p_y \right).\end{aligned}\tag{5.10}$$

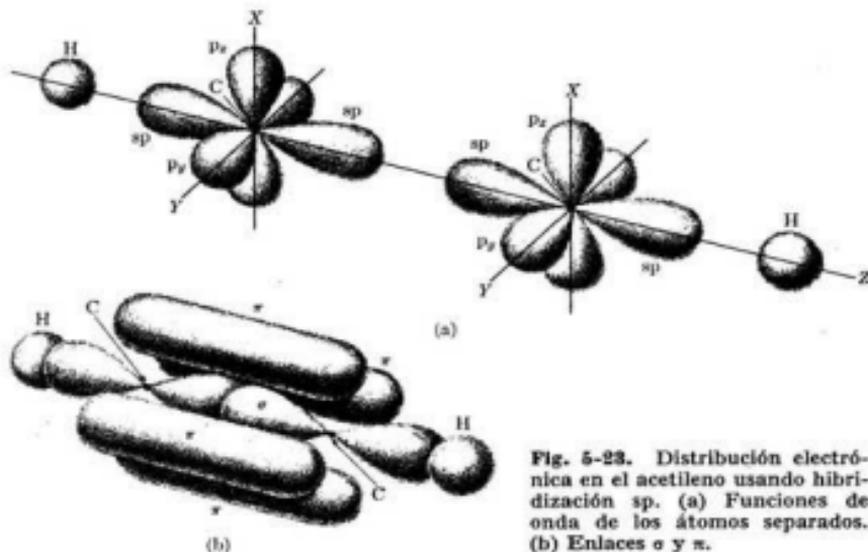


Fig. 5-23. Distribución electrónica en el acetileno usando hibridización sp . (a) Funciones de onda de los átomos separados. (b) Enlaces σ y π .

El cuarto electrón ocupa un estado p_z . Este es el tipo de hibridización necesario para explicar moléculas tales como la de etileno $H_2C=CH_2$, mostrada en la fig. 5-21. El doble enlace entre los átomos de carbono proviene del traslape de una función de onda híbrida sp^2 de cada átomo de carbono a lo largo de la línea C—C (o sea un enlace σ) y el traslape de funciones de onda p_z , lo cual constituye un enlace π , así llamado por su analogía con el caso de orbitales π en moléculas diatómicas. Los átomos de hidrógeno están ligados a las restantes funciones de onda híbridas sp^2 . Por ello, la molécula de etileno es plana. El enlace doble $\sigma\pi$ tiene cierta rigidez que hace difícil torcer la molécula alrededor del eje C—C. Esta rigidez no existe cuando hay un enlace simple como en el etano, y tiene cierto efecto sobre las propiedades moleculares. Obsérvese que el grado de traslape en un enlace π es mucho menor que en un enlace σ , por lo que los enlaces π

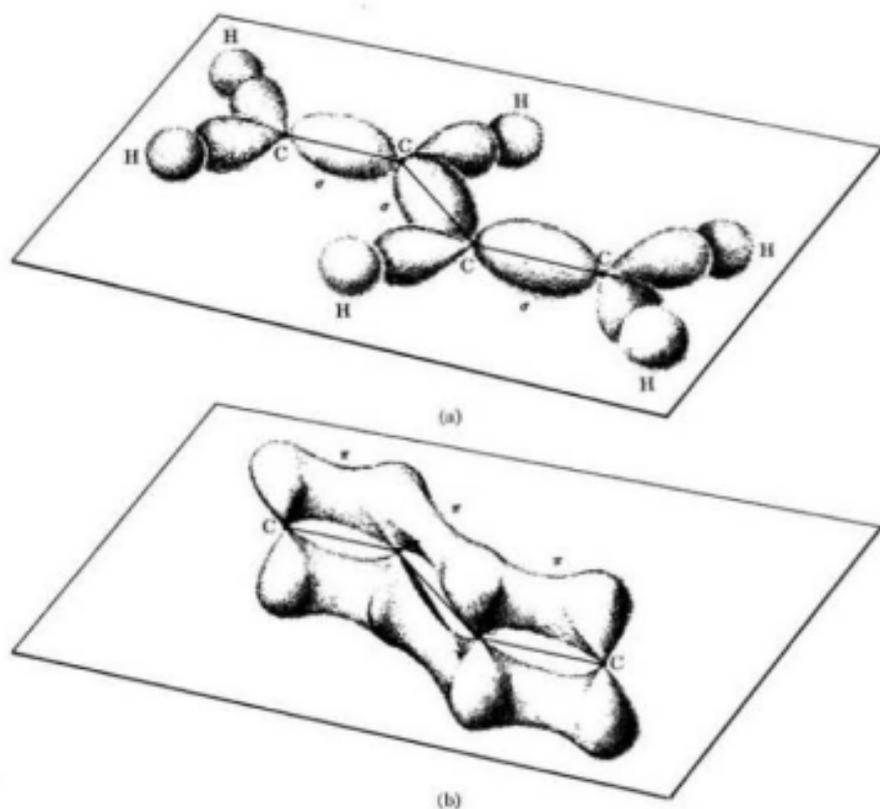


Fig. 5-24. Distribución electrónica en el butadieno. (a) Enlaces localizados σ ; (b) enlaces no localizados π .

contribuyen menos a la energía de unión que los enlaces σ . Por ejemplo, se necesita 6,33 eV para romper un enlace simple σ , mientras que sólo 3,98 eV para romper un enlace doble $\sigma\pi$ en un enlace σ .

El tercer tipo de hibridación con orbitales atómicos s y p se denomina sp y corresponde a funciones de onda $s \pm p_z$, que tienen máximos pronunciados en las direcciones $\pm Z$. Estas funciones de onda híbridas están representadas en la fig. 5-22. Las funciones de onda híbridas sp son necesarias para explicar moléculas tales como las de acetileno, $\text{HC}\equiv\text{CH}$ (fig. 5-23). El enlace triple entre los dos átomos de carbono resulta del traslape de una función de onda híbrida sp de cada átomo de carbono (esto es, un enlace σ) y el traslape de funciones de onda p_x y p_p , dando lugar a dos enlaces π . Los átomos de hidrógeno están ligados a las restantes funciones de onda sp. Por causa de esto el acetileno es una molécula lineal.

5.6 Moléculas conjugadas

Consideremos ahora una clase de compuestos, que los químicos orgánicos llaman *conjugados*, de los cuales el butadieno (C_4H_6) es un ejemplo. La estructura electrónica del butadieno está indicada en la fig. 5-24. Los átomos de carbono están unidos a lo largo de la cadena por medio de enlaces σ utilizando funciones de onda híbridas sp^2 . Los átomos de hidrógeno están ligados a los átomos de carbono usando las restantes funciones de onda sp^2 . Pero hay además cuatro electrones p_z formando enlaces π a lo largo de la cadena de átomos de carbono. Los enlaces π se comportan de una manera particular en las moléculas conjugadas. Los electrones del enlace π — uno por cada átomo de carbono — en vez de estar localizados en regiones determinadas de la molécula como los electrones de los enlaces σ , son más o menos libres de moverse a lo largo de la molécula, como se indica en la fig. 5-24(b) mediante sus distribuciones de probabilidad. De acuerdo con esto, los electrones π actúan de un modo muy especial. Por ejemplo, la polarizabilidad de las moléculas conjugadas en la dirección de la cadena del carbono es mucho mayor que la polarizabilidad de los hidrocarburos saturados, los cuales tienen sólo enlaces σ localizados y funciones de onda sp^3 . Además, los electrones π introducen cierta rigidez en la estructura molecular por lo que todos los átomos de carbono yacen en un plano.

Discutamos ahora las funciones de onda u orbitales moleculares de los cuatro electrones π . En la parte inferior de la fig. 5-25 hemos representado esquemáticamente la función de onda radial de cada uno de los electrones π cuando los átomos de carbono están muy lejos uno de otro. Cuando los átomos están muy juntos, como en una molécula, las funciones de onda posibles se obtienen haciendo combinaciones lineales apropiadas de las funciones de onda individuales o atómicas. La técnica es la misma que se usó para H_2^+ y H_2 pero ahora tenemos cuatro átomos en vez de dos. Los orbitales moleculares deben ser o simétricos o antisimétricos respecto al centro de la molécula debido a la simetría de la misma. Las cuatro funciones de onda moleculares posibles de los electrones π están designadas con ψ_1 , ψ_2 , ψ_3 y ψ_4 en la fig. 5-25, correspondiendo

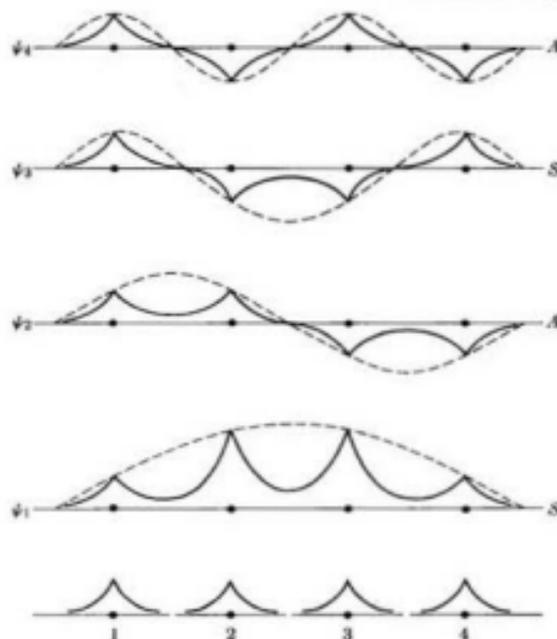


Fig. 5-25. Orbitales moleculares para los electrones π del butadieno.

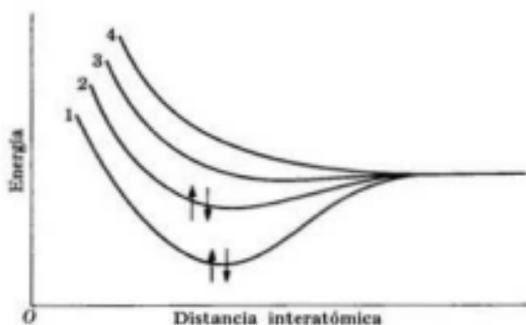


Fig. 5-26. Energía potencial electrónica para los electrones del butadieno en función de la distancia internuclear.

cada una de ellas a una energía diferente que aumenta con el número de nodos de la función de onda. En consecuencia, a medida que los átomos de carbono se acercan, la energía del sistema se desdobra en cuatro niveles muy cercanos

en vez de dos como en H_2^+ y H_2^- . En la fig. 5-26 se muestran las cuatro curvas de energía en función de la distancia internuclear. Cada nivel de energía puede aceptar dos electrones con espines opuestos. Así, en el estado fundamental del butadieno, los cuatro electrones π ocupan los estados correspondientes a ψ_1 y ψ_2 . Los dos estados siguientes, que corresponden a ψ_3 y ψ_4 , están vacíos. En la fig. 5-27 se muestra la distribución de probabilidad electrónica resultante. El orbital molecular ψ_1 es de tipo ligante para cada par de átomos de carbono, mientras que ψ_2 es ligante para los pares 1-2 y 3-4 de átomos de carbono y antiligante para el par 2-3. Por ello, la distribución total de probabilidad presenta una depresión en el centro de la molécula. Esto significa que la intensidad del enlace entre el par 2-3 de átomos de carbono debe ser menor que entre los pares 1-2 y 3-4. El valor experimental de la longitud del enlace 2-3 es $1,46 \times 10^{-10}$ m mientras que los enlaces 1-2 y 3-4 tienen una longitud de $1,35 \times 10^{-10}$ m.

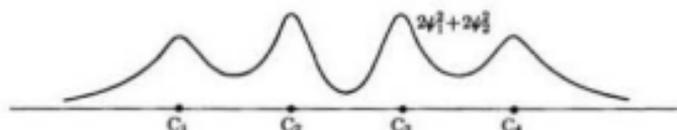


Fig. 5-27. Distribución total de probabilidad para los electrones π del butadieno.

Nuestra discusión se puede generalizar fácilmente para incluir un *polieno* o sea un compuesto conjugado que consiste en una cadena de $2n$ átomos; en el modelo clásico de la valencia se escribiría en la forma: $\dots-C=C-C=C-C=\dots$. Además de los enlaces σ entre pares de átomos adyacentes de carbono, hay $2n$ electrones π esparcidos por toda la molécula como ya se mostró para el caso del butadieno en la fig. 5-24. Hay entonces $2n$ niveles de energía disponibles muy cercanos, con capacidad para $4n$ electrones y que deben ser llenados por los $2n$ electrones π . Por ello, cuando estas moléculas están en su estado fundamental sólo está ocupada la mitad inferior de los niveles de energía. Es posible excitar el movimiento electrónico en estas moléculas con una cantidad relativamente pequeña de energía porque los niveles vacíos están muy cerca. Cuando hay $4n$ electrones π todos los niveles de energía están ocupados y para excitar el movimiento electrónico la molécula debe efectuar una transición a otra configuración electrónica, necesitando mucha más energía para ello. La disponibilidad de niveles de energía vacíos y próximos es responsable de que muchas de estas moléculas conjugadas absorban fotones en la región visible y tengan por lo tanto colores característicos.

Como último ejemplo consideraremos la molécula conjugada cíclica de benceno, C_6H_6 . Los átomos de carbono están en los vértices de un hexágono regular unidos por enlaces σ usando funciones σ de onda híbridas sp^2 a lo largo de cada línea C—C, como se muestra en la fig. 5-28(a). Los átomos de hidrógeno están ligados al restante orbital sp^2 de cada átomo de carbono. Hay también seis electrones π , uno para cada átomo de carbono, que se encuentran en orbitales p_z (el eje Z se toma perpendicular al plano de la molécula). Estos electrones π se

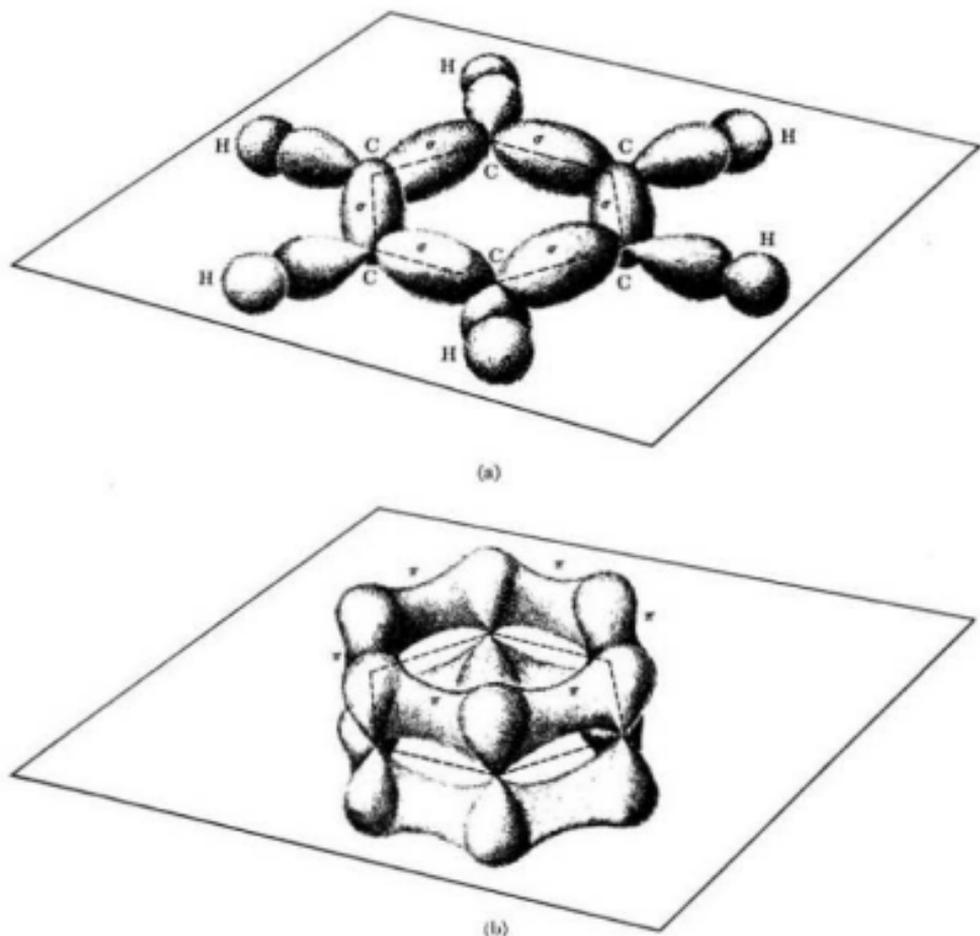


Fig. 5-28. Orbitales moleculares del benceno. (a) Enlaces localizados σ ; (b) enlaces no localizados π .

pueden mover libremente por el hexágono, constituyendo algo así como una corriente cerrada, tal como se indica en la fig. 5-28(b). Esto explica el fuerte diamagnetismo del benceno y de otras moléculas conjugadas cíclicas. El análisis de las funciones de onda y de los niveles de energía de los electrones π es similar al de los del butadieno, pero el que la cadena de carbono sea cerrada introduce nuevas características respecto a las cadenas abiertas de carbono, características que no discutiremos (ver el problema 6.20).

No proseguiremos con el estudio de la estructura molecular. Esta breve discusión del enlace químico es suficiente para ilustrar las ideas más fundamentales y para anticipar al estudiante las dificultades que surgen cuando se trata de usar de un modo demasiado rígido el concepto clásico de valencia. La formación de una molécula es un problema de muchos cuerpos con interacciones electromagnéticas que se debe resolver conforme a las reglas de la mecánica cuántica.

EJEMPLO 5.6. Estimar la primera energía de excitación de un electrón π en una molécula conjugada.

Solución: Se puede estimar la energía de excitación de un electrón π considerando que dichos electrones se mueven independientemente uno de otro y que su movimiento en la molécula se parece al movimiento en una caja de potencial (sección 2.5) cuya dimensión es del orden de la longitud de la cadena de carbono. Las funciones de onda corresponderían entonces a las líneas de trazos de la fig. 5-25. Si la cadena de carbono tiene $2n$ átomos, hay $2n$ electrones π y el último nivel electrónico ocupado corresponde al n -ésimo nivel en la ec. (2.14). La diferencia de energía entre el n -ésimo nivel y el $(n + 1)$ -ésimo es la primera energía de excitación. Luego,

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n + 1)^2}{2ma^2} - \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2n + 1), \quad (5.11)$$

donde a es la longitud de la región en que se mueven los electrones π , que se toma como la longitud de la molécula más media longitud de enlace a cada extremo. Por ejemplo, en el caso del butadieno, con a de aproximadamente $5,6 \times 10^{-10}$ m y $n = 2$, obtenemos $\Delta E = 5,86$ eV, que corresponde a fotones de $2,12 \times 10^{-7}$ m de longitud de onda. Se ha observado que el butadieno absorbe fuertemente radiación de longitud de onda $2,17 \times 10^{-7}$ m, por lo que nuestro modelo simplificado proporciona un acuerdo razonable con el experimento.

5.7 Rotaciones moleculares

Ahora que hemos considerado el movimiento electrónico en moléculas con núcleos fijos, el paso siguiente en nuestro análisis de la estructura molecular es estudiar el movimiento nuclear. El movimiento nuclear más simple es el de rotación de

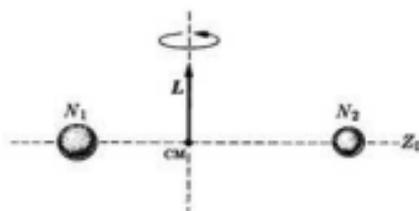


Fig. 5-29. Rotación de una molécula diatómica alrededor de su centro de masa.

la molécula alrededor de su centro de masa como si fuera un cuerpo rígido. Estudiaremos primero la rotación de moléculas diatómicas.

La manera más fácil de estudiar el movimiento de un cuerpo rígido es utilizar un sistema de referencia fijo al cuerpo y compuesto por los ejes principales de

inercia. En el caso de las moléculas diatómicas (fig. 5-29) los ejes principales son: la línea que une los dos núcleos N_1 y N_2 , o eje Z_0 , y dos líneas cualesquiera perpendiculares a él en el centro de masa. Como la masa de los electrones es muy pequeña, podemos despreciar el momento de inercia de los mismos, por lo que el momento de inercia de la molécula respecto al eje Z_0 es nulo. Luego, el momentum angular de rotación de la molécula alrededor del eje Z_0 es también cero y el momentum angular total L de la molécula es perpendicular al eje de la misma. Si r_0 es la separación de equilibrio de los núcleos y μ la masa reducida de la molécula, el momento de inercia respecto a un eje perpendicular a Z_0 que pasa por el centro de masa de la molécula es $I = \mu r_0^2$. La energía cinética de rotación de la molécula es entonces $E_r = L^2/2I$. En virtud de la cuantización del momentum angular, podemos escribir, según la ec. (3.15), $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, donde $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ (o sea un entero no negativo). En consecuencia, la energía de rotación de la molécula es

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) = Bhc l(l+1), \quad (5.12)$$

puesto que es costumbre hacer $\hbar^2/2I = Bhc$. La tabla 5-3 da los valores de $\hbar^2/2I$ y B para varias moléculas, expresados en eV y en cm^{-1} respectivamente. Dando valores sucesivos a l podemos obtener los niveles rotacionales de energía de la molécula (fig. 5-30). La separación de dos niveles de energía sucesivos, correspondientes a l y $l' = l+1$, es

$$\Delta E_r = 2Bhc(l+1). \quad (5.13)$$

TABLA 5-3 Constantes rotacionales y vibracionales de algunas moléculas diatómicas

Molécula	$\hbar^2/2I$, eV	$B = \hbar/4\pi Ic$ cm^{-1}	$\hbar\omega_0$, eV	ω_0 , cm^{-1}
H_2	$8,0 \times 10^{-3}$	60,809	0,543	4395
Cl_2	$3,1 \times 10^{-3}$	0,244	0,0698	565
N_2	$2,48 \times 10^{-4}$	2,010	0,292	2360
Li_2	$8,3 \times 10^{-4}$	0,673	0,0434	351
O_2	$1,78 \times 10^{-4}$	1,446	0,194	1580
CO	$2,38 \times 10^{-4}$	1,931	0,268	2170
HF	$2,48 \times 10^{-3}$	20,94	0,510	4138
HCl	$1,31 \times 10^{-3}$	10,59	0,369	2990
HBr	$1,05 \times 10^{-3}$	8,47	0,326	2650
BeF	$1,84 \times 10^{-4}$	1,488	0,151	1266

Como el valor de $\hbar^2/2I$ es muy pequeño ($\sim 10^{-4}$ eV) comparado con la energía cinética de traslación (que es del orden de $kT \sim \frac{1}{2} k_B T = 2,5 \times 10^{-2}$ eV a temperatura ambiente), hay a temperatura ambiente muchas moléculas en estados rotacionales excitados. Aunque la población relativa de equilibrio de los diversos niveles de energía rotacionales es un problema muy importante, su análisis re-

quiere el uso de métodos estadísticos por lo que lo diferiremos hasta la sección 12.5. Las funciones de onda correspondientes al movimiento rotacional son los $Y_{lm}(\theta, \phi)$ introducidos en la sección 3.5; los ángulos (θ, ϕ) definen la dirección del eje molecular Z_0 respecto a los ejes de coordenadas X, Y, Z fijos en el laboratorio. Por lo tanto, la paridad de cada nivel es $(-1)^l$ y los niveles de energía sucesivos

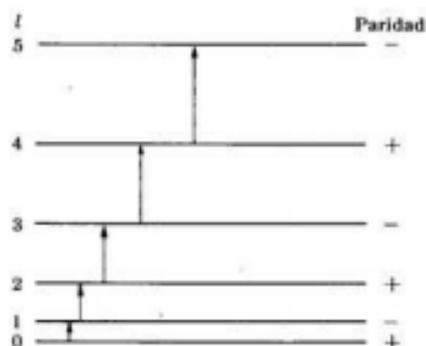


Fig. 5-30. Estados rotacionales de energía de una molécula diatómica.

tienen paridad opuesta, ya que son similares a los orbitales atómicos s, p, d, \dots . Para el caso de radiación dipolar eléctrica, las transiciones permitidas son aquellas para las cuales

$$\Delta l = \pm 1, \quad (5.14)$$

que es una regla de selección similar a la encontrada en el caso atómico. Luego, sólo son posibles las transiciones entre niveles adyacentes. En la fig. 5-30 están indicadas algunas transiciones correspondientes a absorción. Usando la regla de Bohr $E_2 - E_1 = h\nu$, se encuentra para la frecuencia de la radiación emitida o absorbida en una transición rotacional:

$$\nu = \Delta E/h = 2Bc(l+1) \quad \text{ó} \quad \tilde{\nu} = 2B(l+1), \quad (5.15)$$

donde l se refiere al momentum angular del nivel más bajo involucrado en la transición y $\tilde{\nu}$ es el número de onda expresado en cm^{-1} . El espectro rotacional de moléculas diatómicas consiste entonces en una serie de líneas equidistantes separadas

$$\Delta\tilde{\nu} = 2B \text{ cm}^{-1}.$$

Midiendo $\Delta\tilde{\nu}$, podemos calcular B y por lo tanto el momento de inercia; a partir de éste podemos estimar la separación nuclear r_0 .

Los espectros rotacionales puros caen en las microondas o en el infrarrojo lejano. Además, para que una molécula presente un espectro rotacional puro, debe tener un momento dipolar eléctrico permanente. En el proceso de absorción de radiación por parte de la molécula, el momento dipolar eléctrico permanente interactúa con el campo eléctrico de la onda incidente. En el proceso de

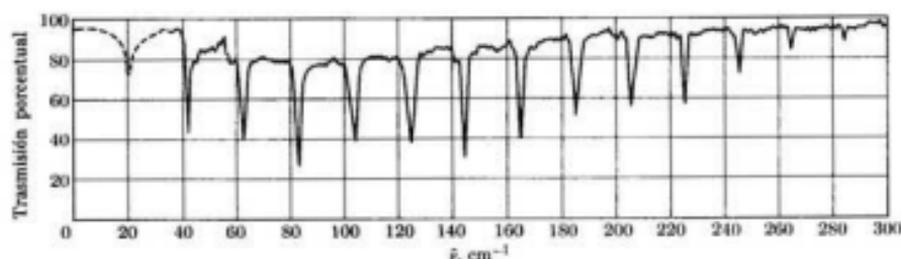


Fig. 5.31. Espectro rotacional de absorción del HCl en fase gaseosa.

emisión de radiación, la rotación del dipolo es responsable de la radiación. En consecuencia, las moléculas diatómicas homonucleares (que no tienen un dipolo eléctrico permanente) no presentan espectros rotacionales puros. La fig. 5-31 ilustra el espectro rotacional de absorción correspondiente al HCl en fase gaseosa. Cada depresión corresponde a absorción máxima o resonante. Podemos ver que las frecuencias son equidistantes de acuerdo con la expresión teórica, ec. (5.15).

La ec. (5.12) es válida para una molécula rígida. Sin embargo, cuando la energía rotacional aumenta, hay un estiramiento de la molécula debido a un efecto centrífugo; esto da lugar a un aumento del momento de inercia y es necesario corregir la ec. (5.12). Nuestra discusión se aplica también a los espectros rotacionales de moléculas lineales, como CO_2 y HCN. Estas moléculas — que tienen en general mayores momentos de inercia — tienen niveles rotacionales de energía mucho más juntos que la mayoría de las moléculas diatómicas y correspondientemente frecuencias menores en el espectro rotacional.

5.8 Vibraciones moleculares

Hasta ahora hemos considerado que los núcleos están en posiciones relativas fijas; sin embargo la forma de la curva de energía potencial para una molécula diatómica (tal como las mostradas en las figs. 5-6, 5-13 y 5-14) sugiere que los núcleos de una molécula están en movimiento oscilatorio relativo.

Consideremos una molécula diatómica que tiene una energía potencial para una configuración electrónica dada, como se muestra en la fig. 5-32, donde r_0 es la separación de equilibrio. Si el movimiento nuclear corresponde a una energía E , los dos núcleos oscilan de modo que clásicamente su separación varía entre Oa y Ob . Sin embargo, se debe describir el movimiento de los núcleos conforme a la mecánica cuántica. Si la energía potencial fuera la de un oscilador armónico simple, representada por la parábola $\frac{1}{2}k(r - r_0)^2$, el movimiento oscilatorio relativo de los dos núcleos sería armónico simple y los resultados de la sección 2.6 serían aplicables. La frecuencia angular de la oscilación es $\omega_0 = \sqrt{k/\mu}$, donde μ es la masa reducida de la molécula. En la sección 2.6 se mostró que la energía del movimiento oscilatorio está cuantizada y dada por la ec. (2.21).

Por lo tanto, los niveles vibracionales de energía de una molécula diatómica están expresados aproximadamente por

$$E_v = (v + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 \quad (5.16)$$

donde $v = 0, 1, 2, 3, \dots$ (entero no negativo). En consecuencia los niveles vibracionales de energía de la molécula son equidistantes, están a $\hbar\omega_0$ uno de otro, y la molécula tiene una energía vibracional en el punto cero igual a $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$. Debido

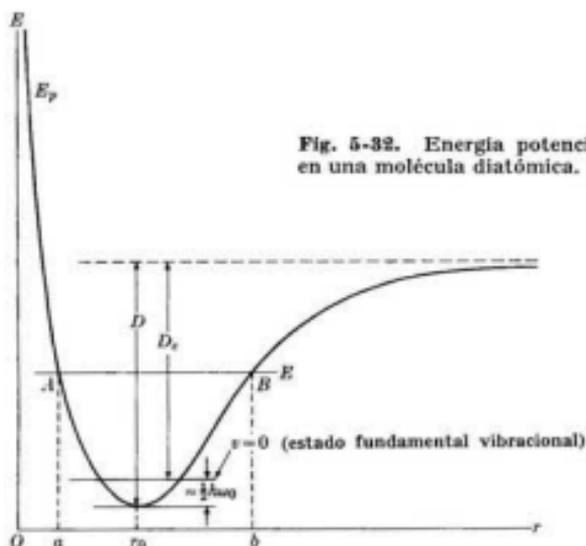


Fig. 5-32. Energía potencial electrónica en una molécula diatómica.

a la energía en el punto cero, la energía de disociación de una molécula diatómica es $D_e = D - \frac{1}{2}\hbar\omega_0$, como se puede deducir de la fig. 5-32. La regla de selección para transiciones dipolares eléctricas entre niveles vibracionales es la misma que la dada por la ec. (2.34), esto es,*

$$\Delta v = \pm 1. \quad (5.17)$$

Como el único cambio de v permitido es a un nivel vecino, la única frecuencia absorbida o emitida en una transición vibracional es igual a la frecuencia natural clásica $\nu_0 = \omega_0/2\pi$. La tabla 5-3 da los valores de $\hbar\omega_0$ y $\nu_0 = \omega_0/c$ para varias moléculas diatómicas. Las frecuencias vibracionales de la mayoría de las moléculas diatómicas están en la región infrarroja del espectro. Para que ocurra una transición vibracional, tanto emisión como absorción, la molécula diatómica

* Esta regla de selección no es rigurosa porque la energía potencial, como se muestra en la fig. 5-32, no es la de un oscilador armónico, por lo que son posibles, aunque menos probables, valores mayores de Δv .

debe tener un momento dipolar eléctrico permanente. Por ello, en las moléculas homonucleares tales como H_2 y N_2 , no hay transiciones vibracionales puras, ya que no tienen momento dipolar eléctrico permanente; estas moléculas no presentan entonces un espectro infrarrojo. Empero, en las moléculas polares, tales como HCl, hay fuertes transiciones vibracionales.

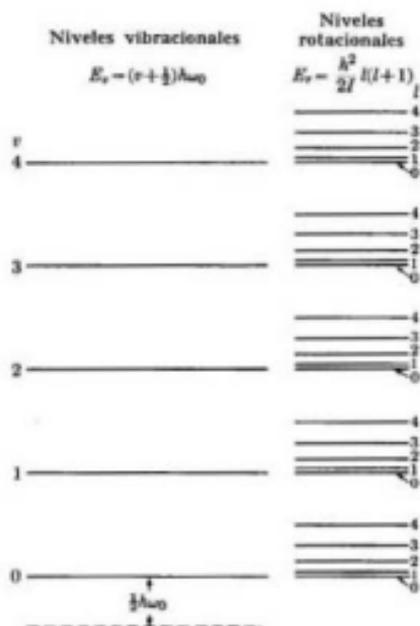


Fig. 5-33. Niveles de energía rotacionales y vibracionales de una molécula diatómica.

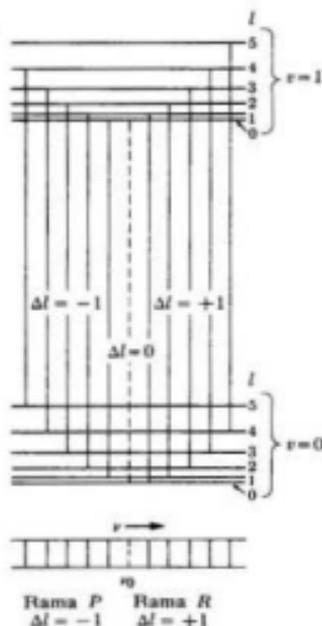


Fig. 5-34. Transiciones de vibración-rotación en una molécula diatómica.

Se puede expresar la energía molecular debida a la rotación y a la vibración combinando las ecs. (5.12) y (9.16); tenemos

$$E = E_v + E_r = (v + \frac{1}{2})h\nu_0 + \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1). \quad (5.18)$$

En general, la cantidad $\hbar^2/2I$ es mucho menor ($\sim 10^{-4}$ eV) que $h\nu_0$ ($\sim 10^{-1}$ eV), y podemos decir que a cada nivel vibracional corresponden varios niveles rotacionales, como se muestra en la fig. 5-33. El espectro de rotación-vibración resulta cuando se tiene en cuenta las reglas de selección $\Delta v = \pm 1$ y $\Delta l = \pm 1$ para transiciones entre dos niveles rotacionales pertenecientes a dos niveles vibracio-

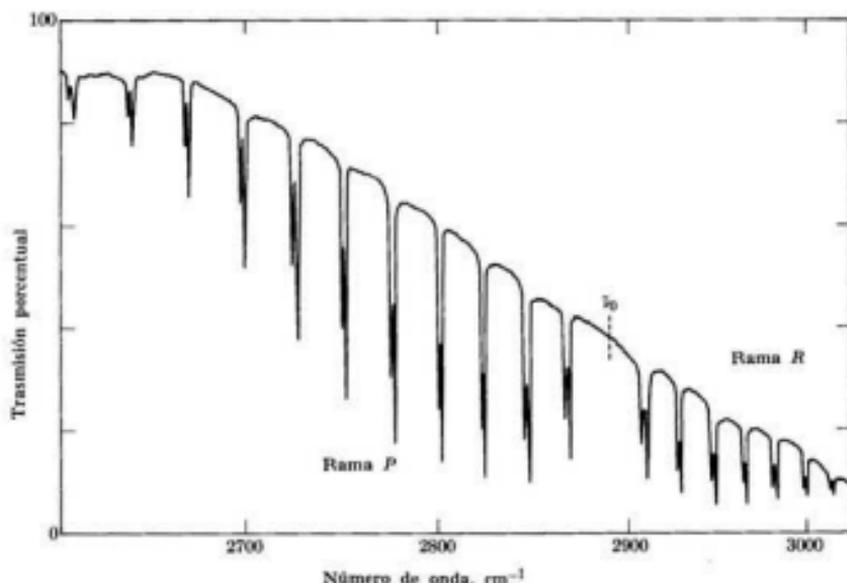


Fig. 5-35. Espectro de absorción rotacional-vibracional del HCl. Los mínimos más pronunciados se deben al H^{35}Cl y los menos pronunciados al H^{37}Cl .

nales adyacentes. Dicho espectro está formado por líneas cuyas frecuencias son

$$\nu_{v,r} = \nu_0 \pm 2Bc(l + 1)$$

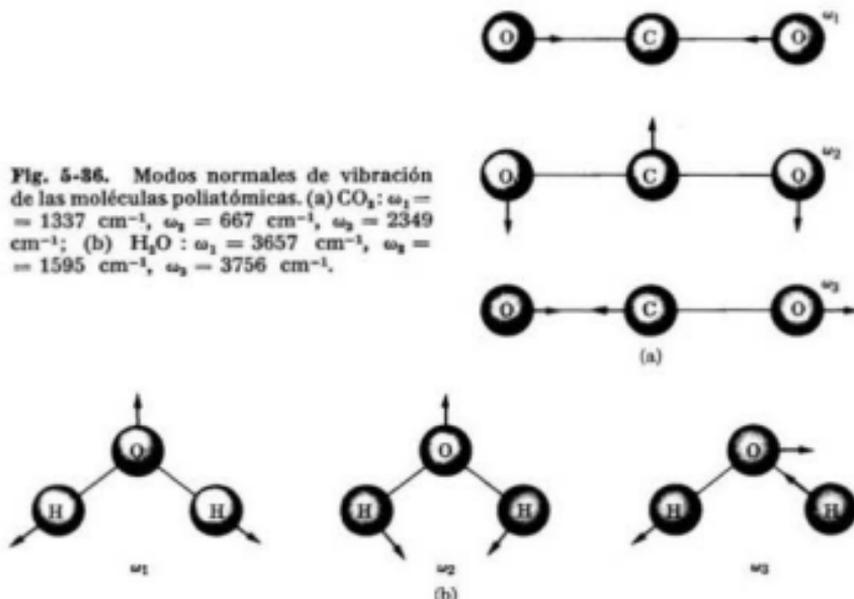
o sea

$$\tilde{\nu}_{v,r} = \tilde{\nu}_0 \pm 2B(l + 1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (5.19)$$

donde l se refiere al nivel rotacional inferior y B fue definido en la sección 5.7. Las frecuencias están distribuidas equidistantemente a ambos lados de la frecuencia central ν_0 separados una distancia $2Bc$. La línea de frecuencia ν_0 falta del espectro porque implicaría una transición con $\Delta l = 0$, que está prohibida. La fig. 5-34 ilustra las transiciones rotacionales posibles para la transición vibracional $\nu = 1 \rightarrow \nu = 0$. Las líneas con $\Delta l = +1$ constituyen lo que se llama rama R del espectro; la rama P del espectro está formada por las líneas con $\Delta l = -1$. Las intensidades de las diversas transiciones por absorción y emisión dependen de la población del nivel de energía inicial, la cual depende a su vez de la temperatura de la sustancia. Consideraremos este tema en la sección 12.5.

En la fig. 5-35 se muestra el espectro de rotación-vibración del HCl. Como ν_0 e l dependen de la masa de la molécula, los espectros de moléculas que tienen diferentes isótopos, como H^{35}Cl y H^{37}Cl , están ligeramente desplazados. Esto se aprecia claramente en la figura.

Fig. 5-86. Modos normales de vibración de las moléculas poliatómicas. (a) CO_2 : $\omega_1 = 1337 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_2 = 667 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_3 = 2349 \text{ cm}^{-1}$; (b) H_2O : $\omega_1 = 3657 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_2 = 1595 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_3 = 3756 \text{ cm}^{-1}$.



Se puede refinar nuestra teoría de la siguiente manera. La curva de energía potencial de la fig. 5-32 no corresponde a la de un oscilador armónico simple por lo que las oscilaciones son anarmónicas. Esto requiere términos adicionales en la ec. (5.18) para describir la energía vibracional en forma apropiada. Además, la separación de equilibrio de los núcleos cambia al variar la energía vibracional, a causa de la forma de la curva de la energía potencial. Esto da lugar a un cambio del momento de inercia y por lo tanto de la energía rotacional, lo cual constituye un efecto de interacción vibración-rotación. Todos estos términos de corrección se obtienen generalmente en forma empírica analizando el espectro de la molécula.

Los espectros vibracionales de moléculas poliatómicas son más complejos. El modo de analizarlos es mediante los *modos normales* de vibración de la molécula, que son vibraciones en las cuales todos los núcleos vibran con relaciones de fase constantes. En general, a cada modo normal corresponde una frecuencia de vibración diferente. Sin embargo, la simetría puede hacer que algunas frecuencias sean iguales o degeneradas. La fig. 5-36 muestra las vibraciones normales de dos moléculas simples: el dióxido de carbono, CO_2 , es una molécula lineal y H_2O es una molécula plana. Para que una frecuencia esté activa en el espectro vibracional o infrarrojo, la correspondiente vibración normal debe inducir un dipolo eléctrico oscilante en la molécula. Consideremos por ejemplo la molécula simétrica CO_2 , que no tiene momento dipolar eléctrico permanente. La oscilación ω_1 preserva

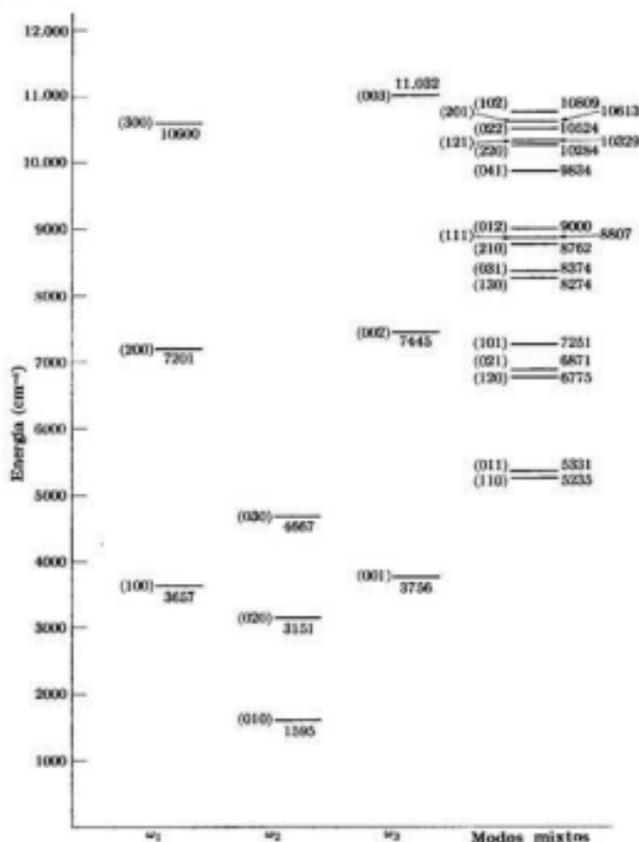


Fig. 5-37. Niveles vibracionales del H₂O en fase gaseosa. Las energías están expresadas en cm⁻¹. Los números entre paréntesis corresponden al modo vibracional (n₁n₂n₃).

la simetría de la molécula por lo que no induce un momento dipolar eléctrico; en consecuencia, el modo vibracional es espectroscópicamente inactivo. Por el contrario, ω_2 induce un momento dipolar paralelo al eje de la molécula y ω_1 un momento dipolar perpendicular a dicho eje; en consecuencia ambos son espectroscópicamente activos. El modo ω_2 es doblemente degenerado porque consiste en el ilustrado más uno en que los átomos oscilan perpendicularmente a la página.

Una molécula poliatómica tiene entonces varios grupos de niveles vibracionales de energía. Algunos están ilustrados en la fig. 5-37 para el caso de H₂O. Cada uno de estos niveles está asociado con sus niveles rotacionales correspondientes, lo cual hace que los espectros sean bastante complejos. El análisis de los espec-

tros de rotación-vibración de una molécula suministra una información valiosa acerca de sus dimensiones, la geometría, la energía de disociación, etc.

Un proceso interesante llamado *efecto Raman*, en honor del físico hindú C. V. Raman (1888-), está relacionado con las vibraciones y rotaciones moleculares, aunque es esencialmente un proceso de dispersión. Supongamos que iluminamos una muestra de gas con radiación monocromática de frecuencia ν . Si observamos la radiación dispersada en dirección perpendicular a la de incidencia, encontramos que la misma contiene, además de la frecuencia ν igual a la de la radiación primaria o incidente, que es la *dispersión coherente* o *de Rayleigh*, radiación de frecuencias $\nu \pm \nu_p$ (donde ν_p corresponde a una frecuencia del espectro vibracional de la molécula). Esto es lo que se denomina *dispersión de Raman*.

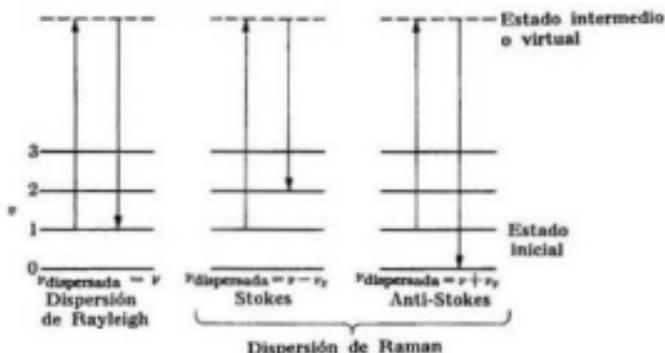


Fig. 5-38. Dispersión de Rayleigh y de Raman.

Podemos interpretar la dispersión de Raman de la siguiente manera: supongamos que una molécula está inicialmente en el estado vibracional ν (fig. 5-38). Cuando la molécula absorbe radiación de frecuencia ν pasa a un estado excitado. Si el estado excitado no es estacionario, la energía absorbida se re-emite inmediatamente. La molécula puede volver al estado inicial emitiendo radiación de la misma frecuencia que la de la luz incidente; esta es la dispersión de Rayleigh. La molécula puede también volver a otro nivel vibracional que, por la regla de selección $\Delta\nu = \pm 1$, debe ser el nivel inmediato superior o inferior al nivel inicial; esta es la dispersión de Raman. La radiación emitida tiene entonces frecuencia $\nu + \nu_p$ ó $\nu - \nu_p$. La línea con frecuencia $\nu - \nu_p$ se denomina *línea Stokes* y la de frecuencia $\nu + \nu_p$ *línea anti-Stokes*. También se ha observado el efecto Raman en el espectro rotacional. En este caso la regla de selección es $\Delta l = 0, \pm 2$.

EJEMPLO 5.7. Relación entre las constantes del potencial de Morse (ejemplo 5.3) y la frecuencia vibracional de una molécula diatómica.

Solución: Dado $E_p = D[1 - e^{-a(r-r_e)}]^2$, podemos usar el desarrollo

$$e^{-x} = 1 - x + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{6}x^3 + \dots,$$

y retener sólo los tres primeros términos, aproximación que es válida si x es pequeño. Haciendo $x = a(r - r_0)$ tenemos que

$$E_p = D[a(r - r_0) - \frac{1}{2}a^2(r - r_0)^2 + \dots]^2 \\ = Da^2(r - r_0)^2 - Da^3(r - r_0)^3 + \dots \quad (5.20)$$

Si las oscilaciones fueran armónicas deberíamos tener $E_p = \frac{1}{2}k(r - r_0)^2$. Luego, el primer término en la ec. (5.20) es la energía potencial armónica y podemos escribir $\frac{1}{2}k = Da^2$. Como $\omega_0 = \sqrt{k/\mu}$, tenemos

$$a^2 = \mu\omega_0^2/2D,$$

que da la constante a en función de constantes moleculares conocidas. El segundo término es la energía potencial anarmónica y contribuye términos adicionales a la energía vibracional dada en la ec. (5.16). Por ejemplo, se puede demostrar que es posible escribir la energía vibracional hasta el primer orden en la forma

$$E_v = (v + \frac{1}{2})h\omega_0 - (v + \frac{1}{2})^2x_e h\omega_0$$

donde $x_e = h\omega_0/4D$.

5.9 Transiciones electrónicas en moléculas

Una molécula puede tener varias configuraciones electrónicas o estados estacionarios. Para simplificar, consideremos una molécula diatómica; a cada estado electrónico corresponde una energía potencial similar a las de los estados electrónicos de H_2^+ mostradas en la fig. 5-7. En el estado electrónico excitado, los dos núcleos tienen en general distancias de equilibrio que son diferentes de la

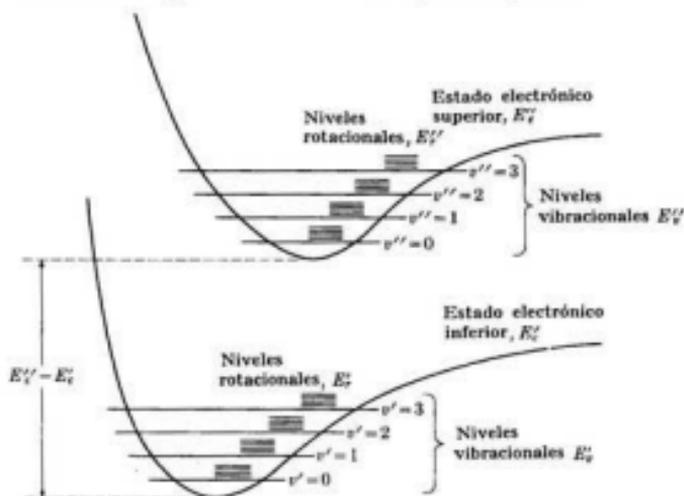


Fig. 5-39. Niveles rotacionales y vibracionales de energía asociados con dos estados electrónicos.

correspondiente al estado fundamental. En la fig. 5-39 están representadas dos de estas curvas de energía potencial. La separación de estas curvas es del orden de 1 a 10 eV. Luego, cuando una molécula experimenta una transición electrónica pasando de una configuración electrónica a otra, la radiación involucrada cae en la región visible o en la ultravioleta del espectro.

A un estado electrónico dado corresponden muchos estados vibracionales y a cada estado vibracional corresponden varios estados rotacionales. En primera aproximación podemos escribir la energía de la molécula en la forma

$$E = E_e + E_v + E_r = E_e + (v + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2}{2I} l(l + 1), \quad (5.21)$$

donde E_e se refiere a la energía electrónica en el mínimo de la energía potencial (ver fig. 5-39). Las tres energías pueden variar en una transición electrónica. En general, la frecuencia ω_0 y el momento de inercia I son diferentes para ambos estados electrónicos. Por lo tanto debemos escribir el cambio de energía en la transición electrónica en la forma

$$\Delta E = E'' - E' = \Delta E_e + \Delta E_v + \Delta E_r$$

donde $\Delta E_e = E_e'' - E_e'$ es el cambio de energía electrónica dada por la diferencia de energía entre los dos mínimos de los estados electrónicos,

$$\Delta E_v = E_v'' - E_v' = (v'' + \frac{1}{2})\hbar\omega_0'' - (v' + \frac{1}{2})\hbar\omega_0'$$

es la energía vibracional y

$$\Delta E_r = E_r'' - E_r' = \frac{\hbar^2}{2I''} l''(l'' + 1) - \frac{\hbar^2}{2I'} l(l + 1)$$

es el cambio de energía rotacional. La doble prima corresponde al estado de energía electrónica mayor y la prima al estado de energía electrónica menor. La frecuencia de la radiación emitida o absorbida en una transición electrónica es por lo tanto la suma de tres términos:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \nu_e + \nu_v(v'', v') + \nu_r(l'', l'),$$

donde $\nu_e = \Delta E_e/h$ se debe al cambio de energía electrónica, y $\nu_v(v'', v')$ y $\nu_r(l'', l')$ corresponden respectivamente a los cambios de energía vibracional y rotacional. La frecuencia ν_e es la mayor. Para una transición electrónica dada, los espectros consisten en una serie de *bandas*; cada banda corresponde a un valor dado de v'' y de v' y todos los valores posibles de l'' y l' .

Necesitamos reglas de selección para determinar los valores posibles de (v'', v') y (l'', l') . Si consideramos transiciones dipolares eléctricas, la regla de selección rotacional es

$$\Delta l = 0, \pm 1, \quad \text{no } l'' = 0 \leftrightarrow l' = 0.$$

Obsérvese que ahora $\Delta l = 0$ está permitido porque hay un cambio en la configuración de la molécula durante la transición y las consideraciones de paridad no entran en la misma forma que en los casos anteriores. Sin embargo, la transición $l = 0 \leftrightarrow l' = 0$ está prohibida porque si no lo estuviera sería imposible satisfacer el principio de conservación del momentum angular, ya que la radiación emitida o absorbida posee una unidad de momentum angular.

Otra regla de selección es que el espín de la molécula debe ser el mismo en los dos estados electrónicos involucrados en la transición; esto es, $\Delta S = 0$. Esta regla se debe a que las fuerzas dependientes del espín actuantes en la transición no son suficientemente fuertes para alterar el acoplamiento del espín de los electrones; sin embargo, esta regla de selección no se sigue rigurosamente.

La regla de selección vibracional es algo más complicada. Nótese que una transición electrónica ocurre en un tiempo del orden de 10^{-16} s mientras que el movimiento oscilatorio nuclear tiene un periodo de alrededor de 10^{-13} s, o sea mil veces mayor. En consecuencia, durante la transición electrónica la separación nuclear permanece esencialmente constante. Esto significa que la línea que une las posiciones inicial y final del núcleo en la fig. 5-39 al instante de la transición, debe ser vertical. Por otra parte, las transiciones más favorables deben ser aquellas para las cuales es más fácil ajustar rápidamente el movimiento nuclear a las nuevas condiciones electrónicas. En términos clásicos, las transiciones vibracionales más favorables deben ocurrir cuando la velocidad relativa nuclear es la misma en ambos estados al instante de la transición. Como la velocidad es cero en los extremos de la oscilación clásica, *las transiciones más probables ocurren cuando al instante de la transición los núcleos están en un extremo de su oscilación y a la misma distancia internuclear en el estado inicial y en el final*. En el lenguaje cuántico podríamos decir que las transiciones más probables son aquellas para las cuales la función de onda vibracional sufre la menor distorsión al instante de la transición. Como las funciones de ondas oscilatorias son muy parecidas en los extremos de oscilación clásicos (recordar la fig. 2-19), llegamos con el modelo cuántico a la misma conclusión que con el clásico.

Refirámonos a la fig. 5-40, por ejemplo, y supongamos que una molécula que está inicialmente en el estado vibracional $v' = 5$ del estado electrónico C' experimenta una transición por absorción yendo al estado electrónico C'' . Los estados finales vibracionales más probables se obtienen dibujando líneas verticales a y b en los extremos de la oscilación clásica y extendiéndolas hasta interceptar la curva C'' . La línea a cae cerca de $v'' = 1$, resultando una transición $v' = 5 \rightarrow v'' = 1$. La intersección de la línea b cae por encima de la energía de disociación por lo que daría lugar a la disociación de la molécula. Cuando la transición involucra el nivel de vibración más bajo ($v' \text{ ó } v'' = 0$) se debe dibujar la línea vertical por el centro de las oscilaciones, tal como c y d , resultando (en nuestro ejemplo) las transiciones

$$v' = 0 \rightarrow v'' = 4$$

y

$$v' = 2 \rightarrow v'' = 0.$$

La razón de esto es que el máximo de la función de onda del estado fundamental de un oscilador está en el centro (ver la fig. 2-19). Hemos considerado transiciones por absorción; el mismo razonamiento se aplica a las transiciones por emisión. En consecuencia las transiciones vibracionales asociadas con las transiciones electrónicas no satisfacen la regla de selección $\Delta v = \pm 1$ por lo que v puede sufrir un cambio de varias unidades.

La regla que acabamos de explicar para determinar la transición vibracional en una transición electrónica se conoce como *principio de Franck-Condon*. James Franck la formuló en términos clásicos y Edward U. Condon la reformuló conforme a la mecánica cuántica alrededor de 1926.

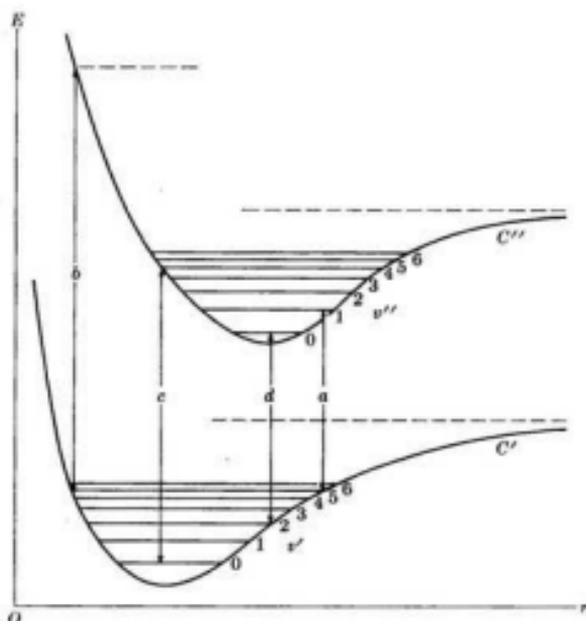


Fig. 5-40. Transiciones electrónicas permitidas conforme al principio de Franck-Condon.

5.10 Conclusión

En nuestro estudio de la estructura molecular sólo hemos considerado los aspectos más importantes. Hay muchos detalles que no hemos mencionado. Por ejemplo, los espines nucleares tienen influencia en los niveles de energía moleculares. En las moléculas más simples, H_2^+ y H_2 , los dos protones pueden tener sus espines paralelos o antiparalelos, dando lugar al *ortohidrógeno* y al *parahidrógeno*.

La simetría molecular juega un rol muy importante en la determinación de las vibraciones normales posibles y en la de las transiciones permitidas; empero, un estudio de la simetría molecular está por encima del nivel de este libro.

En el caso de moléculas poliatómicas los espectros pueden ser tan complejos que resulte imposible clasificarlos como lo hemos hecho con los de las moléculas diatómicas en la sección 5.9. Sin embargo, esta complejidad es útil en el sentido que permite identificar un compuesto dado observando su espectro. Por otra parte, ciertos grupos atómicos presentan espectro electrónicos y vibracionales bien definidos, por lo que la observación de las frecuencias correspondientes es una indicación de la presencia de tales grupos en una molécula.

Podemos concluir diciendo que una de las herramientas más poderosas para determinar la estructura molecular es el análisis de los espectros moleculares.

Bibliografía

1. "The Force Between Molecules", B. Derjaguin, *Sci. Am.*, julio de 1960, pág. 47
2. "Some Aspects of Molecular Physics", J. Levelt, *Am. J. Phys.* **28**, 192 (1960)
3. "Chemistry of the Noble Gases", H. Selig, J. Malm y H. Claassen, *Sci. Am.*, mayo de 1964, pág. 66
4. "The Zeeman Effect in Molecules", C. Quade, *Am. J. Phys.* **32**, 634 (1964)
5. *The Scientific Endeavor*, Rockefeller Institute Press, New York, 1965; "The Architecture of Molecules", por L. Pauling
6. *Symmetry in Chemistry*, P. Dorain. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1965
7. *The Structure of Molecules*, G. Barrow. Benjamin, New York, 1964.
8. *Electrons and the Covalent Bond*, H. Gray. Benjamin, New York, 1965
9. *Elements of Wave Mechanics*, N. Mott. Cambridge University Press, Cambridge, 1962, cap. 5, secs. 2.3, 3, 4.2, 4.3, 4.4, 4.5 y 4.6
10. *Structure of Matter*, W. Finkelburg. Academic Press, New York, 1964, cap. 4, sec. 7; cap. 6
11. *Quantum Theory of Matter*, J. Slater. McGraw-Hill, New York, 1951, caps. 8 y 9
12. *Elementary Introduction to Molecular Spectra*, B. Bak. Interscience, New York, 1960
13. *Chemical Binding and Structure*, J. Spicc. Macmillan, New York, 1964
14. *Wave Mechanics and Valency*, J. Linnet. Methuen, London, 1960
15. *The Chemical Bond*, tercera edición, L. Pauling. Cornell University Press, Ithaca, N. Y., 1967

Problemas

5.1 La energía del estado fundamental del H_2^+ respecto al sistema compuesto de hidrógeno en su estado fundamental y H^+ a distancia infinita es $-2,65$ eV. Calcular: (a) la energía del H_2^+ respecto al sistema



a distancia infinita; (b) la energía del sistema $H_2^+ + e$ a separación infinita respecto al sistema $H + H$ también a distancia infinita y con ambos átomos en su estado fundamental; (c) la energía de ionización del H_2 si la energía de disociación de esta molécula en dos átomos de hidrógeno en su estado fundamental es $4,48$ eV. Comparar el resultado de (c) con la energía de ionización del hidrógeno atómico.

5.2 Calcular la contribución de la repulsión coulombiana entre los dos núcleos a la energía del H_2^+ en su estado fundamental. Calcular la energía debida a la interacción del electrón con los núcleos. [Sugerencia: Utilizar los datos del problema precedente y recordar que la distancia de equilibrio entre los dos núcleos en el H_2^+ es $1,06$ Å.]

5.3 Las energías de disociación y de ionización se expresan frecuentemente en kcal mole⁻¹. Probar que un kcal mole⁻¹ equivale a $4,338 \times 10^{-3}$ eV. Expresar la energía de disociación de H_2 en kcal mole⁻¹.

5.4 Explicar por qué la longitud del enlace del H_2^+ es $1,06$ Å, mientras que H_2 tiene una longitud de enlace más corta igual a $0,74$ Å. Explicar también por qué la energía de disociación del H_2 ($103,2$ kcal mole⁻¹) es menos del doble de la energía de disociación del H_2^+ ($61,06$ kcal mole⁻¹).

5.5 Explicar por qué el ion H_2^- es menos estable que el ion He_2^+ si ambos tienen la misma configuración electrónica. ¿Cuál de los dos debería tener la distancia internuclear mayor?

5.6 Hallar la energía del Li_2 respecto al sistema $2Li^+ + 2e$, con las cuatro partículas a distancia infinita. La energía de ionización del litio es $5,39$ eV. Calcular la energía de repulsión coulombiana de los iones Li^+ a la distancia de equilibrio, $2,67$ Å. Calcular luego la energía de los dos electrones de valencia.

5.7 Discutir la configuración electrónica y la estructura del enlace en (a) Al_2 , (b) S_2 y (c) Cl_2 . En cada caso, escribir el símbolo del término del estado fundamental.

5.8 Discutir la configuración electrónica y la estructura del enlace de la molécula NO. Comparar con la molécula N_2 . Decidir cuál de las dos moléculas es más estable.

5.9 Escribir las configuraciones electrónicas de las siguientes moléculas diatómicas heteronucleares: (a) LiH, (b) CN, (c) SO, (d) ClF y (e) HI. Determinar si las moléculas son polares y en caso afirmativo identificar cuál extremo de la molécula es positivo y cuál negativo.

5.10 Calcular la energía que se libera cuando el AlCl y el AlBr se disocian en átomos neutros. Las separaciones de equilibrio de estas moléculas son $2,13$ Å y $2,30$ Å respectivamente. Los valores experimentales correspondientes son $71,5$ kcal mole⁻¹ y $55,3$ kcal mole⁻¹. [Sugerencia: Ver en el ejemplo 5.5 un cálculo similar para el NaCl.]

5.11 Cuando un átomo de hidrógeno captura un electrón para transformarse en H^- , se libera una energía de $0,749$ eV. La energía de ionización del Li es $5,39$ eV. Calcular la energía de disociación de LiH teniendo en cuenta que la distancia internuclear de equilibrio es $1,60$ Å.

5.12 Una expresión empírica aceptable para la energía potencial en el enlace iónico es

$$E_p = -\frac{v^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + b e^{-3,3 \times 10^{10} r}$$

donde v es la carga de los iones y b es una constante que se determina a partir de los valores experimentales de la energía de disociación. Hallar b para el KCl teniendo en cuenta que la distancia de equilibrio en esta molécula es $2,79 \times 10^{-10}$ m. Representar la energía potencial. Hallar la energía de disociación del KCl en K^+ y Cl^- . Calcular la energía necesaria para la disociación en productos neutros.

5.13 Una expresión empírica bastante precisa para calcular la energía potencial de dos iones en un enlace iónico es

$$E_p(r) = -\frac{v e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + b e^{-ar} - d/r^6,$$

donde v es la carga de los iones y a , b y d son constantes que se obtienen experimentalmente. Para el LiF las constantes son: $a = 3,25 \text{ \AA}^{-1}$, $b = 895 \text{ eV}$ y $d = 2,68 \text{ eV \AA}^6$. Determinar la energía necesaria para disociar una molécula de LiF en sus dos iones. (La longitud de unión en el LiF es $1,54 \text{ \AA}$.) Calcular también la energía necesaria para la disociación en dos átomos neutros. La energía de ionización del Li es $5,39 \text{ eV}$ y la afinidad electrónica del flúor es $3,45 \text{ eV}$.

5.14 Demostrar que la función de onda

$$\psi = N(s + \alpha p_x + \beta p_y + \gamma p_z)$$

tiene su máximo en la dirección del vector $\alpha = u_x \alpha + u_y \beta + u_z \gamma$ y su mínimo en la dirección opuesta. En consecuencia dos funciones de onda híbridas correspondientes a los vectores α y α' tienen su máximo en direcciones que forman el mismo ángulo que α y α' . Escribir el vector α para cada una de las funciones de onda híbridas sp^3 y sp^3 introducidas en la sección 5.5. Probar que en el caso sp^3 los vectores apuntan hacia los vértices de un tetraedro formando ángulos de $109^\circ 28'$, y que en el caso sp^2 los vectores están en el plano XY formando ángulos de 120° . [Sugerencia: Notar que el vector $u_x p_x + u_y p_y + u_z p_z$ es proporcional a r .]

5.15 Demostrar que las cuatro funciones de onda híbridas sp^3 son ortogonales. Hacer lo mismo para las funciones de onda sp^2 .

5.16 Discutir la estructura de (a) C_2H_2 , (b) C_2H_4 y (c) C_2H_6 .

5.17 Analizar la estructura de las siguientes moléculas: (a) CO_2 , (b) CS_2 , (c) $CSTe$, (d) C_3 , (e) $CdCl_2$, (f) OCl_2 , (g) $ONCl$, (h) $SnCl_4$, (i) S_2^{2-} y (j) CN_2^{2-} . Indicar cuáles moléculas son lineales y cuáles forman ángulo.

5.18 Analizar la estructura de las siguientes moléculas: (a) AsH_3 , (b) SbF_3 , (c) BO_2^- , (d) OH_2^+ , (e) PCl_3 , (f) SeO_2^{2-} , (g)

BrO_3^- , (h) SiF_4 e (i) PF_5 . Indicar cuáles moléculas son planas y cuáles piramidales.

5.19 Analizar la estructura de BH_3 y BH_4^- , indicando si las moléculas son planas o piramidales.

5.20 Discutir las moléculas de H_2O y NH_3 utilizando funciones de onda con hibridización sp^3 para el oxígeno y el nitrógeno respectivamente. ¿Cree usted que ésta es una descripción de estas moléculas mejor que la presentada en el texto?

5.21 Analizar la estructura de unión de CH_3^+ y H_3O^+ .

5.22 Discutir la estructura de unión de la molécula H_2CO . ¿Es plana la molécula?

5.23 El momento dipolar eléctrico de H_2O es $6,2 \times 10^{-30} \text{ m C}$. Hallar el momento dipolar correspondiente a cada unión O—H. Teniendo en cuenta que la longitud de unión de O—H es $0,958 \text{ \AA}$, ¿qué fracción del electrón del hidrógeno se ha transferido al átomo de oxígeno?

5.24 La longitud efectiva total de la molécula conjugada $CH_2=(CH=CH)_4$, CH_3 es $9,8 \text{ \AA}$. Hacer el gráfico de los niveles de energía ocupados por los electrones π . Hallar la energía y la longitud de onda de los fotones absorbidos al excitarse uno de los electrones π más altos.

5.25 La molécula de caroteno β es una molécula conjugada que tiene 22 electrones π . Se ha encontrado que esta molécula absorbe fuertemente radiación a 4510 \AA . Estimar la longitud total de la molécula.

5.26 Demostrar que el momento de inercia de una molécula diatómica respecto a un eje perpendicular a la línea de los núcleos y que pasa por el centro de masa es $I = \mu r_0^2$, donde μ es la masa reducida de la molécula y r_0 es la distancia internuclear.

5.27 Las líneas adyacentes en el espectro rotacional puro de $^{35}Cl^{19}F$ están separadas por una frecuencia de $1,12 \times 10^{10} \text{ Hz}$. ¿Cuál es la distancia interatómica de esta molécula?

5.28 (a) Calcular la energía y la longitud de onda del fotón absorbido cuando una molécula de $^{200}Hg^{81}Cl$ ($r_0 = 2,23 \text{ \AA}$)

hace las transiciones rotacionales $l = 0 \rightarrow l = 1$ y $l = 1 \rightarrow l = 2$. (b) ¿En qué región del espectro electromagnético se encuentran estas líneas?

5.29 Suponiendo que la separación de equilibrio en las moléculas H^{35}Cl y H^{37}Cl es la misma e igual a $1,27 \text{ \AA}$, calcular para cada una de ellas: (a) la constante B para los niveles rotacionales, (b) la energía de los dos primeros niveles excitados rotacionales, (c) las frecuencias y longitudes de onda correspondientes a las transiciones $l = 0 \rightarrow l = 1$ y $l = 1 \rightarrow l = 2$, y (d) la diferencia de frecuencia entre líneas sucesivas. Comparar los resultados con la fig. 5-31.

5.30 Calcular la energía de los tres primeros estados excitados rotacionales en CO y CO_2 . Determinar la longitud de onda de los fotones absorbidos en las transiciones entre esos niveles de energía.

5.31 Los niveles rotacionales de energía de una molécula que tiene dos momentos principales de inercia iguales están dados por

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2I_1} L^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_1} \right) L_z^2,$$

donde I_1 corresponde a los ejes X e Y , I_2 corresponde al eje Z , y

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2, \quad L_z = m\hbar.$$

Empleando esta ecuación, estimar la posición relativa de los niveles rotacionales de energía de una molécula que tiene (a) $I_2 = 0,8I_1$, (b) $I_2 = 1,2I_1$. Representar gráficamente los niveles como múltiplos de $\hbar^2/2I_1$.

5.32 Una molécula diatómica no es rigurosamente rígida y la distancia internuclear aumenta, debido a un efecto centrífugo, a medida que aumenta el momentum angular de la molécula. (a) ¿Cómo afectaría este estiramiento a los niveles de energía en comparación con los valores dados por la ec. (5.12)? (b) Una expresión empírica para la energía rotacional es

$$E_{\text{rot}} = (\hbar^2/2I) \{l(l+1) - \delta[l(l+1)]^2\},$$

donde δ es la constante de estiramiento. Obtener una expresión para las frecuencias correspondientes a las transiciones

entre los niveles rotacionales. Comparar con la ec. (5.15) y ver si se puede reconocer el efecto de estiramiento en la fig. 5-31.

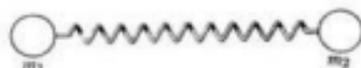


Figura 5-41

5.33 Dos cuerpos de masas m_1 y m_2 respectivamente están unidos con un resorte de constante elástica k (fig. 5-41). Mostrar que si se estira el resorte y se lo suelta, las masas oscilan con una frecuencia $\nu = (1/2\pi)\sqrt{k/\mu}$, donde μ es la masa reducida del sistema.

5.34 Calcular la energía de los tres niveles más bajos de vibración en el HF , dado que la constante de fuerza es $9,7 \times 10^8 \text{ N m}^{-1}$. Hallar el número de onda de la radiación absorbida en la transición $\nu = 0 \rightarrow \nu = 1$.

5.35 El espectro infrarrojo del CO a baja resolución, presenta una banda de absorción centrada en 2170 cm^{-1} . Hallar la constante de fuerza en el CO . Representar a escala la curva de energía potencial.

5.36 Calcular el cociente entre las frecuencias rotacionales de las moléculas de $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ y $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$ suponiendo que la constante de fuerza es la misma para ambas moléculas.

5.37 ¿Cuál es la constante de fuerza de la molécula de HCl si la frecuencia de vibración es $9 \times 10^{13} \text{ Hz}$? Hallar también la energía en el punto cero.

5.38 Hallar las frecuencias vibracionales de HD y D_2 teniendo en cuenta que la molécula de H_2 absorbe radiación infrarroja de longitud de onda $2,3 \times 10^{-6} \text{ m}$ correspondiente a una transición vibracional con $\Delta\nu = 1$, sin cambio de las energías rotacional y electrónica. Suponer que la constante de fuerza es la misma para las tres moléculas. Comparar con los valores experimentales.

5.39 Las tres frecuencias vibracionales de CO_2 son $667,3 \text{ cm}^{-1}$, $1388,4 \text{ cm}^{-1}$ y $2349,4 \text{ cm}^{-1}$. Hacer un esquema de los primeros niveles vibracionales de energía de esta molécula.

5.40 La molécula CO tiene una transición electrónica que produce varias bandas en el visible (alrededor de 6000 Å). Estimar la separación entre

líneas rotacionales adyacentes en cada banda. ¿Es de esperar que la banda aparezca continua en un espectroscopio de baja resolución?

6

SOLIDOS

- 6.1 *Introducción*
- 6.2 *Tipos de sólidos*
- 6.3 *Teoría de bandas*
- 6.4 *Modelo de electrones libres*
- 6.5 *Movimiento electrónico en una estructura periódica*
- 6.6 *Conductores, aisladores y semiconductores*
- 6.7 *Teoría cuántica de la conductividad eléctrica*
- 6.8 *Transiciones radiativas en sólidos*

6.1 Introducción

La materia en su conjunto, tal como afecta a nuestros sentidos, es un agregado de un gran número de átomos. Vulgarmente hablando, estos agregados se presentan en tres estados físicos o fases: gases, líquidos y sólidos. En los gases la distancia media entre moléculas es mayor que el tamaño de éstas y las fuerzas intermoleculares son más débiles que las fuerzas que mantienen unidos a los átomos en la molécula. Luego, en los gases las moléculas conservan su individualidad. En contraposición, en un sólido, los átomos (o moléculas) están fuertemente unidos y mantenidos en posiciones más o menos fijas por fuerzas de origen electromagnético, que son del mismo orden de magnitud que las involucradas en las uniones moleculares. En consecuencia, la forma y volumen de un sólido permanecen esencialmente constantes hasta tanto las condiciones físicas, tales como la presión y la temperatura, no experimenten cambio apreciable. Los líquidos están entre los gases y los sólidos. Sin embargo, la teoría de líquidos está todavía incompleta y no será considerada en este texto.

En la mayoría de los sólidos los átomos (o moléculas) no existen como entidades aisladas; antes bien sus propiedades son modificadas por los átomos vecinos. El ordenamiento regular de los átomos o grupos de átomos es una de las características más importantes de los sólidos; esto es, la estructura de los sólidos presenta una regularidad o periodicidad constituyendo lo que se denomina una *red cristalina*; por consiguiente, para comprender la estructura de un sólido, es necesario estudiar solamente la unidad básica o celda de la red, ya que todas las propiedades se repiten de una celda a la otra. Uno de los métodos más efectivos para analizar una estructura cristalina es por medio de la difracción de rayos X o de neutrones.

Desde el punto de vista de la mecánica cuántica, la determinación de la estructura de un sólido no difiere fundamentalmente de la de una molécula. Consiste en hallar una configuración estable de los núcleos y electrones los cuales están sujetos a sus interacciones electrónicas y se mueven de acuerdo a las leyes de la mecánica cuántica. Las dos diferencias principales entre la estructura de un sólido y la de una molécula son el gran número de átomos involucrados y la regularidad en sus arreglos. Para estudiar la estructura de un sólido se usan varios tipos de aproximaciones, dependiendo de los factores dominantes involucrados en cada sólido. En este capítulo analizaremos algunos de estos métodos y los aplicaremos para explicar ciertas propiedades de los sólidos, dejando algunas consideraciones de naturaleza estadística para el capítulo 13.

6.2 Tipos de sólidos

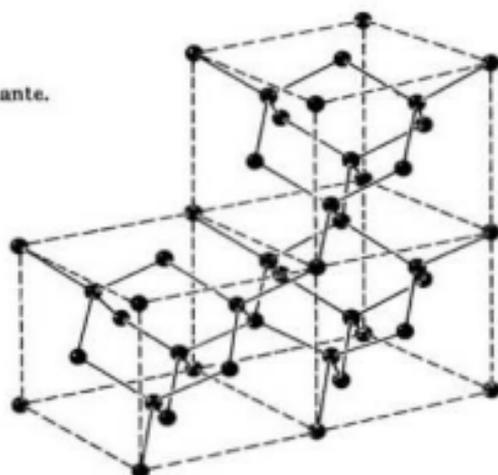
Se puede clasificar a los sólidos según el tipo predominante de enlace. En esta sección estudiaremos los tipos más representativos de sólidos.

(1) **Sólidos covalentes.** En un sólido covalente los átomos están ligados entre sí por enlaces direccionales localizados, similares a los que encontramos

en el estudio de la molécula H_2 . La red cristalina está determinada por la orientación y naturaleza de los enlaces direccionales. Un caso típico es el diamante, en el cual los cuatro electrones ligantes de cada átomo de carbono están orientados, como se ilustró previamente en la fig. 5-18, por medio de funciones de onda híbridas sp^3 , con lo cual resulta la estructura cristalina que se indica en la fig. 6-1. Cada esfera representa un núcleo de carbono y cada barra un par de electrones de enlace localizados. La separación entre dos átomos de carbono es $1,54 \times 10^{-10}$ m.

Los sólidos covalentes, debido a su estructura electrónica rígida, tienen varias características macroscópicas comunes. Son extremadamente duros y difíciles de

Fig. 6-1. Red cristalina del diamante.



deformar. Todos son malos conductores del calor y la electricidad porque no hay electrones libres que transporten la energía o carga de un lugar a otro. Además, un sólido covalente requiere una cantidad de energía relativamente grande para producir vibraciones en todo el cristal, debido a la rigidez de los enlaces. Por lo tanto, estas vibraciones tienen una frecuencia alta. Análogamente las energías de excitación electrónica de sólidos covalentes son del orden de unos pocos electronvolts (por ejemplo, la primera energía de excitación electrónica del diamante es de alrededor de 6 eV). Esta energía de excitación electrónica es relativamente grande si se compara con la energía térmica media (del orden de kT), la cual a temperatura ambiente (298 K) es aproximadamente de $2,4 \times 10^{-2}$ eV; en consecuencia los sólidos covalentes están normalmente en su estado electrónico fundamental. Muchos sólidos covalentes son transparentes, el diamante especialmente, debido a que la diferencia entre su primer estado electrónico y el fundamental es mayor que las energías fotónicas en el espectro visible, que yace entre 1,8 y 3,1 eV.

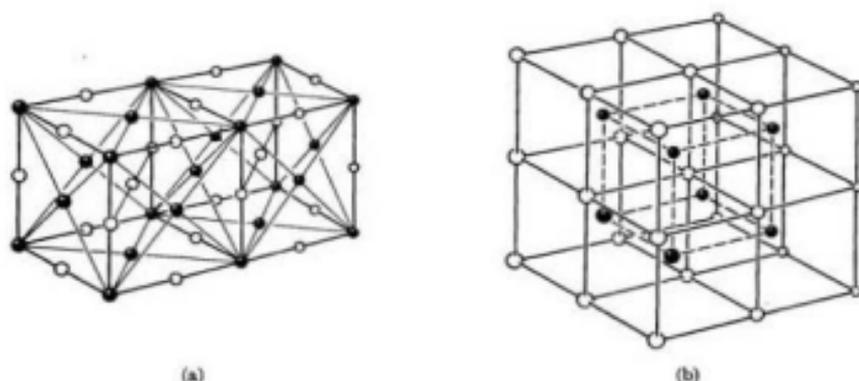


Fig. 6-2. (a) Red cristalina del NaCl; (b) red del CsCl.

(2) **Cristales iónicos.** En contraposición están los cristales iónicos, que consisten en un arreglo regular de iones positivos y negativos resultantes de la transferencia de un electrón (o más) de una clase de átomo a otro. Este es el caso, por ejemplo, del NaCl y del CsCl, cuya estructura cristalina se muestra en la fig. 6-2. La separación entre los átomos de sodio y cloro es $2,81 \times 10^{-10}$ m aproximadamente, mientras que la distancia mínima entre átomos idénticos es $3,97 \times 10^{-10}$ m. Los iones se disponen de tal modo que se produce una configuración estable bajo sus interacciones electrónicas mutuas.

Estos sólidos son además malos conductores del calor y la electricidad debido a que carecen de electrones libres. Empero, a temperaturas altas los iones pueden adquirir alguna movilidad con lo cual resulta una mejor conductividad eléctrica. Usualmente los cristales iónicos son duros, frágiles y tienen un alto punto de fusión debido a las fuerzas electrostáticas relativamente fuertes entre los iones.

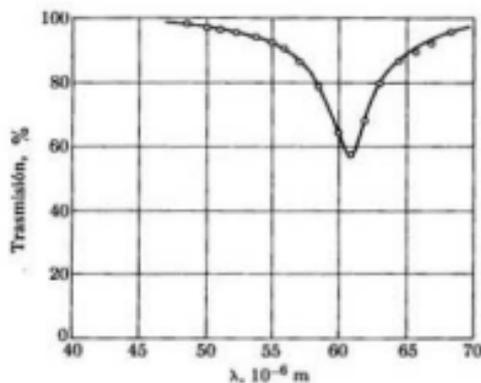
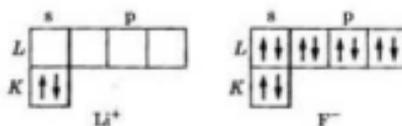


Fig. 6-3. Trasmisión de radiación infrarroja a través de una película de NaCl. [Adaptación de: R. Barnes, *Z. Physik*, 75, 723 (1962).]

Fig. 6-4. Configuraciones electrónicas del Li^+ y del F^- .



Algunos cristales iónicos absorben fuertemente radiación electromagnética en la región infrarroja del espectro. Esta propiedad está asociada con la energía necesaria para excitar las vibraciones de la red. Dicha energía es generalmente menor para los cristales iónicos que para los covalentes, debido a que sus fuerzas de unión son relativamente más débiles. La fig. 6-3 ilustra cómo se transmite la radiación infrarroja a través de una película delgada ($1,7 \times 10^{-7}$ m) de cloruro de sodio; la máxima absorción ocurre a la longitud de onda de $6,11 \times 10^{-6}$ m o a una frecuencia de $4,91 \times 10^{13}$ Hz, correspondiente a fotones con una energía de $2,03 \times 10^{-2}$ eV.

La mayoría de los cristales iónicos son diamagnéticos, porque los iones no tienen momento magnético, ya que su estructura es de capas completas con todos

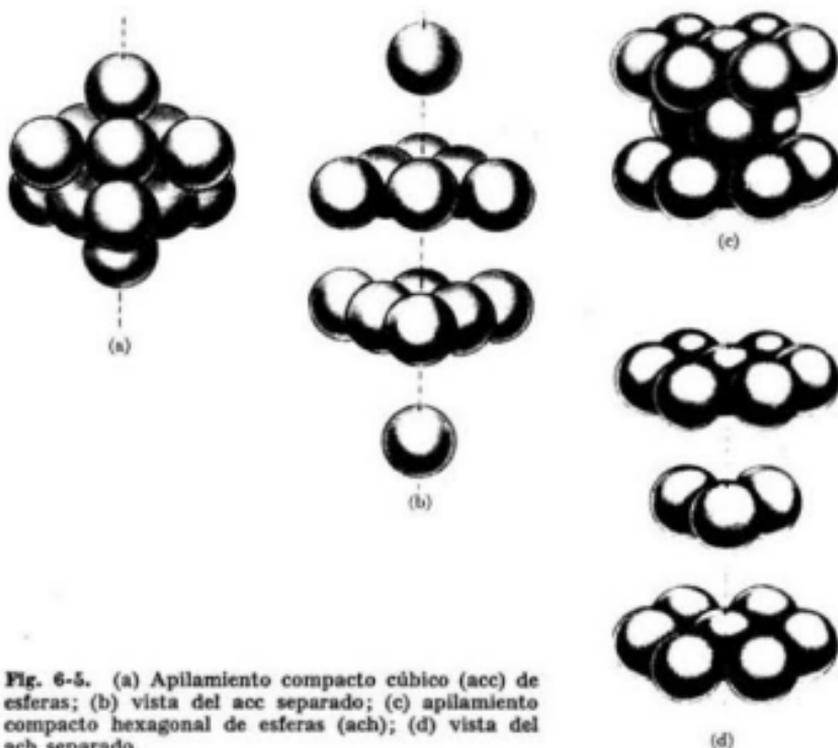
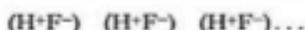


Fig. 6-5. (a) Apilamiento compacto cúbico (acc) de esferas; (b) vista del acc separado; (c) apilamiento compacto hexagonal de esferas (ach); (d) vista del ach separado.

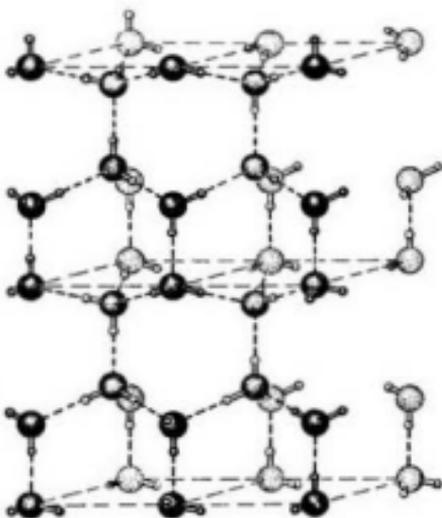
los electrones apareados. Por ejemplo, en el LiF, los iones Li^+ y F^- tienen la configuración que se muestra en la fig. 6-4, que es semejante a las configuraciones de los gases nobles He y Ne, respectivamente. (Recordar la fig. 4-7). Esta similitud se refleja también en otra propiedad importante. Los iones tienen simetría esférica, y de este modo sus enlaces no tienen direcciones preferenciales, como las de los sólidos covalentes. Por consiguiente, los iones se ordenan en el cristal como si fueran esferas apiladas en forma compacta. Hay un infinito número de modos de apilar esferas. Dos de los más comunes están representados en la fig. 6-5; la pila cúbica compacta (pcc) y la pila hexagonal compacta (phc).

(3) **Sólidos con enlaces de hidrógeno.** Estrechamente relacionados con los cristales iónicos están los sólidos con enlaces de hidrógeno, que se caracterizan por tener moléculas fuertemente polarizadas con uno o más átomos de hidrógeno, tales como el agua, H_2O , y el ácido fluorhídrico, HF. Los iones de hidrógeno positivos, debido a que son relativamente pequeños, pueden atraer el extremo negativo de otras moléculas, formando cadenas tales como



Esto es particularmente interesante en el caso del hielo, en el cual las moléculas de agua tienen el arreglo tetraédrico que se muestra en la fig. 6-6. La estructura relativamente abierta del hielo explica el mayor volumen que el hielo tiene en comparación con el del agua en la fase líquida.

(4) **Sólidos moleculares.** Estos sólidos están hechos de sustancias cuyas moléculas no son polares. En estas moléculas todos los electrones están apareados,



de tal modo que no se puede formar enlaces covalentes entre átomos de dos moléculas diferentes. En este tipo de sólidos las moléculas conservan su individualidad. Ellas están ligadas por las mismas fuerzas intermoleculares que existen entre las moléculas de un gas o un líquido: las *fuerzas de van der Waals*, las cuales son muy débiles y corresponden aproximadamente a las fuerzas entre dos dipolos eléctricos.

Fig. 6-6. Ordenamiento de las moléculas de agua en el hielo. [De: L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond*, Cornell University Press, Ithaca, N. Y., 1960; con permiso del editor.]

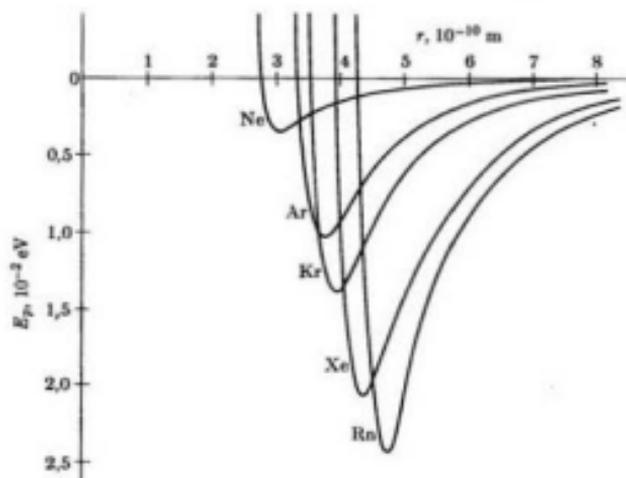


Fig. 6-7. Energía potencial interatómica de Van der Waals para los gases nobles.

Esto puede ser explicado como sigue: aunque en promedio estas moléculas no tienen un momento dipolar eléctrico permanente, sus configuraciones electrónicas a cada instante pueden dar lugar a un dipolo eléctrico instantáneo. Las fuerzas de van der Waals provienen de la interacción de estos dipolos eléctricos instantáneos. Las razones anteriores explican por qué los sólidos moleculares no son conductores del calor y la electricidad, tienen un punto de fusión muy bajo y son muy compresibles y deformables. Ejemplos de sólidos moleculares son CH_4 , Cl_2 , I_2 , CO_2 , C_6H_6 , etc. en sus respectivos estados sólidos. Los gases nobles, cuyas capas externas están completas, se solidifican como sólidos moleculares. La fig. 6-7 ilustra las curvas de energía potencial que describen la interacción entre dos átomos de un gas noble en el estado sólido.

(5) **Metales.** Finalmente están los metales, que son sólidos de gran importancia práctica y teórica. Los metales son elementos que tienen energías de ionización relativamente pequeñas y cuyos átomos sólo tienen unos pocos electrones débilmente ligados en sus capas incompletas más externas. Estos electrones externos débilmente ligados son fácilmente puestos en libertad usando la energía que se libera en el momento de formarse el cristal. De este modo, los metales tienen una red regular compuesta de los iones positivos esféricamente simétricos que se forman cuando los electrones más externos quedan en libertad. Dentro de esta estructura hay un "gas" electrónico formado por los electrones liberados y que son los responsables de la unión. Estos electrones se mueven más o menos libremente por la red cristalina y por lo tanto no están localizados.

Los sólidos metálicos tienen excelente conductividad térmica y eléctrica, de lo cual son responsables los electrones libres; la razón es que éstos absorben

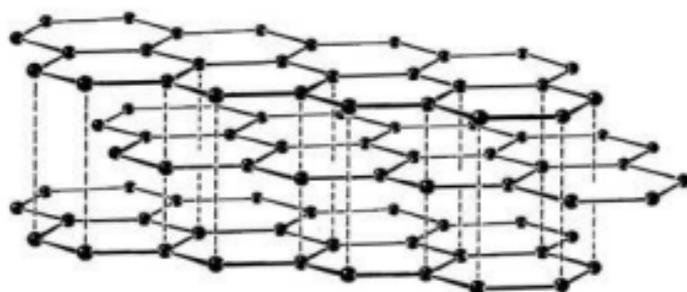


Fig. 6-8. Red del grafito.

fácilmente energía de la radiación electromagnética o de las vibraciones de la red — por más pequeñas que sean — aumentando así sus respectivas energías cinéticas y su movilidad. Por esta misma razón los metales son también opacos, ya que los electrones libres pueden absorber fotones en la región visible y ser excitados hasta uno de los muchos estados cuánticos cercanos disponibles. Los electrones libres son también responsables en gran medida de otras características de los metales tales como su alto coeficiente de reflexión para las ondas electromagnéticas, especialmente en las regiones de radiofrecuencia e infrarrojo. Las fuerzas que mantienen unida la red del metal son de simetría esférica; por lo tanto estas redes se parecen a los apilamientos compactos de esferas discutidos en los cristales iónicos.

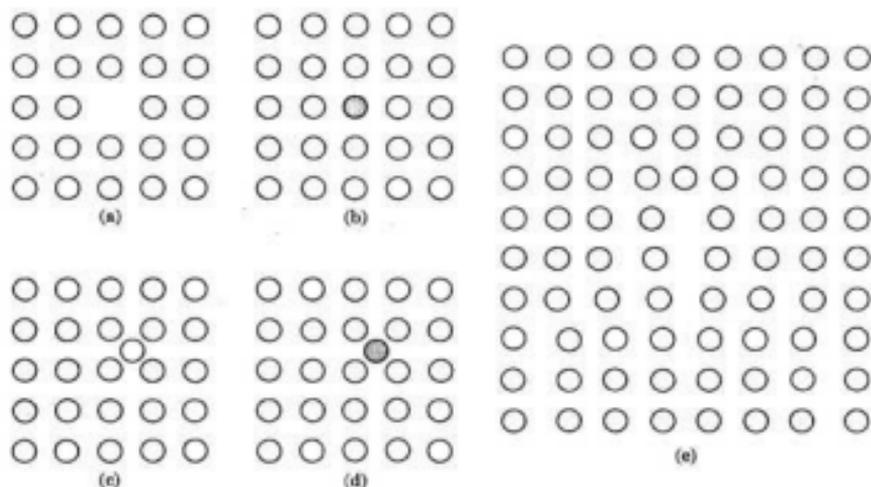


Fig. 6-9. Imperfecciones de una red cristalina.

La clasificación precedente de tipos de sólidos no debe ser tomada muy estrictamente; algunos sólidos son una mezcla de más de un tipo. Un ejemplo interesante es el grafito (en la fig. 6-8 se muestra la red del grafito), que consiste en capas de átomos de carbono dispuestas en forma de hexágono. Los átomos de una capa están ligados por enlaces σ covalentes localizados los cuales usan funciones de onda híbridas sp^2 y enlaces π no localizados, como en el benceno (sección 5.6). Los electrones de enlace π no localizados están en libertad de moverse paralelamente a las capas, lo que explica la conductividad eléctrica paralela a las capas del grafito y la no conductividad en la dirección perpendicular a ellas. Capas sucesivas de átomos actúan como macromoléculas. Estas capas están unidas entre sí por fuerzas débiles de van der Waals, exactamente como lo están los cristales moleculares, lo que explica la naturaleza escamosa y resbaladiza del grafito. Es por esta estructura que el grafito se usa como lubricante. La longitud de los enlaces sp^2 en el grafito es $1,42 \times 10^{-10}$ m y la separación entre las capas es $3,35 \times 10^{-10}$ m.

La estructura de cada tipo de sólido que hemos descrito está determinada por la estructura electrónica de los átomos componentes, la cual indica el número de electrones disponible para los enlaces, así como la energía necesaria para ajustar el movimiento de los electrones a las condiciones que prevalecen en la red (condiciones que son diferentes de las de los átomos aislados). En general, para formar un sólido, se requiere una cantidad dada de energía con el fin de modificar el movimiento de los electrones; sin embargo, en el proceso de formación de la red se libera mucha más energía que la requerida para modificar dicho movimiento.

Las redes cristalinas no son perfectas y sus imperfecciones se pueden deber a varias causas. La fig. 6-9 ilustra algunas de las imperfecciones típicas. En (a) tenemos una *vacante* dejada por un átomo que falta, mientras que en (b) tenemos una *impureza sustitucional* reemplazando un átomo de la red. En (c) y (d) se muestran imperfecciones debidas a un *átomo intersticial*, ya del mismo tipo o de una impureza. Finalmente (e) muestra la *dislocación de arista*, que se podría ver como si desde el tope de la red se hubiese empujado una capa extra de átomos hasta medio camino. Las imperfecciones de la red tienen un efecto muy importante en las propiedades eléctricas, elásticas y ópticas de los sólidos.

EJEMPLO 6.1. Cálculo de la energía potencial interna de un cristal iónico.

Solución: Como en primera aproximación podemos considerar un cristal iónico como un arreglo regular de cargas puntuales positivas y negativas, es de esperar que la energía potencial interna de un cristal iónico se deba esencialmente a la interacción eléctrica entre los iones. Consideremos como ejemplo, el caso del NaCl y calculemos la interacción eléctrica de un ion Na^+ con todos los otros iones del cristal. Como podemos ver en la fig. 6-2, cada ion Na^+ tiene 6 iones Cl^- como vecinos más cercanos, todos a la misma distancia. De este modo, como el Na^+ y el Cl^- tienen cargas iguales a e en valor absoluto, la energía potencial eléctrica de atracción del Na^+ debido a los 6 iones Cl^- más cercanos es

$$E_{p1} = 6 \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right) = -\frac{6e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad (6),$$

donde R es la distancia entre los vecinos más próximos. Las series de iones que siguen son 12 iones Na^+ a una distancia $\sqrt{2}R$, resultando una energía potencial de repulsión

$$E_{p_2} = 12 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\sqrt{2}R} \right) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \left(- \frac{12}{\sqrt{2}} \right).$$

Sigue un grupo de 8 iones Cl^- a una distancia $\sqrt{3}R$, que producen una energía potencial de atracción

$$E_{p_3} = 8 \left(- \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\sqrt{3}R} \right) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \left(\frac{8}{\sqrt{3}} \right).$$

La próxima capa contiene 6 iones Na^+ a una distancia $2R$, que da una energía potencial de repulsión

$$E_{p_4} = 6 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 2R} \right) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} (-3).$$

Este proceso continúa hasta incluir todo el cristal. La energía potencial resultante es la suma o sea

$$E_p = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \left(6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - 3 + \dots \right) = - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R}, \quad (6.1)$$

donde α es el valor de la suma encerrada en el paréntesis, que se llama *constante de Madelung*. En el caso de una celda cúbica de caras centradas, tal como el NaCl , la constante de Madelung es $\alpha = 1,7476$. En general, α depende sólo de la geometría del cristal; para una celda cúbica de cuerpo centrado, tal como en el CsCl , su valor es 1,7627.

Como α es positiva la energía potencial es negativa y la fuerza interiónica es de atracción a todas las distancias, es decir, que no tiene ningún mínimo. Por consiguiente, el cristal debería juntarse en una estructura de apilamiento compacto sin configuración estable. Empero, sabemos que este no es el caso. La conclusión proviene de considerar los iones como cargas puntuales. Cuando dos átomos se acercan mucho la repulsión nuclear (parcialmente reducida por las capas de electrones) y la repulsión entre las capas electrónicas completas entran en acción. En consecuencia debemos añadir un término a la energía potencial que produzca repulsión a corto alcance. Esto se hizo antes, en la sección 5.4 al discutir los enlaces iónicos. Para obtener este término de repulsión suponemos, basándonos en hechos empíricos, una expresión razonable para la energía potencial. Se han propuesto varias expresiones, pero consideraremos solamente la más simple de todas, la sugerida por el físico alemán Max Born (1882-):

$$E_p(\text{repulsión}) = \frac{\beta e^2}{4\pi\epsilon_0 R^n},$$

donde β y n son dos constantes a determinar. Cuando usamos R^n con $n > 1$, la fuerza de repulsión es de corto alcance y es despreciable a distancias grandes en comparación con la atracción coulombiana de los iones. Cuando esta energía potencial se agrega a la ec. (6.1), la energía potencial efectiva es

$$E_p = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\alpha}{R} - \frac{\beta}{R^n} \right). \quad (6.2)$$

El gráfico de esta energía potencial es similar al ilustrado en la fig. 5-14. Llamando R_0 a la separación de equilibrio, tenemos que a esta distancia $dE_p/dR = 0$. Luego

$$\left(\frac{dE_p}{dR} \right)_{R=R_0} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(- \frac{\alpha}{R_0^2} + \frac{n\beta}{R_0^{n+1}} \right) = 0$$

ó $\beta = \alpha R_0^{-1}/n$. Entonces podemos escribir la ec. (6.2) en la forma

$$E_p = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left[\frac{R_0}{R} - \frac{1}{n} \left(\frac{R_0}{R} \right)^n \right].$$

La energía potencial del ion Na^+ en equilibrio, obtenida haciendo $R = R_0$, es

$$E_p = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right).$$

Encontramos un resultado similar si comenzamos con un ion Cl^- . Para obtener la energía interna total del cristal, debemos sumar el resultado anterior sobre todos los iones del cristal. Al hacer esto debemos asegurarnos de no contar dos veces la interacción entre cada par de iones. De este modo, dado que N es el número de pares de iones en el cristal (que en nuestro caso es el mismo que el número de moléculas), la energía potencial interna del cristal es

$$U = -\frac{N\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right). \quad (6.3)$$

El valor experimental de U para el NaCl es $-7,77 \times 10^8 \text{ J mole}^{-1}$ ó $-185,7 \text{ kcal mole}^{-1}$. Este resultado se ha obtenido midiendo el calor de formación del cristal. Sustituyendo este valor de U en la ec. (6.3), con N igual al número de Avogadro ($6,02 \times 10^{23} \text{ mole}^{-1}$) y $R_0 = 2,81 \times 10^{-10} \text{ m}$, obtenemos $n = 9,4$. Para otros cristales cúbicos el valor de n es del mismo orden de magnitud. Este valor de n es compatible con otros cálculos.

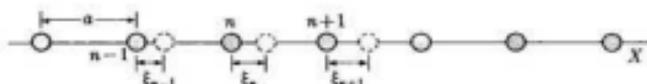


Fig. 6-10. Red lineal de átomos idénticos.

EJEMPLO 6.2. Discusión de las vibraciones de la red.

Solución: El análisis de las vibraciones de la red es de gran importancia debido a su relación con muchas de las propiedades físicas del cristal. Para simplificar consideremos una red lineal, esto es, una hilera de átomos idénticos separados la distancia a (fig. 6-10). La posición del n -ésimo átomo está dado por $x_n = na$. Llamemos ξ_n al desplazamiento del n -ésimo átomo respecto a la posición de equilibrio. Como primera aproximación supondremos que durante las vibraciones cada átomo interactúa solamente con sus dos vecinos. La separación entre el n -ésimo y el $(n+1)$ -ésimo átomos ha aumentado en $\xi_{n+1} - \xi_n$, y si β es la constante elástica del enlace, la fuerza sobre el n -ésimo átomo hacia la derecha debido al $(n+1)$ -ésimo átomo es

$$\beta(\xi_{n+1} - \xi_n).$$

Análogamente el $(n-1)$ -ésimo átomo produce sobre el n -ésimo una fuerza hacia la izquierda igual a

$$\beta(\xi_n - \xi_{n-1}).$$

Luego, la ecuación de movimiento del n -ésimo átomo es

$$\begin{aligned} M \frac{d^2 \xi_n}{dt^2} &= \beta(\xi_{n+1} - \xi_n) - \beta(\xi_n - \xi_{n-1}) \\ &= \beta(\xi_{n+1} + \xi_{n-1} - 2\xi_n). \end{aligned} \quad (6.4)$$

Despreciaremos todos los efectos de los extremos y por consiguiente emplearemos una solución de la forma

$$\xi_n = \xi_0 e^{i(\omega t + kna)}. \quad (6.5)$$

El término kna da la fase de cada átomo y se asemeja al término kx que da la fase de una onda que se propaga a través de un medio continuo. Sustituyendo la ec. (6.5) en la ec. (6.4) y cancelando factores comunes, obtenemos

$$-M\omega^2 = \beta(e^{i2ka} + e^{-i2ka} - 2) = -4\beta \sin^2 \frac{1}{2}ka,$$

de donde

$$\omega = 2\sqrt{\beta/M} \sin \frac{1}{2}ka. \quad (6.6)$$

Esta ecuación da las frecuencias permitidas en la red. Obsérvese que el valor máximo de ω ocurre para $k = \pi/a$. La fig. 6-11 muestra la variación de ω en función de k . Que haya una frecuencia máxima significa que existe un límite superior o frecuencia de corte para las ondas elásticas (esto es, sonoras) en un sólido. Sin embargo, este límite, del orden de 10^{15} Hz para la mayoría de las sustancias, está más allá de las frecuencias ultrasónicas desarrolladas hasta ahora en el laboratorio.

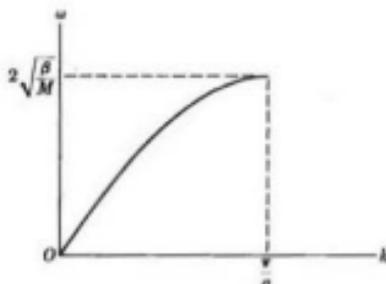


Fig. 6-11. Frecuencia de vibración de la red en función de k .

Consideremos ahora una red compuesta de dos clases de átomos de masas M_1 y M_2 , dispuestas alternadamente de modo que la distancia entre átomos vecinos es a y el período espacial de la red es $2a$ (fig. 6-12). Una red típica de este tipo es un cristal iónico. Un cálculo similar al del párrafo anterior muestra que las frecuencias permitidas están dadas por

$$\omega^2 = \beta \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \beta \left[\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 ka}{M_1 M_2} \right]^{1/2}. \quad (6.7)$$

Ahora tenemos dos valores de ω para cada valor de k , como se ilustra en la fig. 6-13(a). Los valores superiores de ω constituyen la *rama óptica* y los inferiores la *rama acústica* del espectro de frecuencias de la red. La situación real es algo más compleja de lo que nuestro análisis implica porque ambas ramas, la acústica y la óptica, pueden

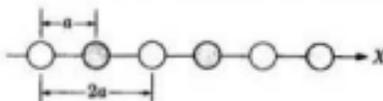


Fig. 6-12. Red lineal compuesta de dos clases de átomos.

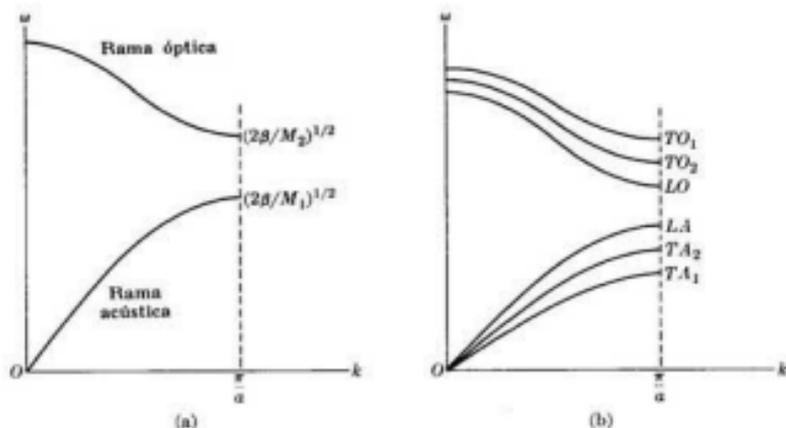


Fig. 6-13. Vibraciones acústica y óptica de una red lineal.

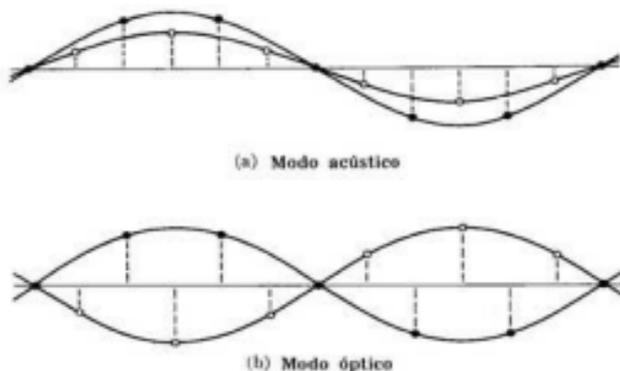


Fig. 6-14. Relaciones de fase entre los átomos en los modos acústico y óptico.

corresponder a vibraciones longitudinales o transversales (respecto a la dirección de propagación), habiendo dos modos transversales correspondientes a las dos direcciones independientes de vibración. En consecuencia, por cada valor de k hay seis valores posibles de $\omega(k)$, como se muestra en la fig. 6-13(b). La razón para denominar las ramas "acústica" y "óptica" es que en el modo acústico ambas clases de iones oscilan en fase, mientras que en el modo óptico tienen una diferencia de fase de π . Cuando consideramos las vibraciones transversales, el desplazamiento de los iones en los modos acústico y óptico de vibración da los diagramas que muestra la fig. 6-14. Como se puede ver en la figura, el momento dipolar inducido en el modo óptico es más grande que en el modo acústico y, por consiguiente, en el modo óptico la absorción y emisión de radiación electromagnética es más intensa que en el modo acústico. Las frecuencias ópticas caen en la región infrarroja del espectro, por lo que los

crisales iónicas tienen una respuesta intensa a la radiación electromagnética infrarroja. Para la radiación infrarroja (cuya frecuencia es del orden de 10^{12} Hz y la longitud de onda es del orden de 10^{-4} m) el valor de k es del orden de 10^4 m $^{-1}$. Por otra parte el valor de a para la mayoría de los cristales iónicos es del orden de 10^{-10} m. Luego ka es alrededor de 10^{-6} , que es un valor muy pequeño. Por consiguiente, la frecuencia de resonancia del cristal para la radiación electromagnética se puede obtener haciendo $ka = 0$ en la ec. (6.7), esto es,

$$\omega_0^2 = 2\beta \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right). \quad (6.8)$$

Esta, por ejemplo, es la frecuencia correspondiente a la absorción máxima en la curva de absorción del NaCl que se muestra en la fig. 6-3.

En un análisis más preciso, los modos normales de vibración de un sólido deben ser cuantizados. Si despreciamos la energía vibracional en el punto cero del sólido, las energías vibracionales de cada modo son múltiplos de $\hbar\omega(k)$. La excitación o desexcitación de un modo vibracional corresponde a la absorción o emisión de la energía $\hbar\omega(k)$. La semejanza con la absorción o emisión de radiación sugiere que se introduzca el concepto de *fonón*, el cual tiene una energía $E = \hbar\omega(k)$, un momentum $p = \hbar k$ y se propaga a través de la red con una velocidad igual a la velocidad de grupo $v_g = dE/dp = d\omega/dk$. Muchas propiedades térmicas de los sólidos, tales como la capacidad calorífica y la conducción del calor, se pueden describir en función de las interacciones de los fonones con la red y del transporte de fonones a través de la misma. Es posible incluso hablar de la dispersión de fonones por los átomos de la red (similar a la dispersión Compton de fotones por electrones). Esta dispersión de fonones se puede usar para describir la atenuación que experimentan las ondas sonoras de alta frecuencia cuando se propagan a través del sólido y los efectos térmicos asociados con esta atenuación.

6.3 Teoría de bandas

Para estudiar la disposición de los electrones en los sólidos podemos seguir un procedimiento muy similar a la técnica de los orbitales moleculares usada en el capítulo 5 para analizar la estructura molecular. Cuando un electrón pasa cerca de un ion, está bajo la influencia de la energía potencial coulombiana, proporcional a $1/r$, como se ilustra en la fig. 6-15(a). Si en lugar de un ion tenemos dos, como en las moléculas de H_2^+ y H_2 , la energía potencial es como la indicada en la fig. 6-15(b). Para un número muy grande de iones dispuestos regularmente en una fila, semejanado una red cristalina unidimensional, la energía potencial

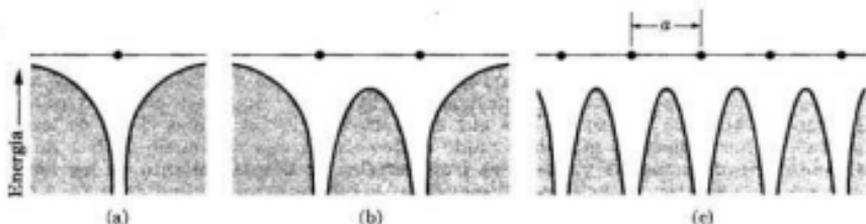


Fig. 6-15. Energía potencial coulombiana debida a (a) un solo ion, (b) dos iones, (c) varios iones en fila.

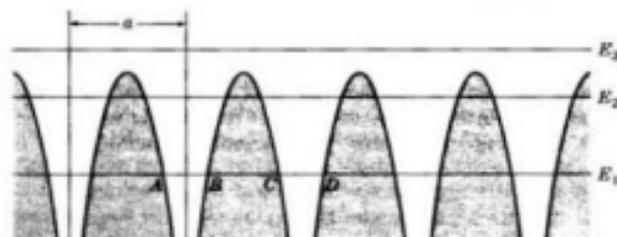


Fig. 6-16. Tipos de niveles de energía en una red cristalina lineal.

es como se indica en la fig. 6-15(c). Si se desprecia los efectos de los extremos, la energía potencial tiene la misma periodicidad (o regularidad) que la red cristalina. Un cristal real es una red en tres dimensiones y la energía potencial de un electrón moviéndose a través de la red también presenta una periodicidad tridimensional, que se repite de una celda a otra.

Para determinar los posibles estados estacionarios del movimiento en una energía potencial periódica, debemos usar la ecuación de Schrödinger. La solución dependerá de la forma específica de la energía potencial periódica. Sin embargo, su periodicidad nos permite obtener cierta información útil sin necesidad de resolver la ecuación de Schrödinger. Consideremos una red cristalina lineal compuesta de N iones separados entre sí la distancia a (fig. 6-16). Un electrón con una energía tal como E_1 no puede moverse libremente a través de la red, sino que está confinado principalmente en una de las regiones AB , CD , etc., permitidas clásicamente. Es cierto que este electrón puede ir desde AB hasta CD filtrándose a través de la barrera de potencial interpuesta entre las dos regiones permitidas (como se explicó en relación con la inversión del NH_3 , en la sección 2.8), pero la barrera es tan alta y ancha que es muy improbable que el electrón la penetre. Esta es la razón por la cual los electrones más internos en un cristal están esencialmente localizados y prácticamente se puede considerar que sus energías y funciones de onda son las mismas que las de los átomos aislados. Un electrón con la energía E_2 no está ligado tan fuertemente a un ion particular y, penetrando a través de la barrera de potencial, puede moverse por la red. Finalmente, un electrón con la energía E_3 no está ligado a ningún átomo en particular y tiene gran libertad de movimiento por toda la red. Estos electrones cuasilibres no solamente son responsables de la mayoría de las propiedades colectivas de la red (tales como las conductividades eléctrica y térmica), sino que también contribuyen a mantener unidos los iones atómicos que forman la estructura del cristal.

Nuestra próxima tarea es determinar los posibles niveles de energía. Recordemos la situación hallada en las moléculas H_2^+ y H_2 . La energía potencial en las moléculas diatómicas se debe a los dos iones y como consecuencia, los niveles de energía atómicos se desdoblán en dos cuya separación aumenta a medida que la distancia interiónica disminuye (fig. 5-4). Análogamente, en moléculas conjugadas lineales que tienen electrones de enlace π — tales como los polienos (sec-

ción 5.6) — los electrones se mueven en una energía potencial periódica y cada nivel de energía atómica se divide en un número de niveles igual al número de átomos. Esto se ilustró en la fig. 5-26 para el butadieno. Por consiguiente, en una red tal como la de la fig. 6-16, cada nivel de energía atómico da lugar a N niveles cercanos. Sus espaciamientos y posiciones dependen de la separación

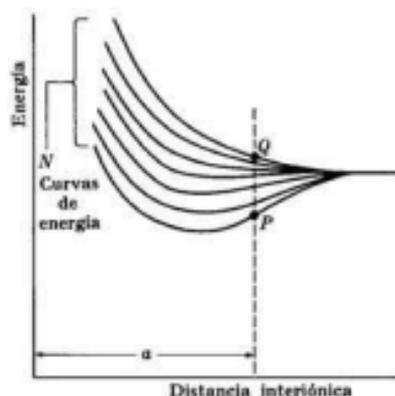


Fig. 6-17. Niveles de energía en una red cristalina lineal en función de la distancia interiónica.

interiónica, como se muestra cualitativamente en la fig. 6-17. Por ejemplo, para una distancia interiónica a , los niveles posibles de energía caen entre P y Q . Cuando N es muy grande los diferentes niveles de energía están espaciados tan finamente que se puede decir que forman una banda continua de energía.

Como de acuerdo al principio de exclusión de Pauli, cada nivel puede acomodar dos electrones, uno con espín hacia arriba y otro con espín hacia abajo, una banda de energía correspondiente a un estado atómico dado puede acomodar

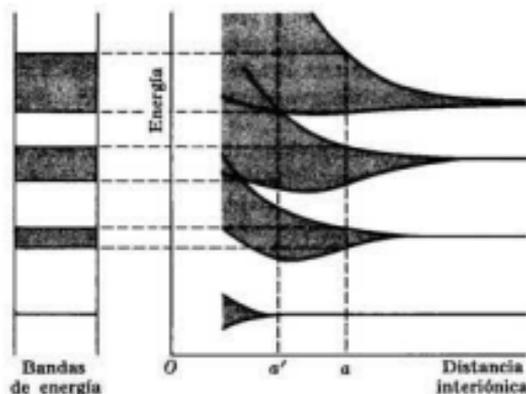


Fig. 6-18. Bandas de energía.

un máximo de $2N$ electrones, o dos electrones por ion. Las bandas se designan por s, p, d, etc. de acuerdo al valor del momentum angular del estado atómico al cual están relacionadas.

En una red cristalina hay muchas bandas de energía, cada una correspondiente a uno de los niveles de energía de los átomos que forman la red. La fig. 6-18 muestra las bandas de energía que corresponden a varios niveles de energía para una distancia interiónica a . En las curvas de energía situadas a la derecha, podemos ver que a mayor nivel de energía atómica, mayor es la distancia interiónica a la cual las bandas comienzan a formarse. La razón de esto es que mientras mayor sea la energía de los electrones, mayor es la región en la cual se mueven, y en consecuencia, más fácilmente son afectados por los iones vecinos. Otra característica es que a medida que la distancia interiónica disminuye las bandas comienzan a superponerse. Por ejemplo, para la distancia interiónica a' la tercera y cuarta banda de la fig. 6-18 se superponen. Como veremos más adelante, eso es de gran importancia para explicar las propiedades de muchos sólidos.

Las bandas asociadas con las capas completas internas en los átomos originarios tienen las cuotas exactas de electrones que les permite el principio de Pauli. En estas bandas, los electrones están también más o menos localizados, como se explicó en relación con la fig. 6-16. Por ello ignoraremos estas bandas en la discusión que sigue. Empero, la banda correspondiente a la capa atómica más externa, ocupada por los electrones de valencia es la más interesante en lo que se refiere a la propiedades de los sólidos; esta banda será considerada en detalle. Si la banda más externa no está completamente llena, se denomina *banda de conducción*. Pero si está llena se llama *banda de valencia* y la banda vacía que queda justamente encima de esta última recibe el nombre de *banda de conducción*.

6.4 Modelo de electrones libres

En nuestro análisis del movimiento de electrones en la banda de conducción, ignoraremos, en primera aproximación, la fluctuación periódica de la energía potencial. En consecuencia podremos considerar estos electrones como si fueran libres y moviéndose independientemente unos de otros. Además, para simplificar, consideraremos una red lineal. Si suponemos que ésta es suficientemente grande, nuestra discusión no será influenciada por las condiciones de contorno en los extremos de la red. Entonces la función de onda aproximada de un electrón de momentum $p = \hbar k$ es

$$\psi = e^{ikx}, \quad (6.9)$$

Consideramos que k puede ser positiva o negativa para permitir el movimiento en ambas direcciones del eje X. Para una red tridimensional, debemos tener una función de onda que puede ser descrita como sigue:

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (6.10)$$

Para ambas funciones, $|\psi|^2 = 1$, lo cual significa que el electrón tiene la misma probabilidad de encontrarse en cualquier lugar de la red. Esto, desde luego, no está de acuerdo con la imagen que tenemos de la red como una estructura periódica cuya periodicidad debe estar reflejada en la distribución de probabilidad de los electrones. (Por ejemplo, parece razonable que haya mayor probabilidad de encontrar un electrón cerca de un ion positivo de la red que en otras regiones de la misma). Sin embargo, el modelo de electrones libres, aunque burdo, nos permite explicar ciertas propiedades de muchos sólidos.

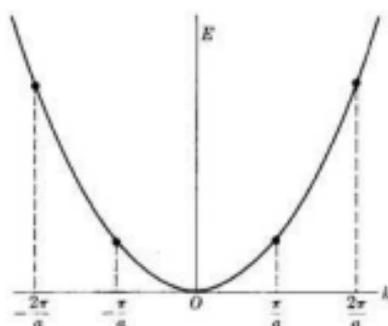


Fig. 6-19. Energía de un electrón libre en función de k .

La energía del electrón descrito por la función de onda (6.9) o (6.10) es, si despreciamos la energía potencial media constante,

$$E = p^2/2m_e = \hbar^2 k^2/2m_e, \quad (6.11)$$

que corresponde a la energía cinética de un electrón con momentum $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. En la fig. 6-19 está ilustrada la energía en función de k . El modelo de electrones libres permite todos los valores de k y por lo tanto de E_k , lo cual significa que el modelo no suministra información acerca del ancho de una banda, pero podemos estimarla de la siguiente manera: consideremos una red lineal de longitud L compuesta de N iones separados la distancia a , de modo que $L = Na$. Para que en esta red se produzcan ondas estacionarias, la longitud de onda λ del electrón debe satisfacer la condición $n(\lambda/2) = L$. Para cada valor de n , se obtiene un estado estacionario dado. Pero sabemos que una banda en una red compuesta de N iones tiene sólo N estados. Por consiguiente, los posibles valores de n son 1, 2, 3, ..., N . Observando que $k = 2\pi/\lambda$, tenemos entonces que

$$k = n\pi/L = n\pi/Na, \quad n = 1, 2, 3, \dots, N. \quad (6.12)$$

La diferencia entre valores sucesivos de k es π/Na , que es muy pequeña si N es muy grande y justifica tratar a k como una variable continua a pesar de la condición de cuantización (6.12). Haciendo $n = N$ en la ec. (6.12) encontramos que el máximo valor de k es

$$k_{\max} = \pi/a. \quad (6.13)$$

De este modo el intervalo de los valores de k permitidos dentro de la banda está entre $-\pi/a$ y π/a , como se indica en la fig. 6-19. La energía máxima en la banda, que es también el ancho de la banda, es entonces

$$E_{\max} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e a^2}. \quad (6.14)$$

Nótese en la ec. (6.14) que el ancho de la banda es independiente del número de iones que componen la red, un resultado esperado, ya que añadir más iones significa agregar más estados; pero la periodicidad de la red, que determina k_{\max} de acuerdo a la ec. (6.13), permanece igual (ver ejemplo 6.6).

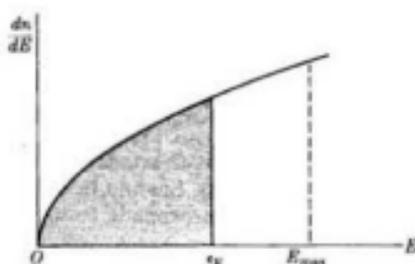


Fig. 6-20. Densidad de estados de energía de los electrones libres de un sólido.

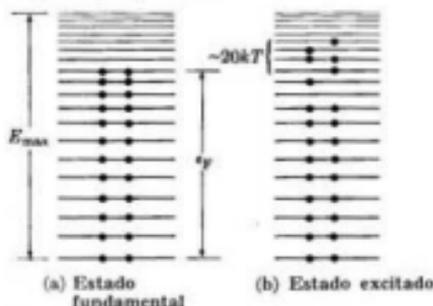


Fig. 6-21. Distribución de los electrones libres entre los estados de energía en la banda de conducción.

Es más importante determinar cómo los electrones pueden distribuirse en una banda comprendida entre las energía cero y E_{\max} . En el ejemplo 2.4 mostramos que el número de niveles de energía en el intervalo de energía dE disponibles para una partícula libre encerrada en una caja de volumen V está dado por

$$dN(E) = \frac{4\pi V(2m^2)^{3/2}}{\hbar^3} E^{1/2} dE.$$

Cada nivel puede acomodar dos electrones (uno con espín hacia arriba y el otro con espín hacia abajo). Por lo tanto, si nos referimos a la unidad de volumen, el número total de electrones por unidad de volumen con energía comprendida entre E y $E + dE$ en la banda es

$$dn = \frac{8\pi(2m^2)^{3/2}}{\hbar^3} E^{1/2} dE = g(E) dE. \quad (6.15)$$

En la fig. 6-20, que es básicamente idéntica a la fig. 2-12, se muestra la cantidad $g(E) = dn/dE$. Para una banda dada la curva debe terminar en E_{\max} . El número de electrones por unidad de volumen que pueden ser acomodados hasta alcanzar la energía E está dado por

$$n = \int_0^E g(E) dE.$$

Por consiguiente, usando la ec. (6.15), obtenemos

$$n = \frac{8\pi(2m_0^3)^{1/2}}{h^3} \int_0^E E^{1/2} dE = \frac{16\pi(2m_0^3)^{1/2}}{3h^3} E^{3/2}. \quad (6.16)$$

Si el metal está en su estado fundamental (el cual, como veremos más adelante, ocurre en el cero absoluto), todos los electrones ocupan los niveles más bajos posibles compatibles con el principio de exclusión, como se indica en la fig. 6-21(a). Si el número total de electrones por unidad de volumen n_0 es menor que el número de niveles de energía disponibles en la banda, los electrones ocuparán todos los estados de energía hasta un máximo, designado por ϵ_F , y llamado *energía de Fermi*. Si hacemos $E = \epsilon_F$ en la ec. (6.16), debemos tener $n = n_0$. En consecuencia para la energía de Fermi obtenemos el valor

$$\epsilon_F = \frac{h^2}{8m_0} \left(\frac{3n_0}{\pi} \right)^{2/3}. \quad (6.17)$$

De este modo, la distribución de energía de los electrones en el estado fundamental del metal corresponde al área sombreada de la fig. 6-20. Cuando la energía de Fermi es igual al ancho de la banda de energía, ésta está ocupada comple-

TABLA 6-1 Energía de Fermi

Metal	Li	Na	K	Rb	Cs	Cu	Ag	Au	Mg	Al
ϵ_F , eV	4,72	3,12	2,14	1,82	1,53	4,07	5,51	5,54	7,3	11,9

tamente. La tabla 6-1 da los valores calculados de las energías de Fermi de algunos metales.

Cuando una banda no está completamente llena, basta una pequeña cantidad de energía para excitar los electrones más altos hasta los niveles de energía más cercanos, como se indica en la fig. 6-21(b). Sin embargo, sólo los electrones más altos pueden ser excitados térmicamente, ya que kT , a temperatura ambiente, es de unos 0,025 eV, la cual es muy pequeña comparada con ϵ_F , y el principio de exclusión hace que sea imposible excitar los electrones de baja energía a los estados vecinos ocupados. La distribución de electrones entre los niveles de ener-

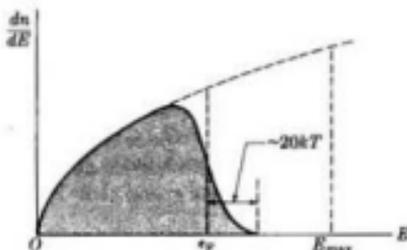


Fig. 6-22. Ocupación de los estados de energía a una temperatura diferente del cero absoluto.

gía en un estado de la red excitado térmicamente corresponde al área sombreada de la fig. 6-22. Los electrones que han sido excitados térmicamente son aquéllos cuya energía es mayor que ϵ_F . Los estados ocupados por los electrones excitados caen en una región de energía del orden de 20 kT por encima de ϵ_F .

La *energía de arranque* de un metal es la energía necesaria para extraer un electrón del nivel ocupado más alto. En el cero absoluto la energía de Fermi es el nivel ocupado más alto. Como las energías térmicas son pequeñas comparadas con la energía de Fermi, sólo muy pocos electrones son excitados por encima de ésta, aún a temperatura ambiente. Por esa razón la energía de arranque es prácticamente constante en un amplio intervalo de temperaturas.

EJEMPLO 6.3. Discutir el paramagnetismo de espín o de Pauli.

Solución: El modelo simple de electrones libres que hemos estudiado es suficiente para explicar muchas propiedades de los metales, una de las cuales es el pequeño paramagnetismo que presentan la mayoría de ellos. Pauli atribuyó este paramagnetismo a un cambio en los estados ocupados por los electrones con espín hacia arriba y hacia abajo cuando se aplica un campo magnético, porque este campo favorece la orientación de los espines electrónicos en dirección opuesta al campo.

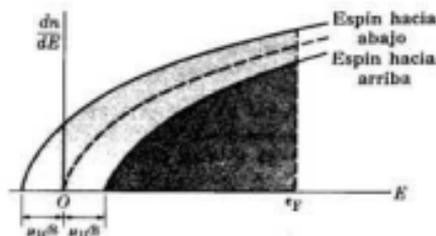


Fig. 6-23. Ocupación de los estados de energía en presencia de un campo magnético externo.

Hemos visto (sección 3.6) que un electrón posee un momento magnético de espín μ_B y que en presencia de un campo magnético \mathcal{H} adquiere una energía $\pm \mu_B \mathcal{H}$, donde el signo $+$ ($-$) corresponde al espín hacia arriba (hacia abajo) o paralelo (antiparalelo) al campo magnético. Si E es la energía total del electrón, su energía cinética es $E \mp \mu_B \mathcal{H}$, dependiendo de si el espín es hacia arriba o hacia abajo. Por consiguiente, el número de ocupación de los estados con espín hacia arriba y hacia abajo es

$$\left(\frac{dn}{dE}\right)_{\uparrow} = \frac{1}{2}g(E - \mu_B \mathcal{H}), \quad \left(\frac{dn}{dE}\right)_{\downarrow} = \frac{1}{2}g(E + \mu_B \mathcal{H}),$$

donde el factor $\frac{1}{2}$ entra porque en cada caso consideramos solamente electrones con el espín en una orientación dada. La fig. 6-23 muestra los gráficos de $(dn/dE)_{\uparrow}$ y $(dn/dE)_{\downarrow}$ (aquí suponemos que la temperatura está cerca del cero absoluto). Vemos que el número de electrones con espín hacia abajo es mayor que el número de los que tienen espín hacia arriba. Obsérvese que hemos mantenido la energía máxima igual a ϵ_F . Aún en los campos magnéticos más intensos usados en el laboratorio (del orden de 0,1 T), la energía $\mu_B \mathcal{H}$ es del orden de 8×10^{-4} eV, que es muy pequeña comparada con la energía de Fermi, dada en la tabla 6-1. Luego, las dos curvas sólo están separadas muy ligeramente. Los electrones con espín hacia arriba contribuyen con un momento magnético $-\mu_B$ según la dirección del campo magnético, y aquéllos con espín hacia abajo con un momento magnético $+\mu_B$. Luego el momento

magnético neto por unidad de volumen del metal es

$$\begin{aligned}\chi &= \int_0^{\epsilon_F} \left[\mu_B \left(\frac{dn}{dE} \right)_\downarrow - \mu_B \left(\frac{dn}{dE} \right)_\uparrow \right] dE \\ &= \frac{1}{2} \mu_B \int_0^{\epsilon_F} [g(E + \mu_B \mathcal{B}) - g(E - \mu_B \mathcal{B})] dE \\ &= \mu_B^2 \mathcal{B} \int_0^{\epsilon_F} \frac{dg}{dE} dE = \mu_B^2 \mathcal{B} g(\epsilon_F).\end{aligned}$$

En este cálculo hemos usado la relación $g(E \pm \mu_B \mathcal{B}) = g(E) \pm \mu_B \mathcal{B} (dg/dE)$, deducida a partir del desarrollo de Taylor. Recordando las ecs. (6.15) y (6.17), tenemos $g(\epsilon_F) = 3n_0/2\epsilon_F$, y por consiguiente la magnetización debida a la reorientación del espín es

$$\chi_M = \frac{3n_0 \mu_B^2}{2\epsilon_F} \mathcal{B},$$

que tiene la misma dirección de \mathcal{B} y en consecuencia es un efecto paramagnético. La susceptibilidad paramagnética de espín de un metal es por lo tanto,

$$\chi_M = \frac{3n_0 \mu_B^2 \mu_0}{2\epsilon_F}.$$

Introduciendo valores numéricos con $\epsilon_F \sim 2$ eV, obtenemos $\chi_M \sim 5 \times 10^{-4}$. Este valor está de acuerdo con el resultado experimental en cuanto al orden de magnitud se refiere. Aunque hemos hecho nuestros cálculos suponiendo una temperatura cercana al cero absoluto, el resultado es válido para un intervalo de temperaturas bastante amplio.

Observar en las expresiones anteriores que, como en general n_0 es mayor y ϵ_F es menor para los electrones d que para los electrones s ó p, el paramagnetismo electrónico de los átomos que tienen las capas d incompletas es mayor.

6.5 Movimiento electrónico en una estructura periódica

Para mejorar el modelo de electrones libres de un sólido, incorporaremos el efecto de la estructura periódica de la red. Comenzaremos por observar primero las funciones de onda posibles. Es claro que el efecto de la red es cambiar la función de onda de la partícula libre $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ de modo que en lugar de tener una amplitud constante, esta función de onda tenga una amplitud variable que cambie con el período de la red. Por lo tanto, escribamos la función de onda en la forma

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u(\mathbf{r}), \quad (6.18)$$

donde $u(\mathbf{r})$ es una amplitud modulante, que se repite de una celda a la próxima. En el caso de una red lineal de espaciamiento a , en lugar de la ec. (6.13) debemos escribir

$$\psi(x) = e^{ikx} u(x), \quad (6.19)$$

donde $u(x)$ satisface la condición

$$u(x + a) = u(x). \quad (6.20)$$

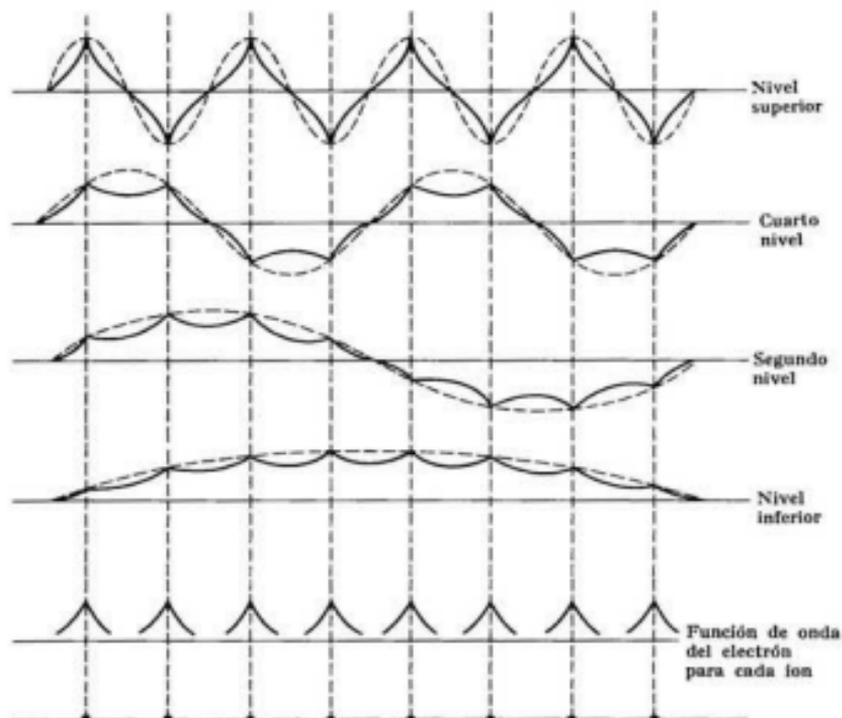


Fig. 6-24. Funciones de onda de una red compuesta de ocho iones.

Las expresiones (6.19) y (6.20) en conjunto constituyen el *teorema de Bloch*. (Ver su prueba en el ejemplo 6.5).

Podemos obtener una imagen de las funciones de onda (6.19) considerando que $u(x)$ se asemeja a la función de onda de los átomos aislados y reemplazando e^{ikx} por las funciones de onda de una partícula libre en una caja de potencial. En la fig. 6-24 se muestra algunas de las funciones de onda para el caso de una red compuesta de ocho iones en fila. La banda está compuesta de ocho niveles, pero sólo se indican cuatro funciones de onda. Notar que, aunque el momentum del electrón descrito por la ec. (6.19) no es constante, podemos decir que $\hbar k$ es algo así como un momentum *medio* del electrón (ver el ejemplo 6.4). Sin embargo, la longitud de onda asociada con $\psi(x)$ es $\lambda = 2\pi/k$, y así k es el número de onda del electrón.

La energía del electrón no es totalmente cinética, como en el caso del electrón libre dado por la ec. (6.11), debido a la energía potencial correspondiente a la red de iones. La expresión para la energía en función de k es complicada y depende de la geometría de la red. El resultado importante es que la energía tiene una

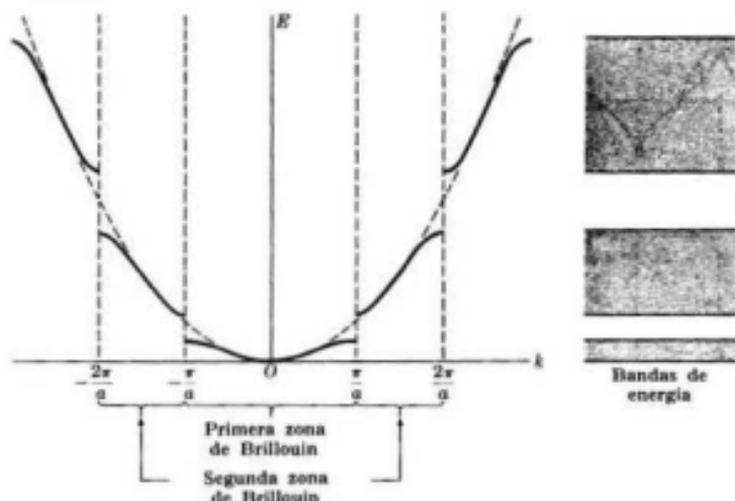


Fig. 6-25. Zonas de Brillouin en una red lineal.

discontinuidad para ciertos valores de k que, para una red lineal de espaciamiento a , están dados por

$$k = n\pi/a, \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6.21)$$

En la fig. 6-25 se muestra el gráfico de $E(k)$ para este caso. En el gráfico se observa que para valores de k no cercanos a los dados por la ec. (6.21), la energía se parece mucho a la de una partícula libre (indicada con líneas de trazos). En consecuencia la red afecta el movimiento de un electrón sólo cuando k es cercano a $n\pi/a$, y el efecto es producir discontinuidades de energía. Para valores intermedios de k , los electrones se mueven libremente a través de la red. Las bandas de energía permitidas son las correspondientes a las líneas llenas; estas bandas de energía también se ilustran a la derecha de la figura.

No es sorprendente que un electrón se pueda mover libremente a través de la red sin encontrar ninguna resistencia excepto cuando k se acerca a los valores $n\pi/a$. El movimiento de los electrones en la red se puede asimilar a la propagación de una onda electromagnética en un cristal. La dispersión de la onda

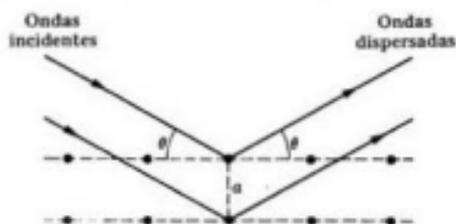


Fig. 6-26. Dispersión de Bragg.

electromagnética por los átomos de la red da lugar a una onda dispersada que se refuerza cuando se satisface la condición de Bragg; esto es

$$2a \sin \theta = n\lambda,$$

donde a es la distancia entre los planos y θ es el ángulo que la dirección de propagación forma con los planos de la red (fig. 6-26). Para incidencia normal ($\theta = \pi/2$), la condición de Bragg se convierte en $2a = n\lambda$. Esta es la condición a aplicar para la propagación de ondas a lo largo de una red lineal. Por ejemplo, si las ondas 1 y 2 (fig. 6-27) son reflejadas por iones sucesivos A y A' , los rayos reflejados $1'$ y $2'$ tienen una diferencia de camino $2a$ y una diferencia de fase $2\pi(2a)/\lambda$. Para una intensidad máxima de $1'$ y $2'$, esta diferencia de fase debe ser igual a $2n\pi$, con lo cual resulta $2a = n\lambda$. Haciendo $\lambda = 2\pi/k$ obtenemos $k = n\pi/a$, de conformidad con la ec. (6.21). Por consiguiente los valores de k son aquellos para los cuales la red lineal impide el movimiento de los electrones en una dirección dada y los obliga a moverse en la dirección opuesta. El conjunto de los valores de k comprendidos entre $-\pi/a$ y $+\pi/a$ constituyen la *primera zona de Brillouin*. Para k comprendido entre $-2\pi/a$ y $-\pi/a$ y entre π/a y $2\pi/a$, tenemos la segunda zona de Brillouin, y así sucesivamente.

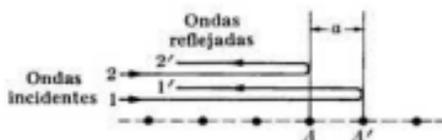


Fig. 6-27. Dispersión de Bragg en una red lineal.

Recordando la definición de velocidad de grupo $v_g = d\omega/dk$ (ver apéndice III) y que $E = \hbar\omega$, de acuerdo a la ec. (1.45), definimos la velocidad del electrón cuando está representado por un paquete de ondas centrado alrededor de la energía E y con número de onda k , en la forma

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (6.22)$$

Comparando esta ecuación con la pendiente de la curva de la fig. 6.25, concluimos que la velocidad del electrón varía dentro de la primera zona de Brillouin, como se ilustra en la fig. 6-28(a), con resultados análogos para las otras zonas. La velocidad es cero al fondo y al tope de la banda. En regiones intermedias de la banda la velocidad es muy cercana a la del electrón libre, $\hbar k/m$.

Si F es la fuerza externa sobre el electrón, el trabajo hecho por esta fuerza sobre el mismo durante el tiempo dt es $Fv dt$. Esto trae como consecuencia una variación dE en la energía del electrón. Luego podemos escribir $Fv dt = dE = (dE/dk) dk$. Introduciendo la expresión de v dada en la ec. (6.22), obtenemos

$$F = \hbar dk/dt. \quad (6.23)$$

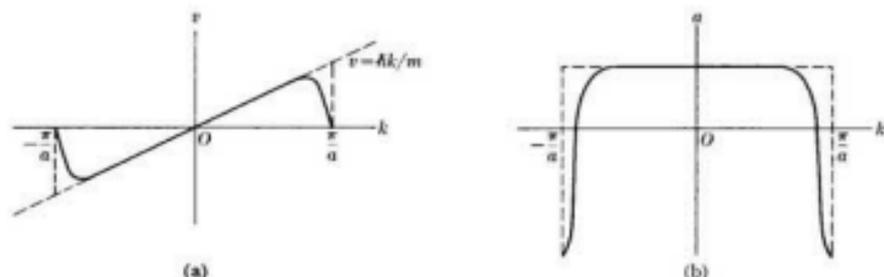


Fig. 6-28. Velocidad y aceleración en función de k en la primera zona de Brillouin de una red lineal.

que puede ser tomada como la ecuación del movimiento del electrón en la red. Comparando ésta con la ecuación clásica del movimiento, $F = dp/dt$, concluimos que en el movimiento del electrón a través de una red bajo la acción de una fuerza externa, $\hbar k$ juega el mismo papel que el momentum p en el movimiento del electrón en el espacio libre bajo la acción de la misma fuerza. Por esta razón, algunas veces $\hbar k$ se denomina *momentum del electrón en la red*.

Para describir el movimiento de un electrón a través de una red representado por un paquete de ondas bajo la acción de una fuerza externa, debemos usar las ecs. (6.22) y (6.23). La ec. (6.23) da el efecto de la fuerza externa sobre el número de onda k del electrón y la ec. (6.22) da la velocidad del electrón debido a esa fuerza más la interacción de éste con la red. Consideremos primero un electrón en la primera zona de Brillouin y supongamos, por ejemplo, que el electrón tiene inicialmente $k = 0$; luego su velocidad es también cero. Cuando se aplica la fuerza F , k aumenta de acuerdo con la ec. (6.23), y según la fig. 6-28 vemos que v también aumenta, esto es, el electrón se acelera. Pero cuando k alcanza un cierto valor cercano a π/a , la velocidad comienza a disminuir (esto es, el electrón se frena a pesar de que la fuerza externa es la misma). Este efecto se debe a la interacción del electrón con la red. Cuando $k = \pi/a$ la velocidad se hace cero, pero el paquete de ondas que representa al electrón sufre una reflexión de Bragg en la red, k se hace igual a $-\pi/a$ y la propagación se efectúa en la dirección opuesta. Evidentemente la velocidad es ahora negativa. Si la fuerza aplicada no varía, la ec. (6.23) nos dice que k continúa cambiando en la misma dirección y por lo tanto, como es negativa, disminuye en valor absoluto. La fig. 6-28(a) indica que la velocidad primero aumenta en dirección opuesta a la fuerza externa, pero muy pronto su módulo comienza a disminuir, ya que la fuerza se opone a la velocidad; esto es, el electrón se frena hasta que eventualmente, la velocidad se hace nuevamente cero cuando $k = 0$. A partir de aquí el ciclo se repite. En la fig. 6-28(b) se muestra la aceleración del electrón durante el ciclo completo. Representando el estado del electrón por un punto en un gráfico de E en función de k (fig. 6-29), podemos ilustrar el proceso moviendo el punto como lo indican las flechas en la figura. Si el electrón comienza en cero, su punto representativo se mueve desde O hasta A , entonces salta a B y retrocede hasta O .

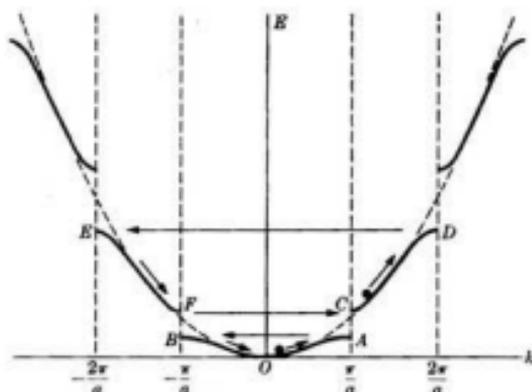


Fig. 6-29. Movimiento electrónico en la primera y segunda zona de Brillouin de una red lineal. Bajo la acción de una fuerza externa, el número de onda y la energía del electrón varían dentro de cada zona, como se ilustra con las flechas.

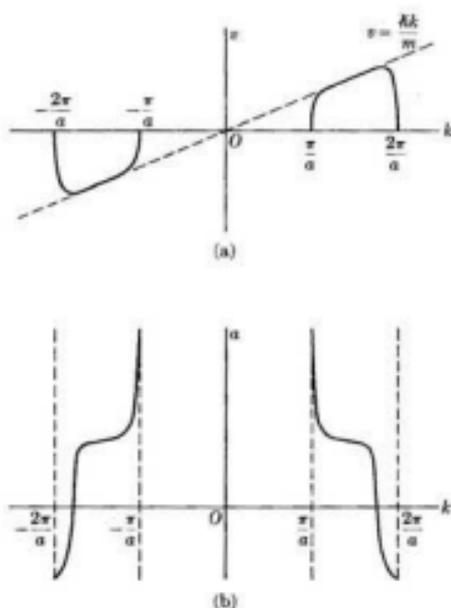


Fig. 6-30. Velocidad y aceleración en función de k en la segunda zona de Brillouin de una red lineal.

Consideremos ahora un electrón en la segunda zona de Brillouin, que cubre los intervalos $-2\pi/a \leq k \leq -\pi/a$ y $\pi/a \leq k \leq 2\pi/a$. Si el electrón inicialmente tiene un valor k ligeramente superior a π/a , la fuerza aplicada aumenta el valor de k hasta $k = 2\pi/a$. Inmediatamente una reflexión de Bragg invierte el momentum y k salta al valor $-2\pi/a$. Si la fuerza continúa actuando sobre el electrón, k continúa aumentando (realmente disminuyendo en valor absoluto) hasta que alcanza el valor $-\pi/a$, cuando tiene lugar otra reflexión de Bragg y el momentum se invierte de nuevo, cambiando k al valor π/a . De aquí en adelante el proceso continúa de una manera cíclica. En consecuencia el electrón describe el ciclo $C \rightarrow D \rightarrow E \rightarrow F \rightarrow C$ (fig. 6-29). En la fig. 6-30 se ilustra la variación de la velocidad y de la aceleración del electrón en la segunda zona de Brillouin. Un razonamiento similar se aplica a las otras zonas.

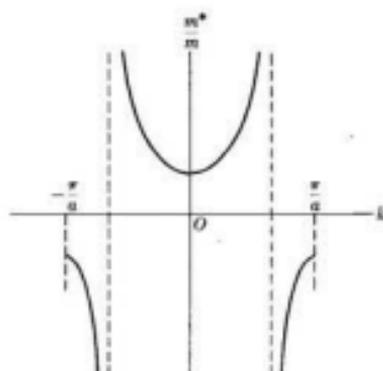


Fig. 6-31. Masa efectiva en función de k .

De la descripción cinemática anterior se deduce una importante conclusión: una fuerza externa no puede sacar un electrón de una zona de Brillouin; por consiguiente el electrón permanece en la misma banda de energía a menos que en un proceso gane suficiente energía (por ejemplo absorbiendo un fotón) para cruzar la discontinuidad de energía y pasar a la próxima zona. (Hay empero, una cierta probabilidad de que un electrón bajo la acción de una fuerza aplicada cruce la discontinuidad en $k = \pm n\pi/a$; esto se llama *efecto Zener*. Sin embargo, no será discutido aquí.)

Se ha encontrado conveniente definir una *masa efectiva* m^* del electrón de acuerdo a la relación $m^* = F/a$. Aquí F es la fuerza externa aplicada al electrón y a la aceleración real debida tanto a F como a la interacción con la red. De este modo no podemos esperar que m^* sea igual a la masa del electrón m_e , ni que sea una constante. Considerando que

$$a = dv/dt = (dv/dk) dk/dt,$$

y usando las ecs. (6.22) y (6.23), tenemos

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2}. \quad (6.24)$$

Obsérvese que cuando el electrón es libre y su energía está dada por la ec. (6.11), tenemos $m^* = m_e$. Evidentemente m^* es una función de los parámetros de la red y del momentum $\hbar k$ del electrón en la red. En los gráficos de E en función de k (fig. 6-25), vemos que m^* es positiva en la base de una banda de energía y negativa en el tope de la misma. Se hace muy grande, teóricamente infinita,

en el punto de inflexión de la curva de energía, esto es, en el máximo de v en la fig. 6-28. En la fig. 6-31 se muestra en forma esquemática la variación de m^* con k en la primera zona de Brillouin. En la tabla 6-2 se da el valor de m^* que corresponde a la base de la banda de energía (en $k = 0$), para ciertos metales.

TABLA 6-2 Masa efectiva

Metal	Li	Na	K	Rb	Cs
m^*/m_e	1,40	0,98	0,94	0,87	0,83

Completaremos nuestra descripción del movimiento electrónico en una red periódica considerando la densidad de estados $g(E) = dn/dE$. Hemos discutido ya esta densidad para el modelo de electrones libres, ec. (6.15) y fig. 6-20. En la base de la banda la densidad de estados se asemeja mucho a la curva parabólica del modelo de electrones libres, pero en lugar de crecer continuamente, la curva decrece casi parabólicamente en el tope de la banda. Esto se ilustra en la fig. 6-32, la cual se debe tomar sólo cualitativamente. La forma real de dn/dE depende de la estructura de la red y de la posición de la banda. Se puede comprender fácilmente esta forma más o menos simétrica de dn/dE . Supongamos que una banda está completamente llena. Si se quita un electrón (quizá de la banda de conducción), es posible decir que se ha creado un hueco, ya que ahora hay un estado vacante en la banda. Cuando se aplica una fuerza externa (tal como un campo eléctrico), algún electrón puede moverse al estado vacante, llenando en

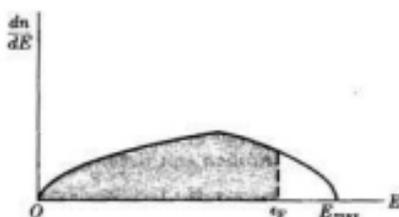


Fig. 6-32. Densidad de estados de energía en una banda.

consecuencia el hueco. Pero al hacer esto, este electrón deja un nuevo hueco en la banda que corresponde al estado previamente ocupado. Podemos decir que el hueco se mueve de una manera exactamente opuesta a la de los electrones bajo la acción de una fuerza aplicada, actuando como una partícula cargada positivamente. El valor cero para la energía de los huecos está al tope de la banda y sus energías se miden hacia abajo; esto es, $E_{max} - E$. Luego, en el tope de la banda dn/dE es muy semejante a la ec. (6.15), pero con E reemplazada por $E_{max} - E$.

El estudiante puede darse cuenta que en nuestro análisis descriptivo del movimiento de un electrón en una red periódica, hemos combinado las imágenes cuántica y clásica del electrón. Hemos hecho esto para obtener los resultados básicos

deseados sin llegar a involucrar los cálculos complejos de la mecánica cuántica, los cuales están más allá de los propósitos de este libro.

EJEMPLO 6.4. Cálculo del valor medio del momentum de un electrón descrito por la función de onda $\psi = e^{ikx}u(x)$.

Solución: Suponiendo que la función de onda está normalizada a la unidad, tenemos

$$\int \psi^* \psi \, dx = \int u^* u \, dx = 1.$$

Aplicando la ec. (2.50), podemos escribir el momentum medio del electrón en la forma

$$\bar{p} = \int \psi^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi \, dx.$$

Pero

$$\frac{d\psi}{dx} = ik e^{ikx} u(x) + e^{ikx} \frac{du}{dx}$$

y, como $\psi^* = e^{-ikx} u^*(x)$, obtenemos

$$\bar{p} = \hbar k \int u^* u \, dx + \int u^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) u \, dx.$$

Debido a que la condición de normalización hace la primera integral de la derecha igual a 1, podemos escribir

$$\bar{p} = \hbar k + \bar{p}_s$$

donde \bar{p}_s corresponde al segundo término, y puede ser considerado como el momentum medio del electrón resultante de su interacción con los iones que forman la red, ya que éste es el significado físico que hemos atribuido a $u(x)$. De esta manera concluimos que el momentum medio de los electrones está compuesto de dos partes: del momentum $\hbar k$ de la partícula cuasilibre en la red y del momentum debido a la interacción con la red.

EJEMPLO 6.5. Probar el teorema de Bloch, el cual establece que $u(x)$ en la ec. (6.19) es una función periódica con período igual al espaciamento de la red.

Solución: Consideremos una red lineal de espaciamento a tal que $E_p(x) = E_p(x + a)$. Entonces, como la distribución de probabilidad de los electrones debe mostrar la misma periodicidad que la energía potencial, podemos escribir

$$|\psi(x)|^2 = |\psi(x + a)|^2. \quad (6.25)$$

La ec. (6.25) implica que $\psi(x + a) = C\psi(x)$, donde C es una cantidad que satisface la condición $|C|^2 = 1$. Así, podemos escribir $C = e^{ik_a}$, donde k es un parámetro arbitrario. Entonces tenemos lo siguiente:

$$\psi(x) = e^{-ik_a} \psi(x + a).$$

Multiplicando ambos miembros de la ecuación por e^{-ik_a} , obtenemos

$$e^{-ik_a} \psi(x) = e^{-ik_a} e^{-ik_a} \psi(x + a).$$

Esto demuestra que $u(x) = e^{-ik_a} \psi(x)$ es una función periódica de x , con período a . Entonces, al escribir $\psi(x) = e^{ik_a} u(x)$ tenemos el teorema de Bloch.

EJEMPLO 6.6. Cálculo del ancho de una banda de energía usando la llamada *aproximación de enlace apretado*.

Solución: Una función de onda convenientemente aproximada — llamada *aproximación de enlace apretado* — para un electrón que se mueve en una red lineal de espaciamiento a es

$$\psi = \sum_n e^{ikna} \phi(x - na), \quad (6.26)$$

donde ϕ es la función de onda atómica de un electrón en un estado estacionario de un átomo aislado y $n = 1, 2, \dots, N$ identifica cada uno de los átomos de la red. De este modo $\phi(x - na)$ es la función de onda correspondiente al n -ésimo átomo y ψ es una combinación lineal de funciones de onda atómicas con factores de fase convenientes. Esta función de onda corresponde a la descripción dada en la fig. 6-24. Antes de proceder a calcular el ancho de banda, debemos verificar que la ec. (6.26) satisface el teorema de Bloch. La función de onda puede ser escrita en la forma

$$\psi = e^{ikx} \sum_n e^{-ik(n-a)x} \phi(x - na)$$

la cual, por comparación con la ec. (6.9), da

$$u(x) = \sum_n e^{-ik(n-a)x} \phi(x - na).$$

Entonces

$$u(x + a) = \sum_n e^{ik[x - (n-1)a]} \phi[x - (n-1)a].$$

Si el número N de átomos que constituyen la red es muy grande de modo que podamos despreciar los efectos de los extremos, las sumas que aparecen en ambas expresiones de u son idénticas y $u(x) = u(x + a)$, como lo requiere el teorema de Bloch.

Para hallar la energía media de un electrón descrito por la función de onda (6.26), aplicamos la ec. (2.51); esto es,

$$\bar{E} = \frac{\int \psi^* \mathbf{H} \psi dx}{\int \psi^* \psi dx}, \quad (6.27)$$

donde \mathbf{H} es el operador hamiltoniano del electrón, dado por

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + E_p(x),$$

y $E_p(x)$ es la energía potencial periódica del electrón en la red. Un cálculo directo, que omitimos, da

$$\bar{E} = E_{at} - \alpha - 2\beta \cos ka \quad (6.28)$$

Donde E_{at} es esencialmente la energía del estado atómico asociado con las funciones de onda $\phi(x - na)$ y α y β son constantes apropiadas. La ecuación (6.28) muestra que los valores de \bar{E} están entre $E_{at} - \alpha - 2\beta$ y $E_{at} - \alpha + 2\beta$, dependiendo del valor de k . En otras palabras el ancho de la banda es 4β . Los valores de E , α y β dependen del estado atómico a través de las funciones de onda ϕ ; por consiguiente, hay una serie de bandas de energía, cada una relacionada con un estado atómico. La fig. 6-33 muestra el gráfico de la expresión (6.28) para varias bandas. Las porciones correspondientes a cada una de las zonas de Brillouin están indicadas con líneas gruesas. La energía de la partícula libre está representada también por medio de la parábola de trazos. Observar la semejanza con la fig. 6-25. En lugar de escoger varios intervalos de k para expresar las zonas de Brillouin, hubiéramos podido limitar k al intervalo $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ para todas las bandas y usar solamente las porciones centrales de las curvas para las diferentes zonas.

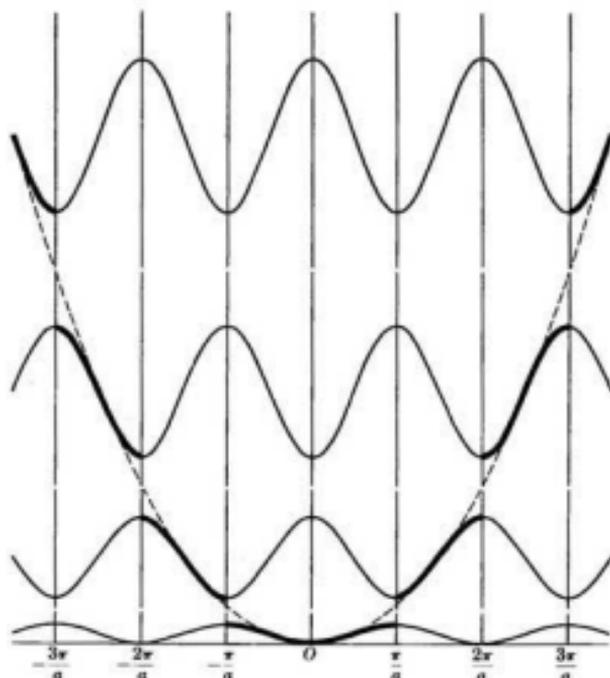


Fig. 6-33. Energías permitidas en la aproximación enlace apretado.

6.6 Conductores, aisladores y semiconductores

Una propiedad interesante de los sólidos es su conductividad eléctrica. Algunos materiales, llamados tradicionalmente *aisladores*, son muy pobres conductores de la electricidad (ejemplos: el diamante y el cuarzo, y en general, la mayoría de los sólidos iónicos y covalentes). Otros sólidos son excelentes *conductores* de la electricidad; en este grupo están los metales como el cobre y la plata. (Una idea cuantitativa nos la da el cobre cuya conductividad eléctrica a temperatura ambiente es 10^{20} veces mayor que la del cuarzo.) Entre estos dos grupos extremos hay una tercera clase de sólidos, llamados *semiconductores*. Aunque los semiconductores son peores conductores de la electricidad que los metales, su conductividad aumenta con la temperatura, mientras que la de los metales disminuye. El germanio y el silicio son semiconductores típicos.

Una de las razones más importantes del triunfo inicial de la teoría de bandas fue que permitió una explicación simple de esta marcada diferencia en el comportamiento eléctrico de los sólidos. Haremos nuestro primer análisis por medio del modelo de electrones libres, el cual refinaremos más adelante tomando en consideración la estructura periódica de la red.

Consideremos un metal que tiene la estructura de bandas ilustradas en la fig. 6-34, que podría corresponder, por ejemplo, a los niveles de energía del sodio ($Z=11$). Las bandas correspondientes a los niveles atómicos $1s$, $2s$ y $2p$ están completamente llenas debido a que las respectivas capas atómicas están completas. Pero la banda $3s$, que puede acomodar hasta dos electrones por átomo, tiene sólo la mitad completa, ya que el nivel $3s$ en cada átomo de sodio tiene solamente un electrón. Debido a la excitación térmica, algunos electrones de la banda $3s$, que tienen una energía del orden de la de Fermi para esta banda, ganan una energía del orden de kT (cerca de $0,025$ eV a temperatura ambiente) y su distribución entre los estados de energía de la banda se asemeja a la de la fig. 6-22. Bajo la acción de un campo eléctrico externo, estos electrones pueden, sin violar el principio de exclusión, adquirir pequeñas cantidades adicionales de energía y pasar a cualquiera de los muchos estados vacíos vecinos dentro de la banda. En contraste con la excitación térmica desordenada, los electrones excitados por el campo eléctrico ganan momentum en la dirección opuesta al campo; esto origina un movimiento colectivo a través del cristal, que constituye una corriente eléctrica.

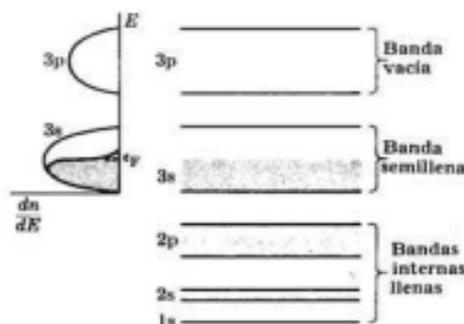


Fig. 6-34. Bandas de energía en un conductor.

Por lo tanto concluimos que una sustancia que tiene una estructura de bandas tal como la de la fig. 6-34 deberá ser un buen conductor de la electricidad y por la misma razón, un buen conductor térmico, siendo los electrones de la banda más alta parcialmente ocupada los responsables de ambos procesos. En otros términos, los buenos conductores de la electricidad (llamados también *metales*) son aquellos sólidos en los cuales la última banda ocupada no está completamente llena.

Realmente la situación es ligeramente más compleja debido a la posible superposición de las bandas más altas. La fig. 6-35 muestra la estructura real de las bandas del sodio. A la distancia r_0 en el metal, cerca de $3,67 \times 10^{-10}$ m, el nivel $2p$ permanece prácticamente sin perturbarse, pero las bandas correspondientes a los niveles atómicos $3s$ y $3p$ se superponen. Por consiguiente, los electrones de conducción tienen muchos más estados disponibles que los correspondientes a la banda $3s$ sola. En efecto, esta superposición de las bandas más altas es la situación común en la mayoría de los metales o conductores. Por ejemplo, consideremos

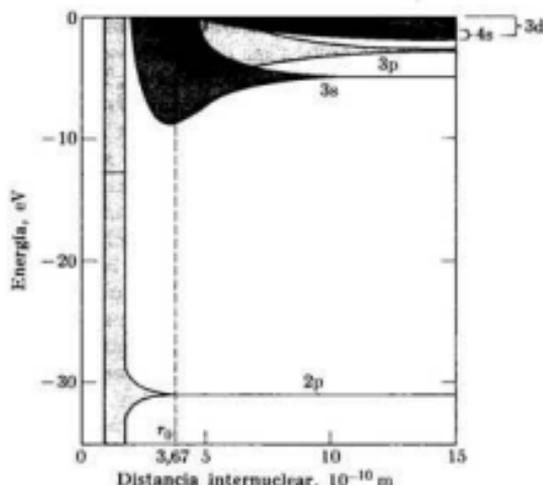


Fig. 6-35. Bandas de energía del sodio.

el caso del magnesio ($Z = 12$). El átomo de magnesio tiene la configuración $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ y por consiguiente todas las capas atómicas están llenas. Sin embargo, el primer nivel excitado, $3p$, está bastante cerca del $3s$. En el estado sólido la estructura de bandas es similar a la de la fig. 6-35 para el sodio. Las bandas $3s$ y $3p$ están indicadas esquemáticamente en la fig. 6-36. Normalmente, no habiendo superposición, la banda $3s$ debería estar llena y la $3p$ vacía, y el magnesio debería ser un aislador, como se explica más adelante. Pero debido a la superposición, los electrones más altos de la banda $3s$ tienen a su disposición los estados de energía más baja de la banda $3p$. En consecuencia algunos de los electrones $3s$ pasan a ocupar algunos de los niveles $3p$ bajos hasta que se establece un nivel de energía de equilibrio común para ambas bandas. Como el número total de niveles de energía disponibles de las bandas $3s$ y $3p$ es $2N + 6N = 8N$ y tenemos solamente $2N$ electrones, quedan $6N$ estados vacíos accesibles. Por consiguiente

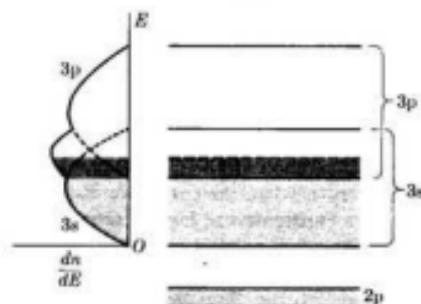


Fig. 6-36. Superposición de las bandas de energía en un conductor.

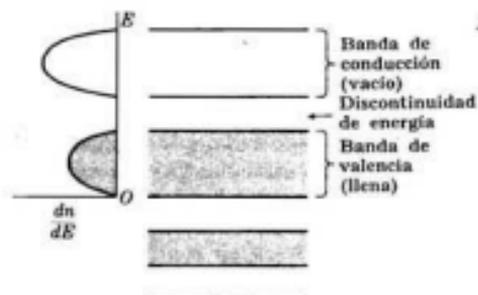


Fig. 6-37. Bandas de energía de un aislador.

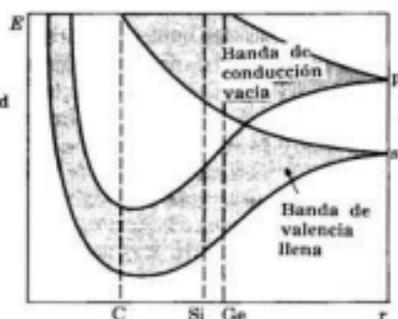


Fig. 6-38. Estructura de las bandas de energía para el diamante (C), silicio (Si) y germanio (Ge).

el magnesio deberá ser un buen conductor; esto está de acuerdo con los hechos experimentales. Aquellas sustancias cuyos átomos tienen capas completas pero que en el estado sólido son conductores debido a que una banda llena y una vacía están superpuestas, son a menudo llamados *semimetales*.

En el grupo de los metales de transición, como el hierro, las bandas que se superponen son 3d, 4s y 4p, y el número de electrones es insuficiente para llenar estas bandas. Análogamente, en el grupo de las tierras raras, las bandas traslapadas involucradas son 4f, 5d, 6s y 6p. Por consiguiente estos elementos son conductores en el estado sólido.

Consideremos ahora el caso de una sustancia en la cual la banda más alta o de valencia está completamente llena y no se superpone con la siguiente, que está completamente vacía (fig. 6-37). Como todos los estados de la banda de valencia están ocupados, la energía del electrón está "congelada", esto es, los electrones no pueden cambiar su estado dentro de la banda sin violar el principio de exclusión. La única posibilidad para excitar un electrón es transferirlo a la banda de conducción vacía; pero esto puede requerir una energía de algunos electronvolts. En consecuencia, un campo eléctrico aplicado no puede acelerar los electrones en la banda de valencia y por lo tanto no puede producir una corriente eléctrica. Esta sustancia es entonces un aislador. (Por supuesto que a una temperatura suficientemente alta o en un campo eléctrico muy intenso, algunos electrones pueden ser excitados a la banda de conducción y entonces es posible una corriente eléctrica.) La mayoría de los sólidos covalentes, los cuales están compuestos de átomos que tienen un número par de electrones de valencia, son aisladores. La fig. 6-38 muestra un esquema simplificado de bandas en el diamante (C). Las bandas corresponden a los niveles atómicos 2s y 2p del diamante, los cuales pueden acomodar hasta 8 electrones. Sin embargo, el átomo de carbono tiene solamente cuatro electrones disponibles para estos niveles (recordar las figs. 4-7 y 4-10). A medida que los átomos están más cerca uno del otro, las bandas 2s y 2p comienzan a superponerse. A menor distancia interatómica, se desdoblán en dos bandas, acomodando cada una cuatro electrones

por átomo. (A esta conclusión se llega por medio de un cálculo detallado.) Entonces los cuatro electrones de cada átomo están normalmente en la banda más baja o de valencia, mientras que la banda superior está vacía. A la distancia de equilibrio en el diamante, alrededor de $1,5 \times 10^{-10}$ m (indicada con C en la fig. 6-38), la discontinuidad que separa la banda más baja o de valencia de la superior o vacía es cerca de 5 eV. Esta es una discontinuidad de energía relativamente grande que explica por qué el diamante es tan buen aislador.



Fig. 6-39. Bandas de energía y distribución de electrones en un semiconductor.

El mismo esquema de bandas se aplica también al silicio y al germanio (excepto que las bandas corresponden a diferentes niveles de energía y a diferentes energías); también se muestra en la fig. 6-38 la separación de equilibrio de los átomos en el estado sólido. Sin embargo, en este caso, el espaciamiento entre las bandas de valencia y de conducción a la distancia interatómica de equilibrio es mucho menor (1,1 eV en el silicio y 0,7 eV en el germanio), y esto hace más fácil excitar los electrones más altos de la banda de valencia a la banda de conducción. La fig. 6-39 ilustra la situación. A medida que la temperatura crece, más electrones son capaces de saltar a la banda siguiente. Esto da lugar a dos resultados: los pocos electrones de la banda superior o de conducción actúan como si estuvieran en un metal, y los estados vacíos o huecos que quedan en la banda inferior o de valencia actúan de un modo similar, pero como si fueran electrones positivos (además su masa efectiva puede ser diferente, ya que están en una banda diferente de energía). De este modo hay conducción eléctrica proveniente de los electrones excitados en la banda de conducción y de los huecos en la banda de valencia; la conductividad aumenta rápidamente con la temperatura porque más electrones son excitados a la banda de conducción. Por ejemplo, en el silicio, el número de electrones excitados aumenta en un factor de 10^6 cuando la temperatura se eleva desde 250 K hasta 450 K. Por lo tanto, los semi-

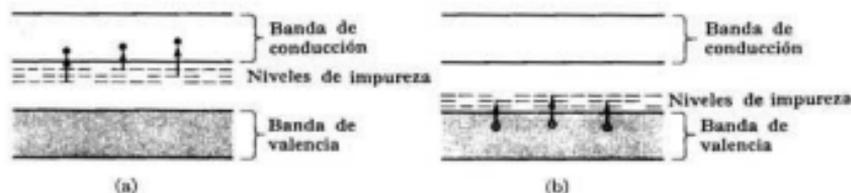


Fig. 6-40. Impurezas en un semiconductor: (a) dadoras o tipo n, (b) aceptadoras o tipo p.

conductores son aisladores en los cuales la discontinuidad de energía entre la banda de valencia y la de conducción es de aproximadamente un eV o menos, de modo que es relativamente fácil excitar térmicamente a los electrones desde la banda de valencia a la de conducción. En la tabla 6-3 se da la discontinuidad de energía de algunos aisladores y semiconductores.

La conducción eléctrica que hemos descrito en los semiconductores se denomina *conductividad intrínseca*. También se puede mejorar la conductividad de un semiconductor con la adición de ciertas impurezas. Supongamos que reemplazamos algunos de los átomos del semiconductor por otros de una sustancia diferente (estos átomos constituyen entonces la impureza) y supongamos que estos átomos de impureza tengan más electrones que los del semiconductor. Por ejemplo, si al silicio o al germanio, que contribuyen con cuatro electrones por átomo a la banda de valencia, añadimos unos pocos átomos de fósforo o arsénico, cada uno de los cuales contribuye con cinco electrones por átomo a la banda de valencia, tenemos un electrón extra por átomo de impureza. Estos electrones adicionales (que no pueden acomodarse en la banda de valencia de la red original) ocupan algunos niveles discretos de energía inmediatamente

TABLA 6-3 Discontinuidades de energía (eV)

Aisladores	eV	Semiconductores	eV
Diamante	5,33	Silicio	1,14
Oxido de zinc	3,2	Germanio	0,67
Cloruro de plata	3,2	Telurio	0,33
Sulfuro de cadmio	2,42	Antimoniuro de indio	0,23

debajo de la banda de conducción; la separación podrá ser de unos pocos décimos de un eV [fig. 6-40(a)]. Estos electrones en exceso son fácilmente liberados por los átomos de impureza y excitados hasta la banda de conducción, contribuyendo así a la conductividad eléctrica del semiconductor. Tales átomos de impureza se llaman *donadores*; el semiconductor se denomina semiconductor tipo n (o negativo).

Recíprocamente, la impureza puede consistir en átomos que tienen *menos* electrones que los del semiconductor. Para los casos en los cuales el silicio y el germanio son las sustancias receptoras, los átomos de impureza podrían ser boro o aluminio, cada uno de los cuales contribuye con sólo tres electrones. En esta situación la impureza introduce niveles discretos de energía vacantes, muy cerca del tope de la banda de valencia [fig. 6-40(b)]. Por consiguiente, es fácil excitar algunos de los electrones más energéticos de la banda de valencia a los niveles de impureza. Este proceso produce estados vacantes, o huecos, en la banda de valencia. Como se explicó previamente, estos huecos actúan como electrones positivos. Tales átomos de impureza se llaman *aceptadores*; el semiconductor se denomina semiconductor tipo p (o positivo).

Para producir cambios significativos en la conductividad de un semiconductor es suficiente tener alrededor de un átomo de impureza por millón de átomos

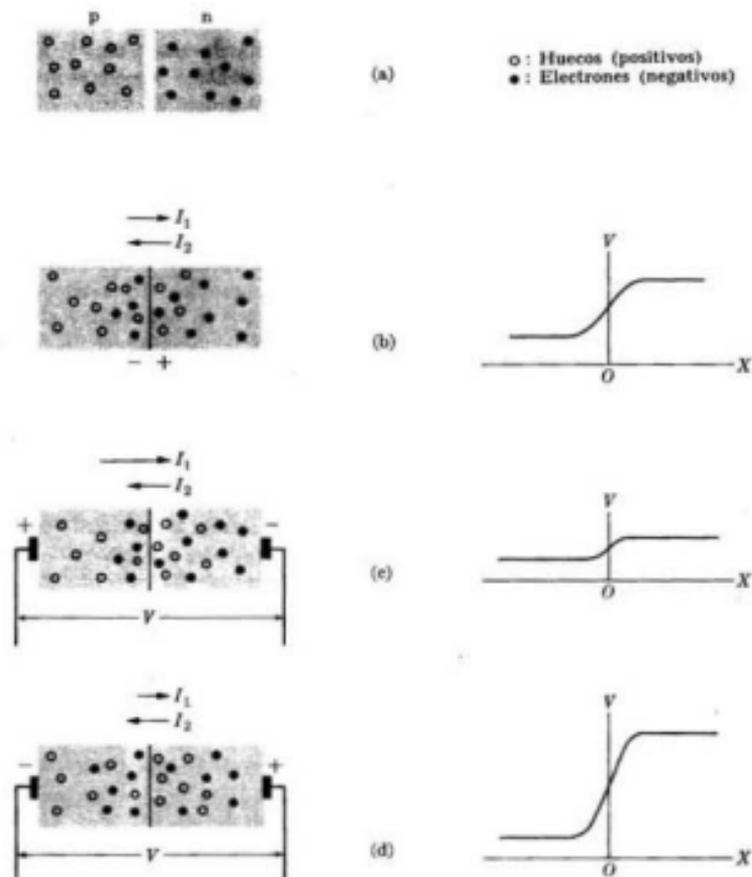


Fig. 6-41. Unión p-n.

del semiconductor. Los semiconductores tienen amplia aplicación industrial como rectificadores, moduladores, detectores, fotocélulas, transistores, etc.

EJEMPLO 6.7. Discutir la unión p-n.

Solución: La unión p-n es una importante aplicación de los semiconductores a los circuitos eléctricos modernos. Supongamos que tenemos dos muestras del mismo semiconductor — digamos germanio — uno del tipo p y el otro del tipo n (fig. 6-41(a)). Si las dos muestras se ponen en contacto (fig. 6-41(b)), se produce una difusión o flujo de huecos de izquierda a derecha y un flujo de electrones de derecha a izquierda. Este doble flujo da lugar a una doble capa de cargas positivas y negativas a ambos lados de la unión, estableciendo una diferencia de potencial a través de la unión

[como se ilustra a la derecha en la parte (b)], la cual, al alcanzarse el equilibrio, se opone al flujo de huecos y electrones a través de la unión. En la discusión que sigue concentraremos nuestra atención en los huecos; la situación para los electrones es igual y opuesta.

Debido a la recombinación de huecos y electrones, el número de huecos en el semiconductor tipo n tiende a disminuir, lo cual permite que una pequeña corriente I_1 fluya continuamente desde el lado p al lado n. Al mismo tiempo, debido a la excitación térmica, se producen pares hueco-electrón en el semiconductor tipo n, y estos huecos pueden fluir a través de la unión al lado p con una corriente I_2 . En el equilibrio ambas corrientes son idénticas, esto es, $I_1 = I_2$ (se puede aplicar un razonamiento similar a los electrones). Si se aplica una diferencia de potencial V , como en la fig. 6-41(c), con el lado p unido al terminal positivo y el lado n al negativo de la fuente de V , la diferencia de potencial a través de la unión disminuye. Esto permite una mayor corriente I_1 hacia la derecha, sin cambiar realmente la corriente I_2 hacia la izquierda, generada térmicamente. De este modo resulta una corriente

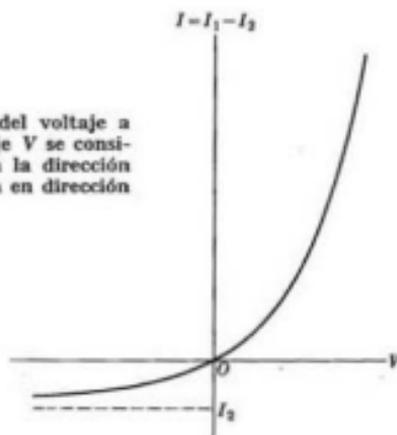


Fig. 6-42. Corriente en función del voltaje a través de una unión p-n. El voltaje V se considera positivo cuando se aplica en la dirección $p \rightarrow n$ y negativo cuando se aplica en dirección opuesta.

netas de huecos $I_1 - I_2$ a través de la unión hacia la derecha, corriente que aumenta muy rápidamente con V , debido al mayor suministro de huecos desde el lado p. Por otra parte, si la diferencia de potencial se invierte, como en la fig. 6-41(d), la diferencia de potencial a través de la unión aumenta. Esto reduce el valor de I_1 , sin afectar sustancialmente a I_2 , ya que la fuente de huecos del lado n está limitado por la temperatura. Luego, existirá una corriente neta hacia la izquierda a través de la unión la cual se aproximará al valor constante I_2 a medida que V aumenta. La fig. 6-42 muestra el gráfico de la corriente neta a través de la unión en función de V , considerando V como positiva cuando se aplica como en la fig. 6-41(c) y negativa en caso contrario. La corriente neta está expresada en forma muy precisa por

$$I = I_1 - I_2 = I_2(e^{qV/kT} - 1).$$

Concluimos que una unión p-n actúa como un rectificador o un detector, ya que favorece el paso de corriente en la dirección $p \rightarrow n$. Esta es la misma función que ejecutan los tubos electrónicos diodo y triodo, pero la unión p-n puede hacerlo con un gasto de energía considerablemente menor.

6.7 Teoría cuántica de la conductividad eléctrica

En la sección anterior hemos estudiado la conducción eléctrica en los sólidos desde el punto de vista del modelo de electrones libres. Sin embargo, para obtener resultados cuantitativos se debe tomar en consideración la estructura periódica del sólido y usar los resultados de la sección 6.5. Para mayor sencillez basaremos nuestra discusión en un modelo unidimensional. Supongamos que el sólido se encuentra en su estado fundamental, sin campo eléctrico aplicado y que los electrones están en la primera zona de Brillouin (el mismo razonamiento se aplica a cualquier otra zona). Los electrones ocupan en forma simétrica los estados más bajos dentro de la banda, de modo que no existe corriente neta [fig. 6-43(a)]. Si se aplica un campo eléctrico, todos los electrones experimentan una fuerza en dirección opuesta al campo y , de acuerdo con la ec. (6.23), sus valores de k aumentan en la dirección de la fuerza. En consecuencia se produce una distribución asimétrica de los electrones dentro del metal, como se muestra en la fig. 6-43(b), lo cual da lugar a una corriente eléctrica neta en el mismo, ya que se mueven más electrones en una dirección que en la dirección opuesta.

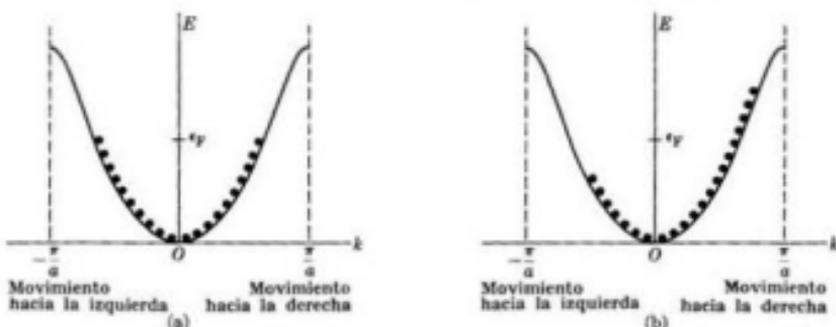


Fig. 6-43. Ocupación de los niveles de energía en la primera zona de Brillouin: (a) sin campo eléctrico aplicado, (b) campo eléctrico externo aplicado de derecha a izquierda.

Mientras el campo eléctrico está aplicado, la ocupación de los estados con k paralelo a la fuerza aumenta con el tiempo y la ocupación de aquéllos con k opuesto disminuye con el mismo. Es decir, la corriente aumenta continuamente con el tiempo, aún cuando el campo eléctrico sea constante, debido a la aceleración continua de los electrones. (Ignoraremos los efectos complejos que pueden resultar cuando algunos electrones alcanzan eventualmente el borde de la zona de Brillouin en $k = \pi/a$; este problema fue discutido previamente en la sección 6.5). El resultado anterior contradice los resultados experimentales. La mayoría de los conductores obedecen la ley de Ohm, que se puede escribir en la forma más común $V = RI$ o en la forma más conveniente

$$j = \sigma \mathcal{E}, \quad (6.29)$$

donde j es la densidad de corriente expresada en $A\ m^{-2}$, \mathcal{E} es el campo eléctrico aplicado, expresado en $N\ C^{-1}$, y σ es la *conductividad* de la sustancia expresada en $\Omega^{-1}\ m^{-1}$. La inversa de la conductividad,

$$\rho = 1/\sigma, \quad (6.30)$$

se denomina *resistividad* y se expresa en $\Omega\ m$.

En cualquiera de las dos formas, la ley de Ohm establece que un campo eléctrico constante produce una corriente eléctrica constante; esto es, cuando se aplica un campo eléctrico los electrones de conducción de un metal adquieren una velocidad media de arrastre constante. Concluimos entonces que debe haber algún mecanismo que impida a los electrones acelerarse continuamente bajo la acción del campo eléctrico aplicado hasta alcanzar el tope de la banda de conducción.

En la teoría clásica, formulada por Drude y Lorentz antes del advenimiento de la teoría cuántica, esta velocidad media constante del electrón era considerada consecuencia de los choques frecuentes de los electrones con los iones positivos constitutivos de la red del metal. Se suponía que en esos choques el electrón transfería el momentum ganado del campo desde el choque previo con otro ion, evitando así su aceleración continua a medida que era arrastrado en la dirección opuesta al campo eléctrico aplicado. Este mecanismo también explicaba el efecto Joule como debido a la energía ganada por los iones a causa de los choques. En la teoría de Drude-Lorentz, la conductividad está dada por

$$\rho = ne^2\tau/m_e, \quad (6.31)$$

donde n es el número de electrones por unidad de volumen y τ es un parámetro llamado *tiempo de relajamiento*. Esta expresión se deduce como sigue. La aceleración de un electrón debida al campo eléctrico aplicado es $a = -e\mathcal{E}/m_e$. Si t es el tiempo transcurrido entre dos choques sucesivos del electrón con los iones de la red, la velocidad media de arrastre de éste es $\bar{v} = \frac{1}{2}at = -e\mathcal{E}t/2m_e$. La densidad de corriente es entonces $j = -en\bar{v} = (ne^2t/2m_e)\mathcal{E}$, lo cual da $\sigma = ne^2t/2m_e$. De la comparación con la ec. (6.31) se deduce que $\tau = \frac{1}{2}t$. Luego, en la teoría de Drude-Lorentz se supone que el tiempo de relajamiento es del mismo orden de magnitud que el tiempo transcurrido entre dos choques sucesivos del electrón con los iones de la red. Para la mayoría de los metales, a la temperatura ambiente, el valor de τ calculado a partir de la medida de σ es del orden de 10^{-14} s. Si l es la separación media de los iones y v_t es la velocidad térmica media de los electrones en ausencia del campo eléctrico, podemos suponer que el tiempo de relajamiento es del orden de magnitud de l/v_t . Para la mayoría de los sólidos l es del orden de 10^{-9} m. Usando para los electrones la misma relación deducida para las moléculas gaseosas, $v_t = \sqrt{3kT/m_e}$ (ver la sección 10.6), encontramos que a temperatura ambiente, v_t es del orden de 10^5 m s⁻¹. Entonces $l/v_t \sim 10^{-14}$ s, de acuerdo con el valor experimental de τ . Empero, a temperaturas bajas (pero no muy cercanas al cero absoluto), la conductividad de los metales varía aproximadamente como la inversa de la temperatura absoluta (esto es, $\sigma \sim 1/T$ ó $\rho \sim T$), como se muestra en la fig. 6-44 para el sodio. Esto significa que el tiempo de relajamiento también varía con la inversa de la temperatura.

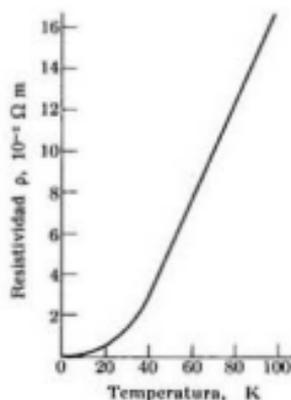


Fig. 6-44. Variación de la resistividad con la temperatura.

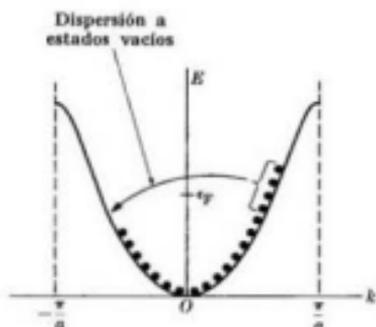


Fig. 6-45. Dispersión de electrones en la primera zona de Brillouin por impurezas.

Cuando comparamos el valor experimental de τ a baja temperatura con el de l/v_F , tenemos que suponer valores de l muchas veces mayores que la separación interiónica a fin de obtener un acuerdo cuantitativo. Este fue una de las primeras indicaciones de que la teoría de Drude-Lorentz no era correcta.

En consecuencia, usando la teoría cuántica, trataremos de explicar primero por qué los electrones mantienen una velocidad media constante, y luego obtener una expresión cuantitativa para la conductividad, similar a la ec. (6.31).

En la teoría cuántica, un electrón se representa por un paquete de ondas. La energía del paquete no está definida aunque está centrada alrededor de la energía E y el número de onda tampoco está definido aunque está centrado alrededor del número de onda k . El movimiento de un paquete de ondas puede ser obstaculizado por la dispersión producida por la red. Inicialmente el paquete de ondas se mueve en una dirección particular con el número de onda k ; después de la dispersión se mueve con el número de onda k' , en dirección diferente. En otras palabras, la dispersión produce una transición $k \rightarrow k'$. En la transición se transfiere algún momentum y energía al dispersor. El efecto del campo aplicado es acelerar a los electrones en una cierta dirección; el efecto de la dispersión es desordenar el movimiento electrónico obstaculizando el efecto acelerador del campo eléctrico.

Se produce un estado estacionario cuando estos dos efectos se equilibran, en sentido estadístico, resultando una velocidad media constante de los electrones de conducción. Para que esta situación se produzca, la dispersión debe ocurrir a cualquier valor k dentro de la banda de conducción. Consideremos, por ejemplo, el caso unidimensional mostrado en la fig. 6-45, que es similar al de la fig. 6-43(b). Como la dispersión no puede violar el principio de exclusión, los electrones deben ser dispersados hacia los estados vacantes. Luego, los electrones que sufren este

efecto son los más energéticos. Estos electrones son dispersados hacia estados vacantes, que en una red lineal tienen momentum opuesto y (en general) menor energía; la figura indica esto esquemáticamente. El dispersor absorbe la energía que pierde el electrón, con el resultado de que los electrones más energéticos invierten frecuentemente su movimiento, y en consecuencia contrarrestan el efecto acelerador del campo eléctrico. La diferencia entre el número de electrones que se mueven hacia la derecha y los que lo hacen hacia la izquierda se mantiene estadísticamente constante, dando lugar a una corriente estacionaria. Aunque hemos usado un modelo unidimensional, se presenta una situación similar para el caso tridimensional. Vemos entonces que la idea de la dispersión del paquete de ondas electrónico explica la ley de Ohm y el efecto Joule. Este último resulta de la transferencia de energía y momentum a los dispersores.

Como ya hemos visto anteriormente (sección 6.5) que un electrón se puede mover libremente por la red cristalina (excepto cuando $k = \pm \pi/a$), nuestra próxima tarea es identificar el origen de la supuesta dispersión. La respuesta general es la siguiente: cualquier irregularidad en la periodicidad de una red perturba el movimiento libre del electrón, y la perturbación se puede considerar como una dispersión. Estas irregularidades en la red se deben a dos factores: (1) *Imperfecciones en el sólido* tales como espacios vacantes, átomos intersticiales y desplazados, dislocaciones e impurezas; por ejemplo, si se agrega una cantidad pequeña de átomos de impureza y éstos se distribuyen uniformemente por todo el sólido, la conductividad se modifica. La contribución a la conductividad debida a la dispersión por imperfecciones en la red es esencialmente independiente de la temperatura. (2) *Movimiento oscilatorio térmico de los iones* constitutivos de la red. Como no todos los iones oscilan en fase, sus vibraciones dan lugar a pequeñas fluctuaciones en el espaciamiento de la red que, aunque pequeñas, están distribuidas por toda la red. Además, como las oscilaciones aumentan la sección transversal efectiva que los iones presentan al movimiento de los electrones, la probabilidad de dispersión es proporcionalmente mayor. El efecto de la vibración de la red es, claramente, dependiente de la temperatura, ya que la amplitud de las vibraciones depende de la energía vibracional y ésta a su vez depende de la temperatura.

Para ser más cuantitativos, podemos usar la ec. (6.31) para expresar la conductividad, reemplazando la masa del electrón m_e por su masa efectiva m^* ; esto es,

$$\sigma = ne^2\tau/m^*. \quad (6.32)$$

En general podemos calcular m^* a la energía de Fermi ϵ_F , ya que la energía de los electrones de conducción no difiere mucho de ϵ_F . Además n no es el número total de electrones por unidad de volumen en la banda de conducción; antes bien n es el número efectivo de electrones que participan en la conducción. Este número es menor que el número total de electrones en la banda de conducción, debido a las restricciones impuestas por el principio de exclusión.

Si P_s es la probabilidad de dispersión de los electrones por unidad de tiempo (expresada en s^{-1}), el tiempo de relajamiento es

$$\tau = 1/P_s. \quad (6.33)$$

En otras palabras, a mayor probabilidad de dispersión, menor tiempo de relajamiento y menor conductividad, como lo requiere nuestro modelo físico. Designemos la probabilidad de dispersión por unidad de longitud con Σ_s (expresada entonces en m^{-1}). Esta cantidad se llama también *sección eficaz macroscópica de dispersión*. Los electrones de conducción se mueven con una velocidad muy cercana a la que corresponde a la energía de Fermi ϵ_F . Designando esta velocidad por v_F , tenemos que $P_s = v_F \Sigma_s$ y la ec. (6.33) se convierte en

$$\tau = 1/v_F \Sigma_s. \quad (6.34)$$

El problema es entonces calcular Σ_s . Este problema es difícil y está fuera del propósito de este libro. Sin embargo, podemos hacer ciertas estimaciones. Es natural suponer que Σ_s es proporcional al número de centros dispersores por unidad de volumen, designado por n_s (expresado en m^{-3}), y así podemos escribir $\Sigma_s = n_s \sigma_s$, donde σ_s (no confundirla con la conductividad) se llama *sección eficaz de dispersión por centro* (se expresa en m^2).

Podemos calcular σ_s usando las técnicas de la mecánica cuántica si conocemos la interacción entre los electrones y el dispersor. La velocidad de Fermi v_F es por definición independiente de la temperatura. También, en el caso de las imperfecciones de la red, los términos que aparecen en Σ_s son básicamente independientes de la temperatura. De este modo verificamos que la conductividad debida a las imperfecciones de la red es independiente de la temperatura. Por otra parte, es razonable suponer (y se puede demostrar teóricamente) que para las vibraciones de la red σ_s es proporcional al cuadrado de la amplitud de las oscilaciones del ion, esto es, $\sigma_s \sim A^2$. Pero la energía de un oscilador es proporcional al cuadrado de la amplitud, y podemos escribir

$$\sigma_s \sim \text{energía vibracional.}$$

A temperaturas no muy cercanas al cero absoluto, la energía vibracional media de un sólido es proporcional a la temperatura absoluta T . Por consiguiente concluimos que $\sigma_s \sim T$, lo cual, de acuerdo a la ec. (6.25), significa que $\tau \sim 1/T$.

Luego, en virtud de la ec. (6.32), tenemos que $\sigma \sim 1/T$, verificándose así que la conductividad debida a la vibración de la red tiene la dependencia apropiada de la temperatura.

Si la sección eficaz macroscópica debida a las impurezas es $\Sigma_{s,i}$ y la debida

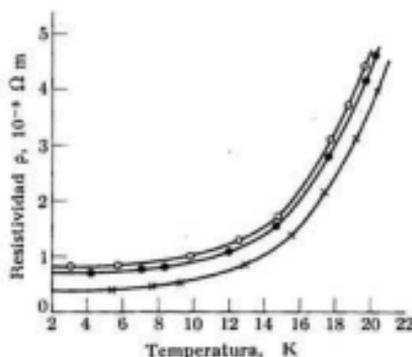


Fig. 6-46. Resistividad de tres muestras diferentes de sodio. [Adaptado de: D. MacDonald y K. Mendelsohn, *Proc. Roy. Soc. (London)* A202, 103 (1950).]

a las vibraciones térmicas de la red es $\Sigma_{s,i}$, tenemos $\Sigma_s = \Sigma_{s,i} + \Sigma_{s,e}$, en tanto supongamos que las dos probabilidades de dispersión son aditivas. En consecuencia $1/\tau = \nu_F \Sigma_s = \nu_F (\Sigma_{s,i} + \Sigma_{s,e})$, y podemos escribir la resistividad del metal en la forma

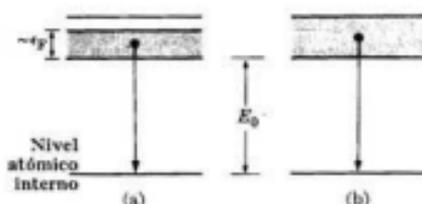
$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m^* \nu_F}{n^2 e} (\Sigma_{s,i} + \Sigma_{s,e}) = \rho_i + \rho_e \quad (6.35)$$

donde ρ_i es la resistividad del metal debida a las impurezas y es por lo tanto independiente de la temperatura (pero varía de una muestra a otra), y ρ_e es la resistividad debida a las vibraciones térmicas; esta última aumenta con la temperatura y es la misma para todas las muestras del mismo metal. La ecuación (6.35) expresa un resultado experimental conocido como *regla de Matthiessen*. La cantidad ρ_i se denomina resistividad residual. La fig. 6-46 muestra la resistividad de tres muestras de sodio con impurezas diferentes en un intervalo de temperatura menor de 20 K. Las curvas ilustran la validez de la ec. (6.35).

6.8 Transiciones radiativas en sólidos

Hasta aquí hemos desarrollado un modelo de sólidos, la teoría de bandas, que explica de un modo sistemático la mayoría de las propiedades de los sólidos; esto, desde luego, es lo más que los físicos esperan de un modelo. Pero ¿hay una evidencia directa de la existencia de las bandas de energía y de las discontinuidades de energía? ¿Es posible medir la energía de Fermi? La respuesta a estas preguntas es afirmativa. Quizás la evidencia más directa provenga de las transiciones radiativas en los sólidos. Discutiremos primero la emisión de rayos X y después los procesos de absorción.

Fig. 6-47. Transición electrónica por emisión de rayos X desde la banda más alta a un estado atómico interno vacante; (a) conductor, (b) aislador.



En los átomos, la emisión de rayos X ocurre cuando un electrón situado en una de las capas más externas pasa a un estado vacante dejado en una de las capas más internas (sección 4.7). De acuerdo con la teoría de bandas, podemos decir que en los sólidos la emisión de rayos X tiene lugar cuando, por ejemplo, un electrón en la banda más alta experimenta una transición a una banda a nivel más bajo donde existe un estado vacante, como se indica en la fig. 6-47. Estos estados vacantes se producen bombardeando el sólido con electrones o por absorción de radiación. El nivel de energía más bajo o final en la transición es

prácticamente idéntico a los niveles de energía atómicos, ya que, como se explicó anteriormente, tales niveles no son afectados cuando se forma el sólido.

En el caso atómico, una transición dada corresponde a niveles inicial y final de energía bien definidos, resultando un fotón de cierta energía o una línea de longitud de onda determinada. Pero la teoría de bandas sugiere una situación diferente en el caso de los sólidos. El electrón que hace la transición puede partir desde cualquiera de los niveles posibles de energía de la banda más alta y por lo tanto la energía de los fotones emitidos tiene una dispersión del orden de ϵ_F (esto es, los fotones tienen energías comprendidas entre E_0 y cerca de $E_0 + \epsilon_F$).

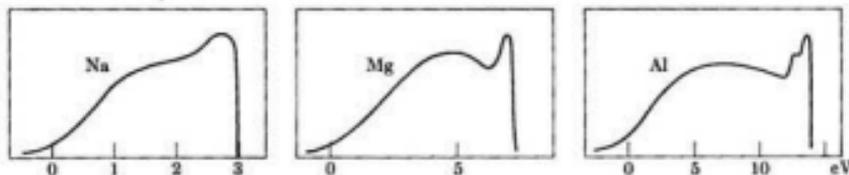


Fig. 6-48. Distribución de intensidades en las transiciones por emisión de rayos X para el sodio, el magnesio y el aluminio. [Adaptado de: H. O'Bryan y H. Skinner, *Phys. Rev.* 45, 370 (1934).]

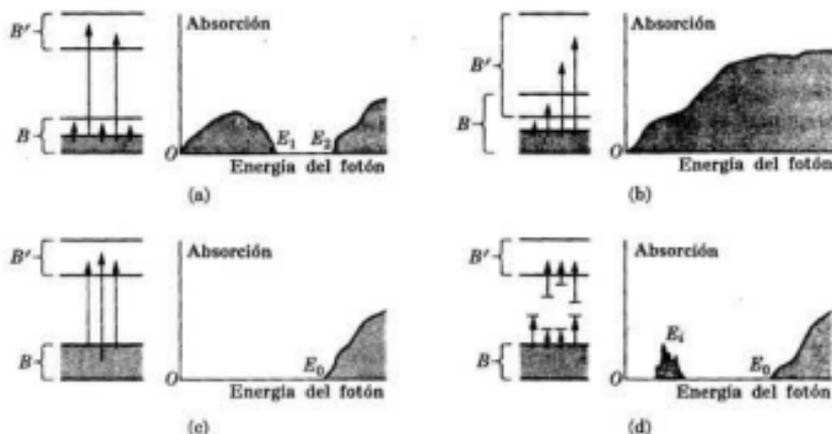


Fig. 6-49. Transiciones por absorción de rayos X en un sólido.

En el caso de un aislador, la dispersión de energía es igual al ancho de la banda. En consecuencia, en lugar de una sola línea el espectro de rayos X consiste en una banda de longitudes de onda. Esto es en efecto lo que se observa experimentalmente. La fig. 6-48 ilustra las distribuciones de intensidad obtenidas por vía experimental para las transiciones de rayos X al nivel 2p en el sodio, el magnesio y el aluminio. Estas distribuciones de intensidad son calculadas teórica-

mente multiplicando dn/dE , el número de electrones por unidad de volumen y por unidad de intervalo de energía en torno de la energía E , y por la probabilidad $T(E)$ de una transición desde la energía E en la banda al nivel inferior de energía. Esto es,

$$I(E) \sim (dn/dE) \times T(E).$$

En la sección 6.4 hemos considerado ya la cantidad dn/dE y podemos calcular $T(E)$ según los métodos de la mecánica cuántica (ver sección 2.11). Obviamente ocurre una caída abrupta de la intensidad para $E \sim \epsilon_F$. En efecto, la dispersión de energía que se muestra en los gráficos de la fig. 6-48 es del mismo orden de magnitud que los valores de ϵ_F dados en la tabla 6-1. Los picos que muestran el magnesio y el aluminio se deben a la contribución de los electrones de la banda 3p, mientras que en el sodio todos los electrones están en la banda 3s.

Consideremos ahora el caso de la absorción. La fig. 6-49 indica algunas situaciones típicas. En (a) tenemos un conductor con la banda B superior parcialmente llena y separada por una discontinuidad de energía de la banda vacía B' . Los electrones de B pueden ser excitados hasta los estados vacíos cercanos en la misma banda cuando absorben fotones con energías entre cero y la energía necesaria para alcanzar el tope de la banda. Los otros fotones que pueden ser absorbidos son aquellos que llevan un electrón desde B hasta B' . Por lo tanto el espectro de absorción tiene la forma que se muestra en la fig. 6-49(a), con una discontinuidad para la región de energía en la cual no se puede absorber fotones. Si las bandas B y B' se superponen, como en la fig. 6-49(b) no existe discontinuidad de energía y resulta un espectro de absorción continuo. En el caso de un aislador [fig. 6-49(c)], sólo son posibles transiciones de la banda de valencia B a la banda de conducción B' . Por consiguiente, para inducir transiciones, los fotones deben tener una energía mínima de unos pocos eV. En la fig. 6-49(c) se muestra el espectro de absorción resultante. Este sería el caso de los semiconductores, excepto que debido a la relativa pequeñez de sus discontinuidades de energía, algunos electrones ocupan la banda B' ; en consecuencia el espectro de absorción se asemeja a la situación ilustrada para el caso (b). Los defectos de la red, principalmente las impurezas, tienen importantes consecuencias porque introducen nuevos niveles de energía, que pueden encontrarse en las discontinuidades de energía [fig. 6-49(d)]. Las transiciones de electrones a estos niveles de energía permiten la absorción de fotones de energías menores que las necesarias para ir de B a B' y el espectro de absorción es como el ilustrado.

En la región visible del espectro electromagnético los fotones tienen energías en el intervalo 1,6 eV hasta 3,2 eV. Un sólido es transparente u opaco según sus propiedades de absorción en ese intervalo de energía. Por ejemplo, todos los conductores y semiconductores son opacos, porque tienen curvas de absorción similares a las dadas en la fig. 6-49(b). Los aisladores puros son transparentes si E_g en la fig. 6-49(c) es mayor que aproximadamente 3,2 eV. Pero si a consecuencia de las impurezas, los picos E_i de la fig. 6-49(d) caen en la región visible, el aislador es coloreado (o hasta opaco). Por esta razón estas impurezas se denominan *centros de color* o *centros F* (del alemán *Farbe*: color). Por ejemplo, el corindón puro (Al_2O_3) debería ser transparente, pero el rubí (que es Al_2O_3 con

algunas impurezas de cromo) presenta un intenso color rojo. Esto se debe a que los átomos de cromo inducen una absorción fuerte en la región verde del espectro, por lo cual el sólido se ve de color rojo al ser iluminado con luz blanca.

Otra propiedad radiativa importante de los sólidos es la *luminiscencia*. En general, cuando los electrones de los átomos, moléculas o sólidos son excitados por algún medio (absorción de radiación o bombardeo electrónico, por ejemplo), tienen lugar varios procesos que compiten entre sí para producir desexcitación (transiciones radiativas y choques inelásticos, por ejemplo). En algunos casos el proceso favorecido es la transición radiativa y la sustancia brilla cuando se ilumina con radiación de longitud de onda apropiada o es excitada por algún otro medio. Las sustancias que tienen esta propiedad se llaman luminiscentes. Esta propiedad de los sólidos está muy relacionada con las impurezas y los defectos de la red. La fig. 6-50 ilustra algunos procesos que tienen lugar en sólidos luminiscentes. Cuando se lleva un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción, deja un hueco en la banda de valencia [fig. 6-50(a)]. En una red perfectamente pura y regular, el electrón usualmente regresa a la banda de valencia, aunque puede tardar algo en hacerlo, ya que tanto los electrones como los huecos tienen gran movilidad y pueden moverse en direcciones diferentes.

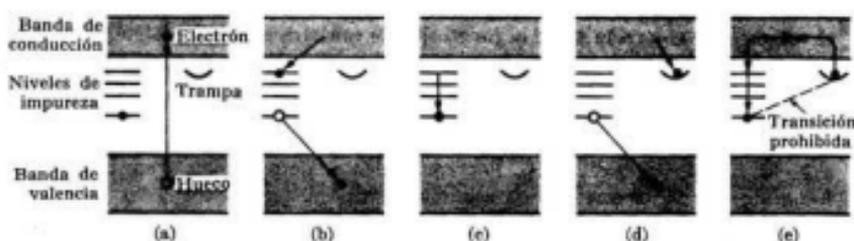


Fig. 6-50. Mecanismo de la luminiscencia.

Empero, si la red tiene alguna impureza que introduzca niveles de energía en la región prohibida, un electrón que yace en un nivel de impureza bajo puede llenar el hueco de la banda de valencia, mientras el electrón de la banda de conducción puede caer en uno de los niveles de impureza de energía alta (normalmente vacíos), como se muestra en la fig. 6-50(b). Generalmente estas transiciones involucran fotones de poca energía, los cuales no caen en la región visible. Finalmente, el electrón puede pasar de un nivel de impureza de alta energía a uno vacío de baja energía, emitiendo radiación de menor energía (mayor longitud de onda) que la radiación incidente; esto constituye la luminiscencia [fig. 6-50(c)]. En algunos casos, en lugar de pasar por el proceso ilustrado en la fig. 6-50(b), el electrón de la banda de conducción puede pasar a un nivel de energía llamado *trampa*, desde el cual está prohibida una transición radiativa al nivel de energía fundamental de impureza [fig. 6-50(d)]. En tal caso, el electrón se encuentra en un estado similar al de un átomo o molécula en un estado metaestable; el electrón atrapado debe esperar hasta que, por algún mecanismo, regrese a la banda de

conducción, después de lo cual sigue los pasos (b) y (c), como se muestra en la fig. 6-50(e). Debido al retardo involucrado, que puede ser de muchos segundos, el proceso se denomina *fosforescencia*. Estas sustancias se denominan entonces *fosforescentes*. Una de éstas es el sulfuro de zinc. Los materiales fosforescentes se usan en las pantallas de los tubos de rayos catódicos y de TV, así como en los detectores de centelleo que se emplean para detectar los rayos γ . Una sustancia fosforescente ampliamente usada en los detectores de centelleo es el NaI activado con Tl.

Bibliografía

1. "Materials", *Sci. Am.*, septiembre de 1967, el número completo
2. "Modern Study of Solids", J. Patterson, *Am. J. Phys.* **32**, 269 (1964)
3. "Quantum Physics in America Between the Wars", J. Slater, *Physics Today*, enero de 1968, pág. 43
4. "The Structure of Crystal Surfaces", L. Germer, *Sci. Am.*, marzo de 1965, pág. 32
5. "Resource Letter SCR-1 on Semiconductors", P. Handler, *Am. J. Phys.* **32**, 329 (1964)
6. "Energy Propagation in a Finite Lattice", W. Band y A. Bhatti, *Am. J. Phys.* **33**, 930 (1965)
7. *Introduction to Semiconductor Physics*, R. Adler y R. Longini. John Wiley, New York, 1963
8. *Introducción a la física del estado sólido*, C. Kittel. Reverté, Barcelona, 1965
9. *Structure of Matter*, W. Finkelburg. Academic Press, New York, 1964, cap. 7
10. *Quantum Theory of Matter*, J. Slater. McGraw-Hill, New York, 1951, caps. 10, 12, 13 y 14
11. *The Feynman Lectures on Physics*, vol II, R. Feynman, R. Leighton y M. Sands. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1963, cap. 30; vol. III, caps. 13 y 14

Problemas

6.1 Probar que el número de enlaces carbono-carbono en el diamante es dos veces el número de átomos de carbono (ver fig. 6-1). La energía necesaria para disociar un mol de diamante es 170 kcal. Determinar la energía por enlace y expresarla en eV. Comparar esta energía con la energía por enlace en los compuestos sp^3 .

6.2 La constante de Madelung para la estructura cúbica del ZnS es 1,638. Calcular la energía de enlace para el ZnS, para el cual $r_0 = 2,35 \text{ \AA}$, y para el CuCl, que tiene la misma estructura, pero con $r_0 = 2,34 \text{ \AA}$. Los valores experimentales son 37,9 eV/molécula para el ZnS y 9,81 eV/molécula para el CuCl.

6.3 Calcular la energía de enlace del CsCl, para el cual $r_0 = 3,56 \text{ \AA}$. Comparar con el valor experimental que es de 6,72 eV/molécula.

6.4 El módulo volumétrico de elasticidad de un sólido se define como $\kappa = - (1/V) (\partial V / \partial p)$. Cuando la energía es función sólo del volumen, la anterior definición es equivalente a $\kappa = V(d^2U/dV^2)$. Demostrar que para un cristal iónico,

$$\kappa = \frac{(n-1)z^2e^2}{18\pi\epsilon_0R_0^3}$$

Calcular el módulo volumétrico de elasticidad del NaCl, suponiendo que $n = 9$.

Comparar con el valor experimental $4,2 \times 10^{11}$ N m⁻².

6.5 La velocidad del sonido en los sólidos es del orden de magnitud de 3×10^3 m s⁻¹. Las distancias interatómicas en los sólidos son del orden de 3×10^{-10} m. Estimar el orden de magnitud de la frecuencia de corte, suponiendo una red lineal.

6.6 Mostrar que para valores pequeños de ka , los dos valores de ω dados por la ec. (6.7) pueden ser aproximados por

$$\omega^2 = 2\beta \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)$$

y

$$\omega^2 = \frac{2\beta}{M_1 + M_2} (ka)^2.$$

6.7 Probar que para $k = \pi/2a$, los dos valores de ω dados por la ec. (6.7) son

$$\omega^2 = 2\beta/M_1 \quad \text{y} \quad \omega^2 = 2\beta/M_2.$$

6.8 En la mayoría de los cristales iónicos diatómicos, la absorción de radiación electromagnética por resonancia cae en el infrarrojo (longitud de onda de unos 10^{-4} m). La distancia interatómica es del orden de 2×10^{-10} m. Estimar el error que se comete cuando se usa la ec. (6.8) para obtener la frecuencia de la radiación infrarroja absorbida mediante resonancia por la red cristalina. Suponer que M_1 y M_2 son las masas de los átomos de sodio y de cloro, respectivamente.

6.9 Usando la frecuencia de máxima absorción tomada de la curva de absorción del NaCl dada en la fig. 6-3, calcular la constante elástica de la ec. (6.8). Calcular las frecuencias de corte para las ramas acústica y óptica de oscilación.

6.10. En la mayoría de los metales la distancia interatómica es del orden de 4×10^{-10} m. Estimar el ancho de la banda de conducción. Comparar con los valores de la energía de Fermi dados en la tabla 6-1.

6.11 Calcular el número n_0 de electrones por unidad de volumen de la banda de conducción del litio, el cobre y el aluminio usando los valores de la energía de Fermi que aparecen en la tabla 6-1.

Comparar los resultados con el número de electrones de valencia por unidad de volumen para estos átomos.

6.12 Estimar el ancho de una banda del sodio metálico, usando la ec. (6.14) y una distancia de equilibrio entre iones de $3,67 \times 10^{-10}$ m. Comparar la estimación con la fig. 6-35.

6.13 El sodio tiene una densidad de $9,7 \times 10^2$ kg m⁻³. Suponiendo que cada átomo contribuya con un electrón a la banda de conducción, determinar la energía de Fermi para el sodio. Repetir para el calcio, suponiendo que dos electrones por átomo contribuyen a la banda de conducción.

6.14 Estimar la susceptibilidad paramagnética de Pauli para el sodio. Comparar con el valor experimental de la susceptibilidad magnética del mismo.

6.15 Se puede probar que en una red cuadrada de lado a los bordes de las zonas de Brillouin están dados por los valores de k_x y k_y , que satisfacen la ecuación

$$n_1 k_x + n_2 k_y = \pi(n_1^2 + n_2^2)/a,$$

donde n_1 y n_2 son enteros positivos o negativos. Hacer un gráfico de los bordes de las zonas de Brillouin, usando k_x y k_y como coordenadas. Si se hace el gráfico de la energía sobre un eje perpendicular al plano $k_x - k_y$, tratar de visualizar la superficie de energía. Observar de paso que la ecuación anterior se reduce a la ec. (6.21) para una red lineal. [Sugerencia: formar todas las combinaciones posibles de n_1 y n_2 iguales a 0, ± 1 , ± 2 , ... y hacer el gráfico de las ecuaciones resultantes.]

6.16 Usando un procedimiento similar al del ejemplo 6.4, probar que la energía media de un electrón descrito por la función de onda $\psi = e^{ikx}u(x)$ es

$$\bar{E} = \hbar^2 k^2 / 2m + (\hbar k / m) \bar{p}_w + \bar{E}_w,$$

donde \bar{p}_w fue definido en el ejemplo 6.4 y

$$\bar{E}_w = \int u^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + E_p(x) \right) u dx.$$

Analizar el significado de cada término. [Sugerencia: para el operador correspondiente a la energía, ver la tabla 2-4.]

6.17 La energía de un electrón en un cristal anisótropo se puede expresar por $E = \alpha_x k_x^2 + \alpha_y k_y^2 + \alpha_z k_z^2$, donde k_x , k_y y k_z son las componentes del vector número de onda \mathbf{k} en las direcciones de los ejes principales. Hallar la masa efectiva según cada uno de los ejes de coordenadas y las ecuaciones de movimiento.

6.18 Usando la función de onda descrita por la ec. (6.26) en la ecuación para la energía media, mostrar que resulta la ec. (6.28). [Sugerencia: despreciar los términos que involucran dos funciones ψ , si se apartan más de una celda.]

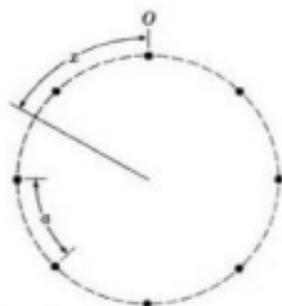


Figura 6-51

6.19 En el supuesto que un electrón se mueva sobre una trayectoria circular a lo largo de la cual haya N iones igualmente espaciados la distancia a (fig. 6-51): (a) Usando las funciones de onda tipo Bloch, dadas por la ec. (6.26), probar que los valores posibles de k están dados por $k = 2\pi s / Na$, donde $s = 0, 1, 2, \dots, N-1$. (b) Aplicar este resultado, combinado con la ec. (6.28), a los electrones π del benceno (fig. 5-28) para mostrar que los niveles posibles de energía son

$$E_{at} = \alpha - 2\beta, \quad E_{at} = \alpha - \beta, \\ E_{at} = \alpha + \beta, \quad \text{y} \quad E_{at} = \alpha + 2\beta,$$

donde el segundo y tercer nivel son doblemente degenerados (las constantes E_{at} , α y β se introdujeron en el ejemplo 6.6).

6.20 Usando los resultados del problema 6.19, (a) mostrar que la energía de los electrones π del benceno es

$6(E_{at} - \alpha) - 8\beta$ para el estado fundamental y que los primeros estados excitados tienen energías β , 2β y 3β por encima del estado fundamental. (b) Los dos primeros estados excitados del benceno corresponden a 3,8 eV y 4,9 eV. Analizando los niveles de energía observados en el benceno, verificar que β es aproximadamente 2 eV. En base a esta observación, establecer si el benceno es una sustancia coloreada.

6.21 Suponiendo que en una banda la energía de un electrón está dada por la ec. (6.28), (a) hallar el valor de k para el cual la velocidad del electrón es máxima, y (b) obtener una expresión para m^* en función de k .

6.22 Hacer el gráfico de la velocidad y de la aceleración en función de k de un electrón situado en la zona de Brillouin cuya energía está dada por la ec. (6.28).

6.23 Estimar el radio de la órbita del electrón 1s en el sodio ($Z = 11$). Comparar este valor con la distancia de equilibrio entre los iones de sodio y decidir si esos electrones están afectados en el metal.

6.24 Cuando un átomo de impureza está alojado en un semiconductor, podemos suponer que sus niveles de energía se modifican. Verificar que si $E_{i,at}$ es la energía de ionización del átomo de impureza aislado, su energía de ionización cuando está alojado en el semiconductor es $E_{i,sc} = (\epsilon_0/\epsilon)^2 E_{i,at}$, donde ϵ es la permitividad eléctrica del semiconductor. Calcular las energías de ionización del fósforo (P), arsénico (As) y antimonio (Sb), que son impurezas dadoras, cuando están alojadas en el silicio (Si) ($\epsilon/\epsilon_0 = 11,7$) y en el germanio (Ge) ($\epsilon/\epsilon_0 = 15,8$). Comparar con los resultados experimentales. [Sugerencia: recordar las ecs. (3.4) y (3.5) y observar que en la constante de Rydberg se deberá reemplazar ϵ_0 por ϵ cuando el átomo está alojado en un material.]

6.25 Haciendo referencia al problema 6.24, analizar lo que sucede al tamaño de las órbitas electrónicas cuando un átomo de impureza está alojado en un semiconductor. ¿A qué concentración de antimonio alojado en germanio será apreciable la superposición entre las

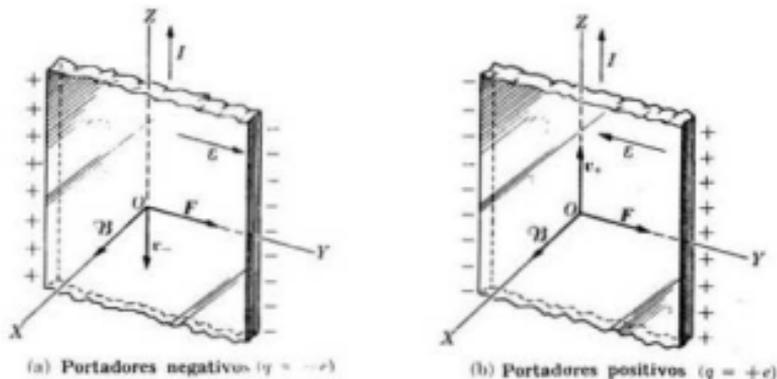


Figura 6-52

órbitas de los electrones externos de los átomos de antimonio adyacentes?

6.26 Un alambre de cobre con una sección transversal de 10^{-5} m^2 transporta una corriente eléctrica de 1,5 A. Suponiendo que haya 5×10^{28} electrones de conducción por m^3 , determinar la densidad de corriente y la velocidad de arrastre de los electrones.

6.27 A temperatura ambiente la conductividad de la plata es $6,14 \times 10^7 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$. El número de electrones de conducción es aproximadamente $6 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$. Estimar el tiempo de relajamiento τ , la velocidad de Fermi y la sección eficaz macroscópica de dispersión Σ_m . Hallar además el camino libre medio del electrón, definido por $l_e = 1/\Sigma_m$.

6.28 Estimar la conductividad del NaCl a temperatura ambiente. El NaCl contiene 1 ppm (parte por millón) de cationes divalentes de impureza.

6.29 Un cristal cúbico contiene una impureza sustitucional en una concentración de 0,1 % (lo que se considera normal para sustancias químicamente puras). Calcular la distancia media entre los átomos de impureza, medida en unidades de distancia interatómica.

6.30 El germanio muy puro que se usa para fabricar dispositivos semiconductores contiene sólo una parte en 10^8 de impurezas que afectan la conductividad eléctrica. ¿Cuál es la distancia media entre las impurezas?

6.31 Cuando una cinta metálica por la que circula corriente eléctrica, se coloca en un campo magnético perpendicular a la cinta, aparece una diferencia de potencial entre los puntos opuestos de las aristas de la cinta (fig. 6-52). Esto se denomina *efecto Hall*. Probar, refiriéndose a la figura, que la dirección de la caída de potencial a través de la cinta depende del signo de la carga de las partículas que originan la corriente. Probar que $R_H = \mathcal{E}/jB = 1/nq$, siendo \mathcal{E} el campo eléctrico que se establece al acumularse las cargas a lo largo de los bordes de la cinta cuando se ha alcanzado el equilibrio; B , el campo magnético; j , la densidad de corriente; n , el número de portadores por unidad de volumen y q la carga transportada. La cantidad R_H se llama *coeficiente de Hall*. [Nota: en la figura, F es la fuerza ejercida por el campo magnético sobre los portadores de carga.]

6.32 Refiriéndose al problema 6.31, probar que la recta que une dos puntos opuestos de la cinta al mismo potencial forma con la dirección de la corriente un ángulo θ dado por $\text{tg } \theta = nq\sigma B$, donde σ es la conductividad eléctrica de la cinta.

6.33 Si cada átomo de oro metálico (densidad $19,3 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$) contribuye con un electrón a la corriente, ¿cuál es el coeficiente de Hall para este metal? Una tira delgada de oro conduce una

corriente de densidad 10^7 A m^{-2} en un campo magnético transversal de 10^{-2} T . ¿Cuál es el desplazamiento angular de las líneas equipotenciales, suponiendo que la conductividad del oro es de $5 \times 10^7 \text{ } \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$? [Sugerencia: ver los problemas 6.31 y 6.32.]

6.34 En el NaCl el nivel de energía

de un centro F está a 2,65 eV por debajo de la banda conducción. ¿Qué longitud de onda absorbe? ¿De qué color es el NaCl que contiene centros F ?

6.35 La discontinuidad de energía en el germanio es de unos 0,75 eV. ¿A qué longitud de onda comienza el germanio a absorber luz?

ESTRUCTURA NUCLEAR

- 7.1 *Introducción*
- 7.2 *Isótopos, isótonos e isóbaros*
- 7.3 *Unidad de masa atómica*
- 7.4 *Propiedades del núcleo*
- 7.5 *Energía de ligadura nuclear*
- 7.6 *Fuerzas nucleares*
- 7.7 *Estado fundamental del deuterón*
- 7.8 *Dispersión neutrón-protón a bajas energías*
- 7.9 *Modelo de capas*
- 7.10 *Transiciones radiativas nucleares*

7.1 Introducción

Para completar nuestro estudio de la estructura del átomo debemos ahora ocuparnos de su núcleo. El núcleo atómico es una aglomeración de protones y neutrones que ocupan una pequeña región en el centro del átomo, siendo su diámetro del orden de 10^{-14} m o sea alrededor de un diezmilésimo del radio atómico. Se designa a los protones y los neutrones con el nombre genérico de *nucleones*. Ambas partículas tienen espín $\frac{1}{2}$ y siguen el principio de exclusión.

Si comparamos la estructura del núcleo con la del átomo, llaman la atención varias características nuevas. En primer lugar, todas las partículas que forman el núcleo tienen prácticamente la misma masa mientras que en los átomos los electrones son muy livianos con respecto al núcleo. Es por esa razón que supusimos (en el capítulo 3) que los electrones se mueven alrededor de un núcleo que permanece fijo en un sistema inercial. En consecuencia no podemos hablar de una fuerza central dominante que actúa sobre las partículas nucleares, producida por un cuerpo que está en el centro del núcleo; más bien debemos imaginar que todas las partículas se mueven bajo la acción de sus interacciones mutuas. A lo sumo, y como simplificación útil, podemos pensar en un campo de fuerza *promedio*, es decir, podemos imaginar que cada partícula se mueve bajo la acción de una fuerza que resulta de promediar las fuerzas producidas por las otras partículas durante su movimiento. En primera aproximación podemos considerar que esta fuerza es central. En segunda aproximación, fuerzas no-centrales adicionales pueden requerirse. Esta hipótesis simplificativa ha demostrado ser muy útil para analizar la estructura nuclear.

En segundo lugar, en un átomo los electrones tienen carga negativa y el núcleo positiva, siendo posible explicar el movimiento electrónico en función de interacciones electromagnéticas entre los electrones y el núcleo. Un núcleo, empero, está compuesto de protones con carga positiva y neutrones sin carga alguna. Por lo tanto, no podemos atribuir la estabilidad del núcleo a la atracción eléctrica. Por el contrario, parecería que la repulsión eléctrica entre los protones haría desintegrar el núcleo. El solo hecho de que existen núcleos compuestos de protones y neutrones es una clara indicación de la presencia de otra interacción además de la electromagnética, la cual no está directamente relacionada con cargas eléctricas y es mucho más intensa que la interacción electromagnética. Esta interacción se denomina *interacción nuclear o fuerte*. Nuestro conocimiento de la interacción nuclear es aún incompleto, pero al menos conocemos algunas de sus características más importantes.

7.2 Isótopos, isótonos e isóbaros

Un núcleo se identifica por el número de protones que tiene, o sea por su *número atómico* Z , y por el número total de partículas o nucleones, llamado *número másico* A . Por lo tanto, el número de neutrones es $N = A - Z$. Se ha introducido el término *nucleido* para designar genéricamente todos los núcleos que tienen los mismos Z y N y por lo tanto el mismo A . En otras palabras, de la misma forma

que todos los átomos con el mismo Z pertenecen al mismo elemento, todos los núcleos de la misma composición (los mismos Z y N) pertenecen al mismo nucleido. Un nucleido se designa con el símbolo del elemento químico al cual pertenece, según el valor de Z , con un superíndice a la izquierda que indica el valor del número másico, tal como ^{12}C , ^{23}Na , ^{107}Ag , ^{238}U . A veces es conveniente escribir explícitamente el número atómico Z , en cuyo caso se añade un subíndice a la izquierda: $^{12}_6\text{C}$, $^{23}_{11}\text{Na}$, $^{107}_{47}\text{Ag}$, $^{238}_{92}\text{U}$.

La fuerza nuclear no requiere una proporción fija de protones y neutrones en el núcleo. Puede haber una flexibilidad considerable en el agrupamiento de los mismos. Aunque sólo hay 92 elementos químicos naturales (11 más han sido producidos artificialmente), hay del orden de 1440 nucleidos conocidos, de los cuales unos 340 existen en la naturaleza y alrededor de 1100 se han producido en el laboratorio. Algunos nucleidos (alrededor de 280) son estables, pero la mayoría son inestables o radioactivos. La fig. 7-1 indica la mayor parte de los nucleidos conocidos. Los núcleos estables están indicados con cuadrados negros y los inestables o radioactivos con los otros símbolos.

Podemos observar en la figura que en los núcleos livianos los protones y neutrones tienden a aparecer en igual número ($N \approx Z$), lo cual indica que la interacción nuclear es independiente de la carga eléctrica. Sin embargo, en los núcleos más pesados el número de neutrones excede al de protones ($N > Z$). Debe haber un exceso de neutrones para producir un efecto estabilizante (a través de las interacciones nucleares); estos neutrones extra compensan el efecto de la repulsión coulombiana entre los protones que tiende a romper el núcleo.

Debido a la gran variedad de nucleidos, los clasificaremos en tres categorías: isótopos, isótonos e isóbaros.

Isótopos: son nucleidos que tienen el mismo número de protones pero diferente número de neutrones; tienen entonces el mismo número atómico Z y número de neutrones N y másico A diferentes. Como un elemento químico queda identificado por su número atómico Z , todos los isótopos correspondientes a un valor dado de Z pertenecen al mismo elemento. Por ejemplo, ^1H y ^2H son isótopos del hidrógeno; ambos núcleos tienen $Z = 1$ pero ^1H tiene $N = 0$ y ^2H tiene $N = 1$. En la fig. 7-1 los isótopos están a lo largo de líneas verticales.

Isótonos: son nucleidos que tienen el mismo número N de neutrones pero número atómico Z (o número de protones) diferente, por lo que tienen también el número másico A diferente. Evidentemente, los isótonos con un valor dado de N no corresponden al mismo elemento químico. Por ejemplo, $^{12}_6\text{C}$ y $^{14}_7\text{N}$ son isótonos; ambos núcleos tienen $N = 7$, pero el carbono tiene $Z = 6$ y el nitrógeno $Z = 7$. En la fig. 7-1 los isótonos están sobre líneas horizontales.

Isóbaros: son nucleidos que tienen el mismo número total de nucleones (o sea el mismo número másico A), pero difieren en número atómico Z y número de neutrones N . Por ejemplo, $^{14}_6\text{C}$ y $^{14}_7\text{N}$ son isóbaros, ya que ambos tienen $A = 14$. Los isóbaros están sobre las líneas a 45° mostradas en la fig. 7-1.

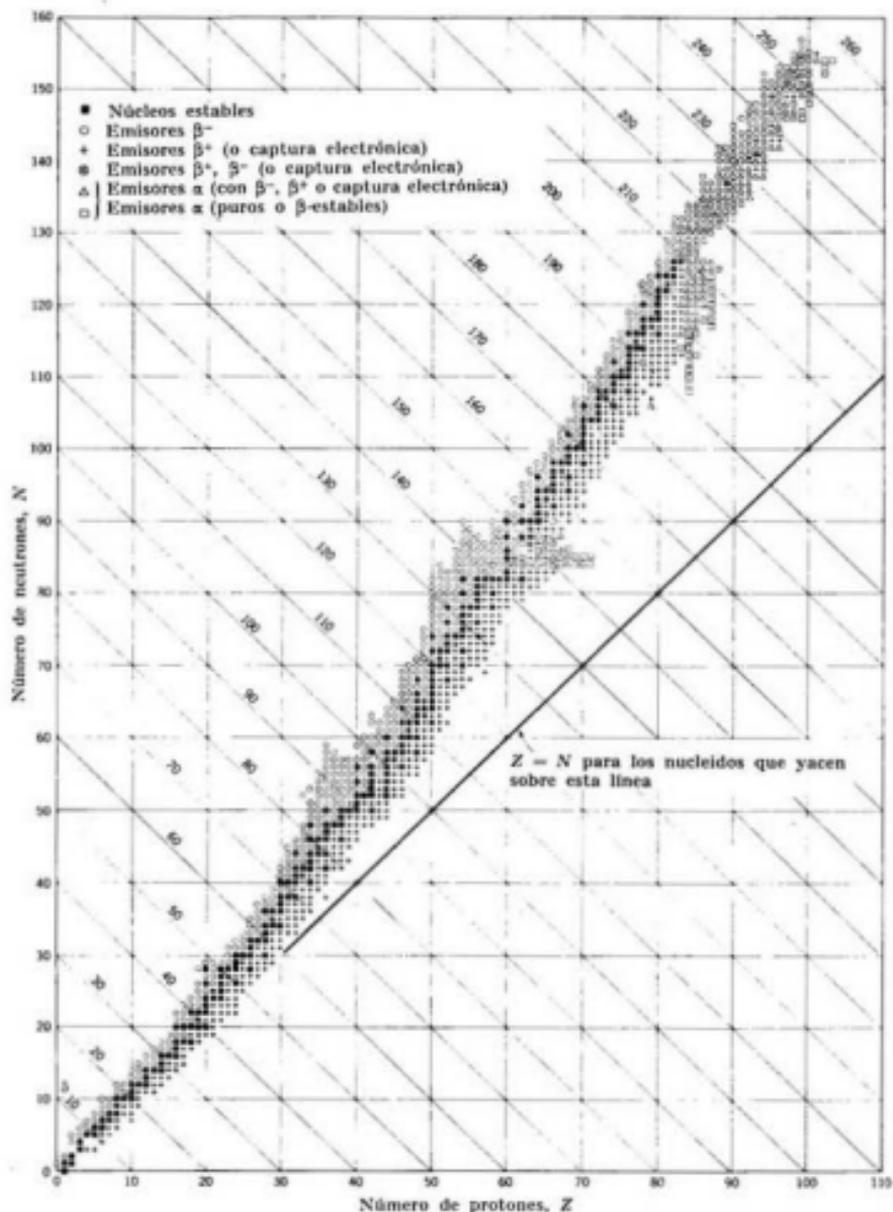


Fig. 7-1. Nucleidos estables y radioactivos. Las rectas a 45° son líneas de igual número másico A.

Algunos elementos químicos se presentan en la naturaleza con una sola variedad de núcleo o isótopo, por ejemplo el ^{19}F . Otros tienen varios isótopos naturales, como el estaño que tiene diez y el carbono que tiene tres: ^{12}C , ^{13}C y ^{14}C . Además, otros cuatro isótopos del carbono han sido producidos artificialmente. De todo el carbono existente en la naturaleza, 98,89 % está en la forma de ^{12}C . La composición isotópica natural de los elementos químicos es bastante uniforme en todo el mundo.

El análisis de las propiedades de los isótopos, isótonos e isóbaros es importante para traer a la luz varias características de la estructura nuclear. Estos estudios nos ayudan, por ejemplo, a predecir cómo se afecta la estabilidad del núcleo cuando se le agrega un neutrón o un protón, o a decidir qué configuraciones de neutrones y protones serán las más estables.

7.3 Unidad de masa atómica

No es necesario expresar las masas de los núcleos en kilogramos para tratar algunas de sus propiedades. En muchos casos es más conveniente usar una unidad especial llamada *unidad de masa atómica* (uma) que es igual a un doceavo de la masa del átomo de ^{12}C . (Nótese que decimos átomo y no núcleo, por lo que esta unidad de masa incluye los electrones orbitales.) Se tiene

$$1 \text{ uma} = \frac{1}{12} \times \text{masa de un átomo de } ^{12}\text{C}.$$

El valor de una uma en kilogramos es

$$1 \text{ uma} = 1,6604 \times 10^{-27} \text{ kg.} \quad (7.1)$$

Un mol de cualquier sustancia es por definición una masa igual a $10^{-3}M$ kg (o M g) donde M es numéricamente igual a la masa atómica (o molecular) de la sustancia expresada en uma. La constante de Avogadro N_A es el número de átomos (o moléculas) que hay en un mol de cualquier sustancia. Como la masa de un átomo (o molécula) es igual a $1,6604 \times 10^{-27}M$ kg, concluimos que

$$N_A = \frac{10^{-3}M}{1,6604 \times 10^{-27}M} = 6,0225 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}.$$

Como N_A es independiente de M , el número de átomos (o moléculas) que hay en un mol es el mismo para todas las sustancias.

Las masas dadas en la tabla 7-1, propiedades de algunos nucleidos, están expresadas en uma. La *masa atómica* de un elemento es la masa promedio basada en la combinación isotópica natural. Así, la masa atómica del carbono no es 12,00000 uma sino 12,01115 uma debido a la presencia en la naturaleza de diferentes isótopos del carbono.

Usando la relación $E = mc^2$, podemos expresar la energía equivalente a una uma en joules o electronvolts. Dejamos que el estudiante verifique que

$$1 \text{ uma} = 9,31478 \times 10^8 \text{ eV} = 931,478 \text{ MeV,}$$

o sea cerca de mil millones de eV (1 GeV).

7.4 Propiedades del núcleo

Los científicos han analizado varias propiedades nucleares, además de la carga y la masa, para obtener una clave de la naturaleza de las fuerzas que mantienen a los protones y los neutrones juntos en un núcleo. A continuación pasaremos revista a algunas de estas propiedades.

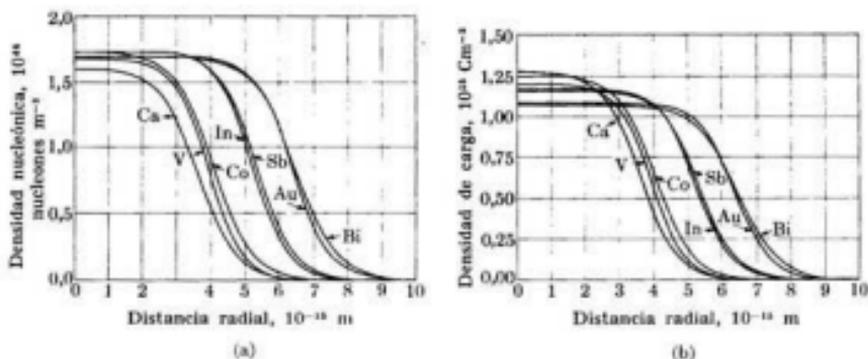


Fig. 7-2. (a) Densidad nuclear y (b) densidad de carga en función de la distancia radial. [De: B. D. Hahn, D. G. Ravenhall y R. Hofstadter, *Phys. Rev.* **101**, 1131 (1956).]

(1) **Tamaño.** Si suponemos que el núcleo es esférico, podemos expresar su tamaño en función de su radio R . Sin embargo, debemos usar el concepto de radio nuclear con bastante cuidado. No debemos imaginar el núcleo como una bola de billar con una superficie bien definida. El valor del radio depende de qué propiedad nuclear elijamos para determinarlo. La densidad de la materia nuclear varía con la distancia al centro del núcleo, tal como se indica en la fig. 7-2(a). La densidad es aproximadamente constante hasta una distancia considerable del centro y luego disminuye gradualmente a cero cerca de la superficie del núcleo. Luego, se puede definir el radio nuclear como la distancia al centro del núcleo para la cual la densidad nuclear se ha reducido a la mitad. Por ejemplo, podemos obtener este radio R midiendo la diferencia de energía de interacción coulombiana entre dos isóbaros adyacentes (es decir, isóbaros cuyos Z difieren en una unidad) o analizando diferentes tipos de procesos nucleares, tal como la dispersión de neutrones rápidos por núcleos. El resultado experimental es que el radio nuclear es proporcional a $A^{1/3}$, donde A es el número másico del núcleo. Esto es,

$$R = r_0 A^{1/3}, \quad (7.2)$$

donde r_0 es una constante, la misma para todos los núcleos. Su valor aceptado es

$$r_0 = 1,4 \times 10^{-15} \text{ m.}$$

También es posible determinar la distribución de carga dentro del núcleo y estimar el radio nuclear a partir de ella. Los experimentos realizados con electrones y muones muy rápidos sugieren una distribución de carga tal como la indicada en la fig. 7-2(b). El radio de la distribución de carga es menor que el de la distribución de masa, y corresponde al valor

$$r_c \approx 1,2 \times 10^{-15} \text{ m.}$$

Algunos núcleos se apartan apreciablemente de la forma esférica y se debe suponer que tienen forma de elipsoide o aun de pera.

Como el volumen de una esfera es $4\pi R^3/3$, concluimos de la ec. (7.2) que el volumen nuclear es

$$V = 4\pi r_0^3 A/3 = 1,12 \times 10^{-45} A \text{ m}^3.$$

Esto es: el volumen de un núcleo es proporcional al número A de nucleones, lo cual sugiere que los nucleones están a distancias medias fijas independientemente del número de partículas; el volumen por nucleón es entonces una cantidad constante, igual para todos los núcleos. Una situación similar se presenta con las moléculas de un líquido o de un sólido.

Otra conclusión es que la materia nuclear tiene densidad constante. Esto se puede ver de la manera siguiente: la masa de un núcleo de número másico A es aproximadamente

$$M = 1,66 \times 10^{-27} A \text{ kg.}$$

En consecuencia la densidad media de la materia nuclear es

$$\rho = \frac{M}{V} = \frac{1,66 \times 10^{-27} A \text{ kg}}{1,12 \times 10^{-45} A \text{ m}^3} = 1,49 \times 10^{18} \text{ kg m}^{-3},$$

que es independiente de A . La densidad es alrededor de 10^{15} veces mayor que la densidad de la materia macroscópica y nos da una idea del grado de compacidad de los nucleones dentro de un núcleo. Muestra también que la materia macroscópica está esencialmente vacía, ya que la mayor parte de la masa está concentrada en los núcleos.

(2) **Momentum angular.** El momentum angular resultante de un núcleo se denomina (por razones históricas) *espín nuclear* y se lo designa con I . Los protones y los neutrones, como los electrones, tienen espín $\frac{1}{2}$. Además, los protones y los neutrones poseen un momentum angular orbital asociado con su movimiento en el núcleo. El momentum angular resultante (o espín) del núcleo se obtiene combinando en forma apropiada los momenta angulares orbitales y los espines de los nucleones que componen el núcleo. El espín nuclear se identifica con un número cuántico I tal que el módulo de dicho espín es $\hbar \sqrt{I(I+1)}$. La componente del espín nuclear según una dirección determinada está dada por $m_I \hbar$, donde $m_I = \pm I, \pm (I-1), \dots, \pm \frac{1}{2}$ ó 0 , según que I sea semientero o entero. Hay entonces $2I+1$ orientaciones posibles del espín nuclear. Como se explicó

en la sección 3-4, estas mismas reglas son válidas en la mecánica cuántica para todos los momentos angulares. Experimentalmente se ha encontrado que los valores de I son enteros (si A es par) o semienteros (si A es impar) yendo desde cero, como en el ${}^4\text{He}$ y el ${}^{12}\text{C}$, hasta 7 como en el ${}^{176}\text{Lu}$. La tabla 7-1 da algunos espines nucleares. Se ha encontrado que prácticamente todos los núcleos par-par (es decir, los núcleos que tienen un número par de protones y de neutrones) tienen $I = 0$, lo cual indica que los nucleones idénticos tienden a acoplar sus momentos angulares en direcciones opuestas. Esto se denomina *efecto de apareamiento*. Los núcleos par-impar (es decir, núcleos que tienen un número impar de protones o de neutrones) tienen todos momentos angulares semienteros, siendo razonable suponer que el espín nuclear coincide con el momento angular del nucleón no apareado; este resultado es válido en muchos casos. Los núcleos impar-impar tienen dos nucleones no apareados (un neutrón y un protón) y es un poco más difícil predecir los resultados experimentales, aunque sus momentos angulares son enteros, como era de esperar, ya que hay un número total par de nucleones. Para que cualquier teoría de las fuerzas nucleares sea satisfactoria, debe dar cuenta de los valores experimentales de I .

(3) **Momento dipolar magnético.** Recordemos (ver la sección 3.6) que una carga en movimiento posee un momento dipolar magnético orbital \mathbf{M}_L que es proporcional a su momento angular orbital \mathbf{L} , y que está dado por

$$\mathbf{M}_L = (q/2m)\mathbf{L}.$$

En el caso de protones, la carga es $q = e$ y por lo tanto

$$\mathbf{M}_L = (e/2m_p)\mathbf{L}. \quad (7.3)$$

Evidentemente, los neutrones no tienen carga y no poseen momento dipolar magnético orbital. La componente del momento magnético según el eje Z es

$$M_{L,z} = (e/2m_p)L_z = (eh/2m_p)m_l = \mu_N m_l,$$

donde la constante

$$\mu_N = eh/2m_p = 5,0504 \times 10^{-27} \text{ J T}^{-1} \quad (7.4)$$

se denomina *magnetón nuclear*.

Si la partícula tiene un espín \mathbf{S} , puede tener además un momento dipolar magnético de espín dado por

$$\mathbf{M}_S = g_S(e/2m_p)\mathbf{S} \quad \text{ó} \quad M_{S,z} = g_S\mu_N m_S, \quad (7.5)$$

donde g_S es una constante característica de la partícula, llamada *razón giromagnética de espín*.^{*} Su valor para el protón es $g_{S,p} = +5,5855$, lo cual indica que \mathbf{M}_S es paralelo a \mathbf{S} (como corresponde para una carga positiva). Se ha observado

* Recordar que para el electrón $g_S = -2,0$ (ver la sección 3.7).

que el neutrón, aunque no tiene carga eléctrica, tiene un momento magnético de espín correspondiente a $g_{S,n} = -3,8263$. El signo negativo indica que \mathbf{M}_S es antiparalelo a \mathbf{S} , como corresponde para una carga negativa. Estos resultados sugieren que el protón y el neutrón tienen una estructura compleja que aún no hemos podido determinar exactamente.

Podemos obtener el momento dipolar magnético resultante de un núcleo combinando en forma apropiada los momentos dipolares magnéticos de todos los nucleones. Evidentemente, el momento dipolar magnético resultante debe estar relacionado con el espín nuclear I . La relación, extensión de la ec. (7.5), es

$$\mathbf{M} = g_I(e/2m_p)\mathbf{I},$$

donde g_I es la razón giromagnética nuclear. La componente del momento dipolar magnético de un núcleo según una dirección dada se puede expresar por $M_z = g_I(e/2m_p)I_z$, o sea, ya que $I_z = m_I\hbar$,

$$M_z = \mu_N g_I m_I. \quad (7.6)$$

Los momentos magnéticos nucleares se dan como múltiplos de μ_N y para $m_I = I$, esto es, $\mu = M_z/\mu_N = g_I I$. De acuerdo con esto los momentos magnéticos del protón y del neutrón (que tiene $I = \frac{1}{2}$) son $\mu_p = +2,7927 \text{ mn}$ y $\mu_n = -1,9131 \text{ mn}$. La tabla 7-1 da algunos valores de μ . Para que una teoría de las fuerzas nucleares sea satisfactoria, debe dar cuenta de los valores observados de μ o g_I .

(4) **Momento cuadrupolar eléctrico.** El momento cuadrupolar eléctrico de una distribución de carga respecto a una dirección dada que se elige como eje Z está definido por $Q' = \sum_i q_i(3z_i^2 - r_i^2)$. En el caso nuclear sólo los protones contribuyen al cuadrupolo eléctrico y, como $q_i = e$, tenemos $Q' = e\sum_p(3z_p^2 - r_p^2)$. Normalmente el cuadrupolo nuclear se define por $Q = Q'/e$. Es evidente que el valor de Q depende de la dirección del eje Z . Por convención, el eje Z se elige tan paralelo como sea posible al espín nuclear I , de modo que $m_I = I$. Luego, se define el momento cuadrupolar eléctrico nuclear por

$$Q = \sum_p(3z_p^2 - r_p^2)_{m_I=I}. \quad (7.7)$$

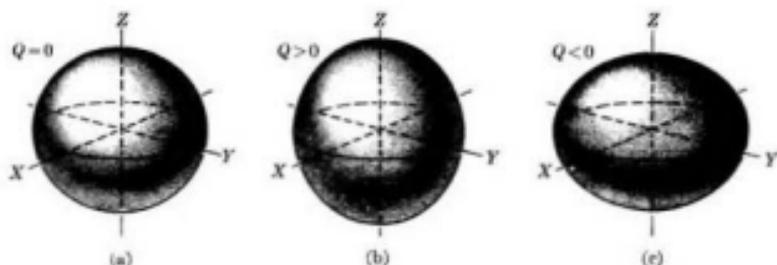


Fig. 7-3. Distribución de carga simétrica respecto al eje Z : (a) esfera, (b) elipsoide alargado, (c) elipsoide achatado.

TABLA 7-1 Propiedades de algunos nucleidos

Nucleido	Masa atómica, uma	Espin	Momento dipolar magnético, mn	Momento cuadrupolar eléctrico, 10^{-28} m ²
^2_1H	1,008665	$\frac{1}{2}$	-1,9131	0
^3_1H	1,007825	$\frac{1}{2}$	2,7927	0
^4_2He	2,014102	1	0,8574	0,00282
^3_2He	3,016989	$\frac{1}{2}$	-2,1275	0
^4_2He	3,016050	$\frac{1}{2}$	2,9789	0
^6_3Li	4,002603	0	0	0
^7_3Li	7,016004	$\frac{3}{2}$	3,2563	-0,045
$^{12}_6\text{C}$	12,00000	0	0	0
$^{13}_6\text{C}$	13,00335	$\frac{1}{2}$	0,7024	0
$^{14}_7\text{N}$	14,00307	1	0,4036	0,007
$^{15}_7\text{N}$	15,00011	$\frac{1}{2}$	-0,2831	0
$^{16}_8\text{O}$	15,99492	0	0	0
$^{17}_8\text{O}$	16,99913	$\frac{5}{2}$	-1,8937	-0,026
$^{23}_{11}\text{Na}$	20,99395	$\frac{3}{2}$	-0,6618	0,093
$^{27}_{13}\text{Al}$	26,98153	$\frac{5}{2}$	3,6414	0,15
$^{35}_{17}\text{Cl}$	34,96885	$\frac{3}{2}$	0,8218	-0,080
$^{40}_{20}\text{Ca}$	39,96260	0	0	0
$^{44}_{20}\text{Ca}$	42,95878	$\frac{2}{2}$	-1,3172	0
$^{56}_{26}\text{Fe}$	55,9349	0	1,06	0
$^{57}_{26}\text{Fe}$	56,9354	$\frac{1}{2}$	0,0905	0
$^{59}_{27}\text{Co}$	59,9338	5	3,8100	0
$^{63}_{29}\text{Cu}$	62,9296	$\frac{3}{2}$	2,2260	-0,180
$^{79}_{35}\text{Br}$	78,9183	$\frac{3}{2}$	2,1060	0,310
$^{88}_{38}\text{Sr}$	87,0564	0	0	0
$^{93}_{41}\text{Nb}$	92,9064	$\frac{9}{2}$	6,1670	-0,220
$^{103}_{45}\text{Rh}$	102,9048	$\frac{1}{2}$	0	0
$^{114}_{48}\text{Cd}$	113,9034	0	0	0
$^{127}_{53}\text{I}$	126,9045	$\frac{5}{2}$	2,8080	-0,790
$^{152}_{64}\text{Gd}$	154,9277	$\frac{3}{2}$	-0,2700	1,300
$^{175}_{71}\text{Lu}$	174,9409	$\frac{7}{2}$	2,2300	5,600
$^{177}_{71}\text{Lu}$	175,9427	7	3,1800	8,000
$^{177}_{71}\text{Lu}$	176,9439	$\frac{7}{2}$	2,2400	5,400
$^{180}_{72}\text{Hf}$	179,9468	0	0	0
$^{186}_{74}\text{Re}$	184,9501	$\frac{5}{2}$	3,1716	2,6
$^{208}_{82}\text{Pb}$	205,9892	0	0	0
$^{209}_{83}\text{Bi}$	208,9804	$\frac{9}{2}$	4,0802	-0,340
$^{227}_{88}\text{Ac}$	227,0278	$\frac{3}{2}$	1,1	1,7
$^{232}_{92}\text{U}$	233,0395	$\frac{5}{2}$	0,54	3,5
$^{235}_{92}\text{U}$	235,0439	$\frac{7}{2}$	0,35	4,1
$^{238}_{92}\text{U}$	238,0508	0	0	0
$^{242}_{94}\text{Pu}$	240,4236	$\frac{5}{2}$	-0,730	5,600

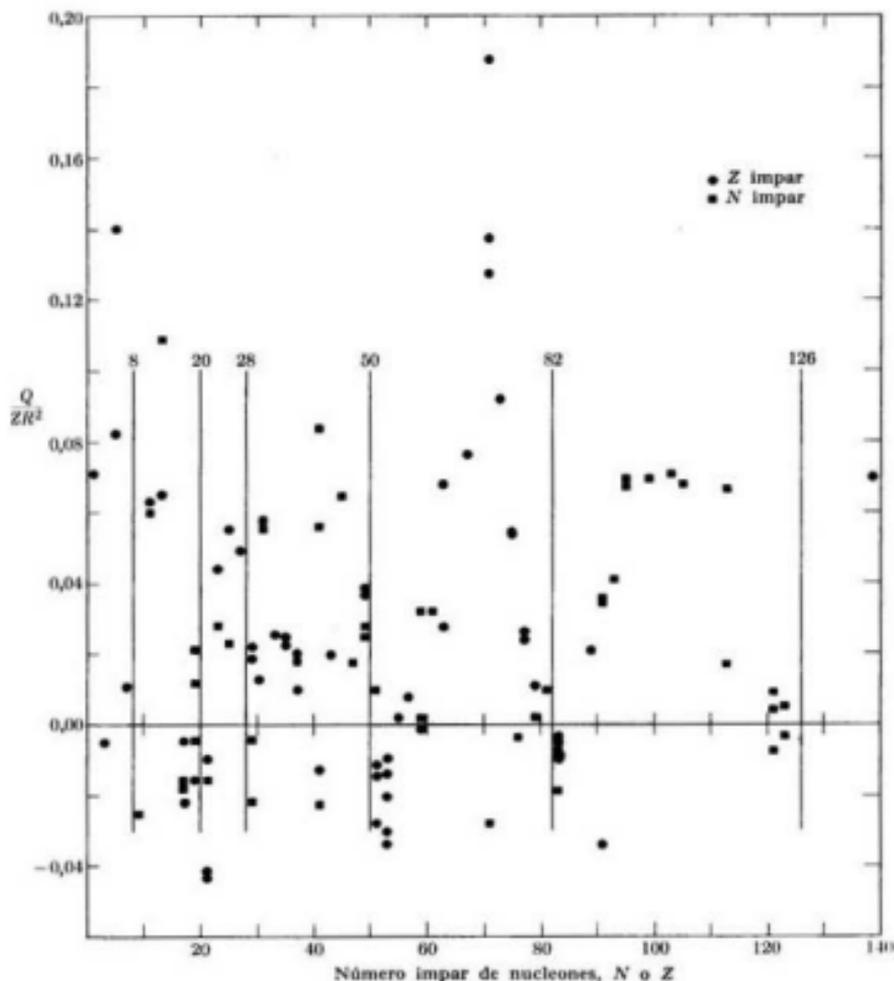


Fig. 7-4. Momentos cuadrupolares eléctricos de núcleos con A impar. La ordenada es la cantidad adimensional Q/ZR^2 , que constituye un indicador mejor de la desviación de la forma esférica.

En el sistema MKSC, Q se expresa en m^2 . Algunas veces se usa una unidad llamada *barn* que es igual a 10^{-28} m^2 . Si los protones están distribuidos con simetría esférica, $Q = 0$, por lo que Q es una buena indicación del grado en que un núcleo se aparta de la forma esférica. Si Q es positivo el núcleo se debe parecer a un elipsoide alargado y si Q es negativo, se debe parecer a un elipsoide achatado

(fig. 7-3). Se puede demostrar teóricamente que los núcleos que tienen $I = 0$ ó $\frac{1}{2}$ tienen $Q = 0$, lo cual ha sido confirmado experimentalmente. La tabla 7-1 da los valores de Q para algunos nucleidos. La fig. 7-4 muestra los momentos cuadrupolares eléctricos observados de algunos núcleos. Nótese que algunos núcleos poseen momentos cuadrupolares eléctricos anormalmente grandes, lo cual es una indicación de grandes deformaciones. Debemos decir nuevamente que para que una teoría de las interacciones nucleares sea satisfactoria debe dar cuenta de los valores de Q observados.

(5) **Paridad.** Los estados nucleares tienen paridad definida, par o impar, que depende de la estructura de las funciones de onda que los describen. Cada función de onda nuclear depende de las funciones de onda correspondientes a cada uno de los nucleones. La paridad de los estados nucleares está entonces estrechamente relacionada con los movimientos nucleónicos. Empero, este tema es muy complicado por lo que no lo desarrollaremos aquí.

EJEMPLO 7.1. Cálculo de la energía potencial repulsiva debida a la interacción coulombiana entre los protones de un núcleo.

Solución: La energía eléctrica de una esfera cargada uniformemente, de carga total Q y radio R , es

$$E_{p(\text{coul})} = \frac{3}{5} \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

Suponiendo que los Z protones de un núcleo están distribuidos uniformemente, podemos adaptar este resultado reemplazando Q por Ze y reemplazando R por el valor dado en la ec. (7.2). En consecuencia, la energía coulombiana de un núcleo es

$$E_{p(\text{coul})} = \frac{3}{5} \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R} = \frac{3}{5} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \right) \frac{Z^2}{A^{1/3}}$$

Introduciendo valores numéricos obtenemos

$$E_{p(\text{coul})} = 9,87 \times 10^{-14} Z^2 A^{-1/3} \text{ J} = 0,617 Z^2 A^{-1/3} \text{ MeV.} \quad (7.8)$$

Como la carga eléctrica no está distribuida uniformemente en el volumen nuclear, sino que está concentrada en los protones, debemos escribir $Z(Z-1)$ en vez de Z^2 porque cada uno de los Z protones interactúa solamente con los restantes $Z-1$. Esta corrección es particularmente importante en los núcleos con Z pequeño como el helio. Por ejemplo, para ${}^4\text{He}$, con $Z = 2$ y $A = 4$, tenemos $E_{p(\text{coul})} = 0,776 \text{ MeV}$ (usando la fórmula corregida) y para ${}^{238}\text{U}$, con $Z = 92$ y $A = 238$, tenemos $E_{p(\text{coul})} = 879 \text{ MeV}$. Vemos que a causa del término en Z^2 , la energía de repulsión coulombiana aumenta muy rápidamente con el número de protones. El núcleo no puede ser estable a menos que la interacción nuclear sea lo suficientemente fuerte y atractiva. Debemos comparar estas energías eléctricas con las que se encuentran en los átomos y moléculas, las cuales son del orden de unos pocos electronvolts. La razón de esta enorme diferencia es que los protones de un núcleo están mucho más cerca uno de otro que los electrones en un átomo; su separación es alrededor de un cienmilésimo de la separación de los electrones en átomos o moléculas, resultando una energía del orden de 100 000 veces mayor.

7.5 Energía de ligadura nuclear

Podemos darnos una idea de la intensidad de las interacciones nucleares estudiando la energía de ligadura de los núcleos, esto es, la energía necesaria para separar los nucleones que componen el núcleo. La masa de un núcleo es sensiblemente menor que la suma de las masas de sus nucleones componentes. En el caso del deuterón, por ejemplo, $m_d = 2,014102$ uma; las masas del neutrón y del protón son

$$m_p = 1,007825 \text{ uma} \quad \text{y} \quad m_n = 1,008665 \text{ uma.}$$

Su suma es $m_p + m_n = 2,016490$ uma, que es mayor que m_d en la cantidad 0,002388 uma. La explicación de esta pérdida de masa está en la energía de ligadura del sistema.

Consideremos un neutrón y un protón en reposo y suficientemente lejos uno de otro como para que no haya interacción entre ellos. Su energía total es entonces la suma de sus energías en reposo, esto es

$$E = m_p c^2 + m_n c^2 = (m_p + m_n) c^2.$$

Supongamos ahora que las dos partículas están lo suficientemente cerca como para formar un deuterón como resultado de su interacción nuclear. Llamemos E_p a su energía potencial nuclear. Como se están moviendo alrededor de su centro de masa tienen también una energía cinética E_k . En consecuencia, la energía total es ahora

$$E' = (m_p + m_n) c^2 + E_k + E_p.$$

Pero si las fuerzas nucleares son atractivas y el cero de la energía potencial se elige en el infinito, E_p es negativa. Además, como el deuterón es un sistema estable, E_p debe ser mayor que E_k en valor absoluto de modo que $E_k + E_p$ sea negativa (recordar que en el caso del átomo de hidrógeno, como en el de todo sistema ligado, la energía total excluyendo la energía de masa es negativa). Por lo tanto E' es menor que E , es decir, se libera energía cuando se forma el sistema de dos nucleones ligados. La energía liberada es

$$E_b = E - E', \tag{7.9}$$

que se denomina *energía de ligadura* del sistema. Esta es la cantidad de energía que se debe devolver al deuterón para separar el neutrón y el protón. Podemos comprender más fácilmente estas relaciones si nos referimos a la fig. 7-5. En el caso del deuterón la energía de ligadura nuclear es la equivalente a la energía de ionización en el caso del átomo de hidrógeno.

Se puede definir una masa "efectiva" del sistema n-p mediante la relación $E' = m_d c^2$, resultando un valor de m_d que es menor que $m_p + m_n$. La energía de ligadura del deuterón es entonces

$$\begin{aligned} E_b &= (m_p + m_n) c^2 - m_d c^2 = (m_p + m_n - m_d) c^2 \\ &= 931,48(m_p + m_n - m_d) \text{ MeV.} \end{aligned}$$

En la última expresión se debe expresar las masas de uma. Como

$$m_p + m_n - m_d = 0,002388 \text{ uma},$$

la energía de ligadura del deuterón es $E_b = 2,224 \text{ MeV}$. Esta es entonces la energía necesaria para separar el protón y el neutrón en un deuterón o la energía liberada cuando un protón y un neutrón en reposo se combinan para formar el deuterón. Comparando esta energía con el resultado equivalente para el hidrógeno cuya energía de ionización (o de ligadura) es solamente $13,6 \text{ eV}$, concluimos que la interacción nuclear es aproximadamente 10^8 veces más fuerte que las

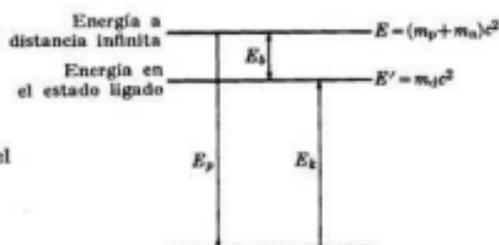


Fig. 7-5. Energía de ligadura del deuterón.

interacciones electromagnéticas. En las reacciones químicas no se observa un cambio medible de masa porque las energías involucradas en la mayoría de los procesos electromagnéticos es relativamente pequeña, del orden de unos pocos eV, equivalente a un cambio de masa de unos pocos milmillonésimos de unidades de masa por átomo.

Para un núcleo de masa M compuesto de A nucleones, de los cuales Z son protones y $A - Z$ son neutrones, la energía de ligadura (es decir, la energía necesaria para separar todos los nucleones) es

$$\begin{aligned} E_b &= [Zm_p + (A - Z)m_n - M]c^2 \\ &= 931,48[Zm_p + (A - Z)m_n - M] \text{ MeV}. \end{aligned} \quad (7.10)$$

En la segunda expresión todas las masas deben estar expresadas en uma.

La energía media de ligadura por nucleón, E_b/A , es una buena indicación de la estabilidad de un núcleo. En la fig. 7-6 se muestra su valor para varios núcleos. Podemos ver que es máxima para los núcleos que están en la región de número másico $A = 60$. Por lo tanto, si se unen dos núcleos livianos para formar dos núcleos semipesados (proceso denominado *fusión*) se libera energía y si un núcleo pesado se divide en dos fragmentos semipesados (proceso denominado *fisión*) también se libera energía.

El hecho de que la energía de ligadura por nucleón sea prácticamente constante (por encima de $A = 10$, la variación es de sólo 10 %) sugiere que cada nucleón interactúa sólo con sus vecinos inmediatos independientemente del número total de nucleones; esta propiedad se denomina *saturación*. También se encuentra este efecto de saturación en las moléculas donde la energía de ligadura de dos átomos

es prácticamente independiente de los otros átomos de las moléculas. La misma situación se presenta en los líquidos y sólidos.

El físico alemán C. V. Weizsäcker propuso alrededor de 1935 una expresión empírica para la energía de ligadura de un núcleo. Como hemos indicado, la energía de ligadura por nucleón es aproximadamente constante por lo que la energía total de ligadura de un núcleo debe ser proporcional al número total de nucleones o sea el número másico A ; esto es: $E_b = a_1 A$, donde a_1 es una constante de proporcionalidad. Empero, los nucleones que están cerca de la superficie nuclear

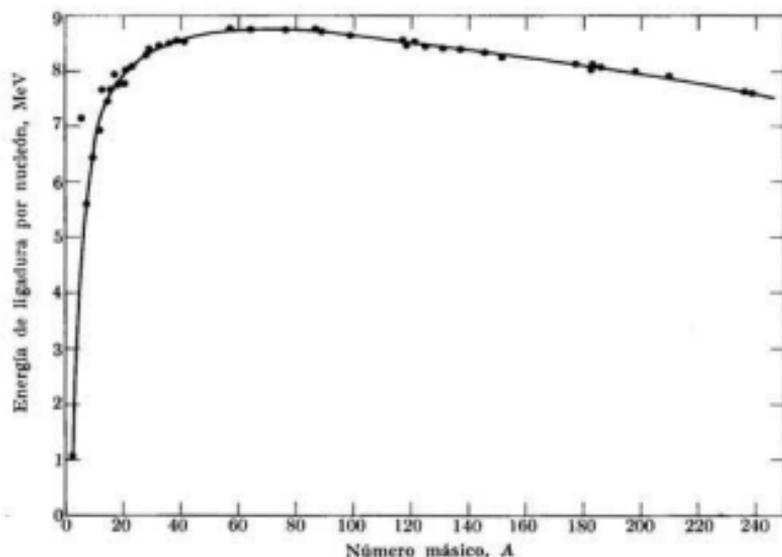


Fig. 7-6. Energía de ligadura por nucleón en función del número másico.

están ligados menos fuertemente que los del interior porque tienen menos vecinos para interactuar. Tenemos entonces que corregir nuestra primera estimación de E_b agregando un término negativo. Como es un efecto de superficie, el nuevo término debe ser proporcional al cuadrado del radio nuclear o, en vista de la ec. (7.2), proporcional a $A^{2/3}$. Podemos escribir entonces

$$E_b = a_1 A - a_2 A^{2/3}.$$

Luego debemos considerar la energía coulombiana de repulsión entre los protones, que también tiende a disminuir la energía de ligadura. Concluimos del ejemplo 7.1 que la corrección coulombiana debe ser proporcional a $Z^2 A^{-1/3}$. Podemos escribir entonces

$$E_b = a_1 A - a_2 A^{2/3} - a_3 Z^2 A^{-1/3}.$$

Otro término que tiende a disminuir la energía de ligadura es la energía cinética de los nucleones. Como veremos en el ejemplo 13.3, la energía cinética de los nucleones es proporcional a $A + \frac{1}{2}(N - Z)^2 A^{-1}$. La primera parte, que es proporcional a A se puede incluir en el término $a_1 A$, por lo que la corrección por la energía cinética es un término de la forma $-a_4(N - Z)^2 A^{-1}$. Se tiene entonces

$$E_b = a_1 A - a_2 A^{2/3} - a_3 Z^2 A^{-1/3} - a_4 (N - Z)^2 A^{-1}. \quad (7.11)$$

Podemos obtener las cuatro constantes ajustando la ecuación a los valores experimentales de E_b que obtenemos usando la ec. (7.10). Si elegimos las constantes para ajustar las energías de ligadura de los núcleos con A impar (esto es, Z impar y N par o a la inversa) encontramos que la energía de ligadura de los núcleos con A par cae sistemáticamente a uno u otro lado de los valores dados por la ec. (7.11), teniendo los núcleos par-par mayor energía de ligadura y los impar-impar menor. Luego, para obtener el mejor ajuste de la ec. (7.11) para todos los núcleos con $A > 10$, agregamos un término de corrección δ tal que

$$\delta = \begin{cases} + a_5 A^{-3/4} & \begin{matrix} Z & N & A \\ \text{par} & \text{par} & \text{par} \end{matrix} \\ 0 & \begin{matrix} \text{par} & \text{impar} \\ \text{impar} & \text{par} \end{matrix} \\ - a_5 A^{-3/4} & \begin{matrix} \text{impar} & \text{impar} & \text{par} \end{matrix} \end{cases}$$

El origen de este término está relacionado con la *energía de apareamiento* de los núcleos. Esto es, como resultado del efecto de apareamiento mencionado en la sección 7.4, la interacción nuclear depende de la orientación relativa de los momentos angulares de los nucleones, por lo que la energía de ligadura depende de cuántos pares de nucleones tienen sus momentos angulares en direcciones opuestas, o sea que están apareados. Este número es menor en los núcleos impar-impar y mayor en los par-par, por lo que éstos tienen una energía de ligadura mayor.

Los mejores valores de las constantes expresados en MeV son,

$$\begin{aligned} a_1 &= 15,760, & a_2 &= 17,810, & a_3 &= 0,711, \\ a_4 &= 23,702, & a_5 &= 34. \end{aligned}$$

Sugerimos que el estudiante compruebe la validez de la ec. (7.11) aplicándola a varios núcleos.

Obsérvese que utilizando la ec. (7.10) podemos expresar la masa de un núcleo en la forma

$$\begin{aligned} M &= Zm_p + (A - Z)m_n - E_b/c^2 \\ &= Zm_p + (A - Z)m_n - a_1' A + a_2' A^{2/3} + a_3' Z^2 A^{-1/3} \\ &\quad + a_4' (N - Z)^2 A^{-1} - \delta'. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Los valores en una de las constantes que aparecen en la ec. (7.12) son

$$\begin{aligned} a'_1 &= 1,69 \times 10^{-2}, & a'_2 &= 1,91 \times 10^{-2}, & a'_3 &= 7,63 \times 10^{-4}, \\ a'_4 &= 2,54 \times 10^{-2}, & a'_5 &= 3,6 \times 10^{-2}. \end{aligned}$$

EJEMPLO 7.2. Diferencia de masa de los núcleos "reflejados", es decir, núcleos que tienen el mismo A impar pero con N y Z intercambiados. Un par de núcleos reflejados es ${}^A_1\text{H}$ y ${}^A_1\text{H}$; otro par es ${}^{23}_{11}\text{Na}$ y ${}^{23}_{12}\text{Mg}$.

Solución: Consideremos núcleos reflejados con A impar y cuyos N y Z difieren en una unidad: uno tiene (N, Z) y el otro $(N-1, Z+1)$. Dejando de lado en la ec. (7.12) el término correspondiente a la energía de apareamiento, ya que ambos núcleos tienen A impar, y teniendo en cuenta que $N-Z = \pm 1$ por lo que el término de energía cinética se cancela, tenemos

$$\begin{aligned} M_{Z+1} - M_Z &= m_p - m_n + a'_1[(Z+1)^2 - Z^2]A^{-1/2} \\ &= m_p - m_n + a'_1(2Z+1)A^{-1/2}. \end{aligned}$$

Como los núcleos reflejados son núcleos livianos, de Z bajo, se debe usar el término coulombiano en la forma $Z(Z-1)$ en vez de Z^2 , como se señaló en el ejemplo 7.1. Por consiguiente

$$\begin{aligned} M_{Z+1} - M_Z &= m_p - m_n + 2a'_2ZA^{-1/2} \\ &= (-1,390 + 1,526ZA^{-1/2}) \times 10^{-3} \text{ uma}. \end{aligned}$$

Podemos usar esta ecuación para obtener a'_2 utilizando el valor observado de las masas de los núcleos reflejados; a partir del valor de a'_2 así determinado podemos obtener la constante r_2 del radio nuclear. Sugerimos que el estudiante aplique esta fórmula a los dos casos mencionados en el enunciado.

EJEMPLO 7.3. Cálculo del número atómico del núcleo más estable para un número másico A dado.

Solución: Dado el número másico A , el núcleo más estable es aquel que tiene el máximo valor de la energía de ligadura. Tenemos entonces que calcular $\partial E_b/\partial Z$ con A constante e igualarla a cero. Usando la expresión de E_b dada en la ec. (7.11) y ya que $N-Z = A-2Z$, tenemos que

$$\partial E_b/\partial Z = -2a_2ZA^{-1/2} + 4a_3(A-2Z)A^{-1} = 0,$$

e introduciendo los valores numéricos de a_2 y de a_3 , obtenemos

$$Z = \frac{A}{2 + 0,0157 A^{1/2}}. \quad (7.13)$$

En los núcleos livianos, para los que A es pequeño, podemos despreciar el segundo término del denominador y tenemos aproximadamente $Z \approx \frac{1}{2}A$, lo cual está confirmado experimentalmente. Se sugiere que el estudiante represente Z en función de A hasta 240 (en pasos de 20) y compare con la fig. 7-1.

7.6 Fuerzas nucleares

Resumamos las propiedades de las fuerzas nucleares, algunas de las cuales ya hemos mencionado.

(1) **La fuerza nuclear es de corto alcance.** El que la fuerza nuclear tenga corto alcance significa que es apreciable sólo cuando las partículas interactuantes están muy cerca una de otra, a una distancia del orden de 10^{-13} m o menos. La fuerza nuclear es despreciable a distancias mayores. Podemos inferir que la fuerza nuclear es de corto alcance teniendo en cuenta que a distancias mayores de 10^{-14} m, que corresponden a las dimensiones nucleares, la interacción que regula la dispersión de nucleones y el agrupamiento de los átomos en moléculas es electromagnética. Si la fuerza nuclear entre los núcleos atómicos fuera de largo alcance, sería fundamental en el estudio de la formación de moléculas, dominando las fuerzas electromagnéticas, más débiles, del mismo modo que la interacción electromagnética domina la gravitacional, aún más débil, en la formación de átomos y moléculas.

Se puede determinar directamente el alcance de las fuerzas nucleares por medio de experimentos de dispersión. Supongamos, por ejemplo, que enviamos un protón contra un núcleo. Al aproximarse al núcleo, el protón está sujeto a la repulsión eléctrica y a la fuerza nuclear. Si ésta es de un alcance comparable al de la fuerza eléctrica, ambas fuerzas afectarán el movimiento del protón cualquiera sea la distancia a que pase del núcleo; por lo tanto, la distribución angular de los protones dispersados diferirá sensiblemente de las correspondientes a la dispersión eléctrica (o coulombiana). Por el contrario, si el alcance de la fuerza nuclear es pequeño, los protones que pasen a una distancia del núcleo mayor que el alcance de la fuerza nuclear sufrirán esencialmente la acción de una fuerza puramente eléctrica. Sólo los protones con energía cinética suficiente para compensar la repulsión coulombiana y pasar cerca del núcleo son afectados por la fuerza nuclear y su dispersión es diferente de la coulombiana pura. Esto último es lo que se observa experimentalmente, lo cual confirma que las fuerzas nucleares tienen corto alcance.

(2) **La fuerza nuclear parece ser independiente de la carga eléctrica.** Esto significa que las interacciones nucleares entre dos protones, dos neutrones o un protón y un neutrón son básicamente iguales. Por ejemplo, los científicos han concluido del análisis de la dispersión protón-protón y neutrón-protón que la parte nuclear es esencialmente la misma en ambos casos. También los siguientes hechos indican que la interacción nuclear es independiente de la carga: (a) los núcleos livianos están compuestos de igual número de protones y neutrones, (b) la energía de ligadura por nucleón es aproximadamente constante y (c) la diferencia de energía coulombiana en los núcleos reflejados (ejemplo 7.2) puede, ella sola, dar cuenta de la diferencia de masa de los mismos. Es por esta propiedad que los neutrones y los protones son considerados equivalentes en lo que a la fuerza nuclear respecta. Por ello, como ya se dijo, se les designa con el nombre común de nucleones.

(3) **La fuerza nuclear depende de la orientación relativa de los espines de los nucleones interactuantes.** Este hecho ha sido confirmado por medio de experimentos de dispersión y por medio del análisis de niveles de energía nucleares. Se ha encontrado que la energía de un sistema de dos nucleones en

el que ambos tienen sus espines paralelos es diferente a la energía del mismo sistema cuando uno de los nucleones tiene el espín hacia arriba y el otro hacia abajo. De hecho, el sistema neutrón-protón tiene un estado ligado, el *deuterón*, en el que los dos nucleones tienen sus espines paralelos ($S = 1$), pero no existe un estado ligado si los espines son antiparalelos ($S = 0$).

(4) La fuerza nuclear no es completamente central; depende de la orientación del espín respecto a la línea que une los dos nucleones. Los científicos han llegado a esta conclusión viendo que aun en el núcleo más simple (el deuterón) el momentum angular orbital de los dos nucleones respecto a su centro de masa no es constante, contrariamente a lo que ocurre cuando las fuerzas son centrales. En consecuencia, para explicar las propiedades del estado fundamental del deuterón, tales como los momentos dipolar magnético y cuadrupolar eléctrico, debemos usar una combinación lineal de funciones de onda s ($l = 0$) y d ($l = 2$). Parece que parte de la fuerza nuclear se debe a una interacción espín-órbita relativamente fuerte. Otra parte, llamada *fuerza tensorial*, se parece mucho a la interacción entre dos dipolos.

(5) La fuerza nuclear tiene un «carozo» repulsivo. Esto significa que a distancias muy cortas, mucho menores que su alcance, la fuerza nuclear se hace repulsiva. Esta suposición se ha introducido para explicar la separación media constante de los nucleones, lo cual da lugar a un volumen nuclear proporcional al número total de nucleones, y para dar cuenta de ciertas características de la dispersión nucleón-nucleón.

A pesar de toda esta información acerca de las fuerzas nucleares, aún no se conoce bien la expresión correcta de la energía potencial para la interacción nuclear. Se han propuesto varias expresiones. Una es el *potencial de Yukawa*, propuesto en 1935 por el físico japonés Hideki Yukawa y dado por

$$E_p(r) = -E_0 r_0 \frac{e^{-r/r_0}}{r},$$

donde E_0 y r_0 son dos constantes empíricas. La constante r_0 es el alcance de la fuerza nuclear y E_0 da la intensidad de la interacción. El factor exponencial decreciente e^{-r/r_0} hace que la energía potencial de Yukawa vaya a cero más rápidamente que la energía potencial eléctrica, que varía como $1/r$. Sin embargo, aún se duda de que la interacción nuclear pueda ser descrita con una función de energía potencial del mismo modo que hemos podido explicar las interacciones gravitacional y electromagnética.

De todos modos, en la mayoría de los problemas se puede representar esquemáticamente la interacción nuclear a bajas energías mediante una energía potencial como la mostrada en la fig. 7-7(a). Más allá de cierta distancia, la energía potencial es prácticamente constante o (lo que es equivalente) la fuerza es cero. A distancias muy cortas se podría añadir un carozo repulsivo [fig. 7-7(b)]. Este es el tipo de potencial a incluir en la ecuación de Schrödinger para estudiar las interacciones n-n y n-p. Para las interacciones p-p debemos incluir también la re-

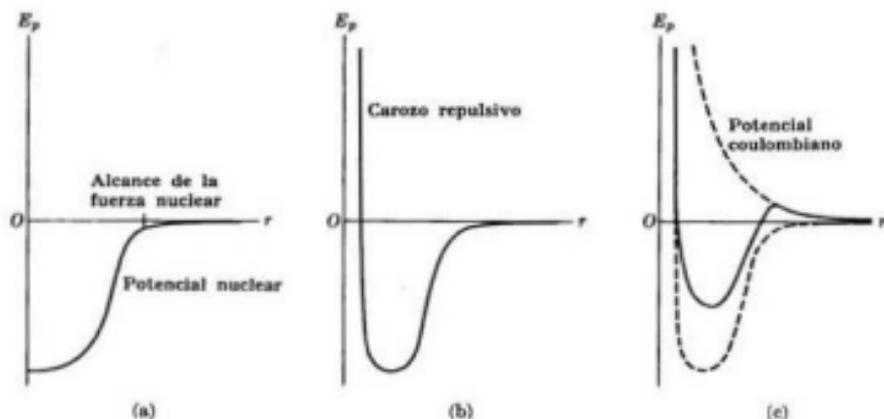


Fig. 7-7. Formas empíricas de la energía potencial nuclear.

pulsión coulombiana $e^2/4\pi\epsilon_0 r$, que sólo es importante fuera del alcance de las fuerzas nucleares [fig. 7-7(c)]. La solución de la ecuación de Schrödinger da entonces los estados estacionarios de los sistemas de dos nucleones. A veces podemos reemplazar el potencial nuclear por un pozo rectangular de potencial para obtener información semicuantitativa.

No podemos estudiar la estructura nuclear con la misma amplitud con que estudiamos los átomos y las moléculas porque no conocemos la forma exacta de la energía potencial a incorporar en la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, el conocimiento que tenemos acerca de las fuerzas nucleares es una base suficientemente sólida para asentar un estudio de la estructura nuclear.

7.7 Estado fundamental del deuterón

El deuterón, compuesto de un protón y un neutrón, es el más simple de todos los núcleos (si excluimos el caso trivial del núcleo de hidrógeno que es un solo protón). Básicamente, la interacción nuclear es la única responsable de la unión de un neutrón y un protón (podemos despreciar la pequeña interacción magnética entre sus momentos magnéticos). En consecuencia, podemos obtener una información valiosa acerca de la naturaleza de las fuerzas nucleares por medio de un análisis detallado de las propiedades del deuterón. Este tiene sólo un estado estacionario (que es evidentemente su estado fundamental) con una energía $E = -E_b = -2,224$ MeV. Además el espín del deuterón es $I = 1$. Podemos suponer entonces que el protón y el neutrón tienen sus espines paralelos (es decir, $S = 1$) y que el momentum angular orbital de su movimiento relativo alrededor del centro de masa es cero ($L = 0$), resultando un estado 3S_1 . En este estado no hay momento magnético orbital, por lo que el momento magnético

del deuterón debería ser igual a $\mu_p + \mu_n = 2,7927 - 1,9131 = 0,8796$ magnetones nucleares, valor muy cercano al experimental $\mu_d = 0,8574$ magnetones nucleares. Por lo tanto, nuestra suposición acerca del estado fundamental parece tener buen fundamento. Considerando que las fuerzas nucleares son centrales, podemos expresar la función de onda del deuterón en la misma forma que se expresó la de un electrón en la ec. (3.18). La parte angular es constante en un estado s (ver tabla 3-5) y sólo tenemos que considerar la parte radial $R(r) = u(r)/r$, donde $u(r)$ se obtiene de la ec. (3.24). Haciendo $l = 0$ en esa ecuación, lo cual corresponde

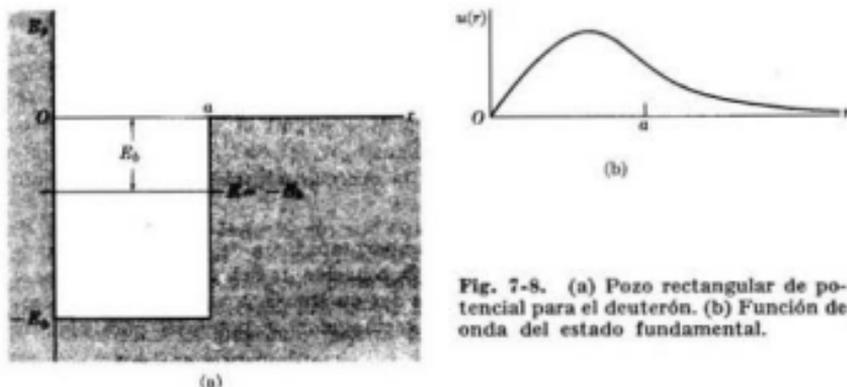


Fig. 7-8. (a) Pozo rectangular de potencial para el deuterón. (b) Función de onda del estado fundamental.

a un estado 3S_1 , y recordando que m es la masa reducida del sistema neutrón-protón (esto es, $m \approx \frac{1}{2}m_p$), tenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + E_p(r)u = Eu. \quad (7.14)$$

Para simplificar, representemos la energía potencial nuclear por medio del pozo rectangular presentado en la fig. 7-8(a), el cual tiene una profundidad E_0 y un radio a .* El problema es entonces idéntico al discutido en el ejemplo 2.6, ya que la ecuación de Schrödinger para $u(r)$ es

$$u(r) = \begin{cases} A \operatorname{sen} k_1 r, & r < a, \\ C e^{-\alpha r}, & r > a, \end{cases}$$

donde

$$k_1^2 = 2m(E_0 - E_b)/\hbar^2$$

y

$$\alpha^2 = 2mE_b/\hbar^2.$$

* La inclusión de un carozo repulsivo no alteraría sustancialmente los resultados que obtendremos en esta sección, por lo que omitiremos considerarlo.

Esta función de onda está representada en la fig. 7-8(b). La continuidad de la función de onda en $r = a$ requiere la validez de la ec. (2.23), o sea

$$k_i \cotg k_i a = -\alpha \quad (7.15)$$

es decir,

$$[2m(E_0 - E_b)/\hbar^2]^{1/2} \cotg [2m(E_0 - E_b)/\hbar^2]^{1/2} a = -[2mE_0/\hbar^2]^{1/2}.$$

En nuestro caso conocemos E_b y debemos usar esta ecuación para obtener información acerca de E_0 y de a . Como hay un solo estado estacionario, recordemos del ejemplo 2.6 que $\pi^2 \hbar^2 / 8m < E_0 a^2 < 9\pi^2 \hbar^2 / 8m$. El estado fundamental del deuterón sólo determina el valor de $E_0 a^2$, que es aproximadamente $1,48 \times 10^{-28}$ MeV m^2 . Para obtener E_0 y a separadamente debemos tener otra relación. Podemos estimar el alcance a a partir de los experimentos de dispersión (ver sección 7.8). Así, si a es del orden de 2×10^{-15} m tenemos que E_0 es alrededor de 37 MeV. Debemos advertir que si usamos otro potencial de corto alcance en vez de un pozo rectangular, obtenemos valores de E_0 y de a diferentes.

Señalamos al principio que hay una pequeña discrepancia entre los valores de μ_d y $\mu_p + \mu_n$ que es necesario explicar. Además, el deuterón tiene un momento cuadrupolar eléctrico $Q_d = 2,82 \times 10^{-28}$ m² C. Un estado 3S_1 es, empero, esféricamente simétrico y no tiene momento cuadrupolar eléctrico. Debemos sospechar entonces que nuestra suposición de que el estado fundamental del deuterón es un estado 3S_1 no es completamente correcta.

Ahora bien, un estado 3S_1 no es el único estado compatible con $I = 1$. Podemos tener también estados 1P_1 ($L = 1, S = 0$), 3P_1 ($L = 1, S = 1$) y 3D_1 ($L = 2, S = 1$). Si se computan los valores de μ_d y de Q_d para esos estados, los resultados son muy diferentes de los valores experimentales. Para resolver este dilema podemos suponer que la función de onda del estado fundamental del deuterón es una combinación lineal de las cuatro funciones de onda posibles que hemos mencionado. Pero los estados 3S_1 y 3D_1 tienen paridad par y los estados 1P_1 y 3P_1 tienen paridad impar. Luego, si el estado fundamental del deuterón tiene paridad bien definida (como es de esperar si la fuerza es simétrica en las dos partículas interactuantes), debemos combinar solamente los estados 3S_1 y 3D_1 . Un cálculo detallado que omitiremos muestra que para reproducir los valores experimentales de μ_d y Q_d debemos tener

$$\psi_{\text{deuterón}} = 0,98\psi({}^3S_1) + 0,20\psi({}^3D_1).$$

El hecho de que tengamos que mezclar estados con $L = 0$ y $L = 2$ demuestra que el momentum angular orbital del deuterón no tiene un valor definido y que, por lo tanto, la fuerza nuclear no es rigurosamente central. En el deuterón se atribuye la parte no central a la fuerza tensorial.

7.8 Dispersión neutrón-protón a bajas energías

Los experimentos de dispersión constituyen otra fuente valiosa de información acerca de la fuerza nuclear entre los nucleones. Para realizar experimentos de dispersión protón-protón se hace incidir un haz de protones proveniente de un

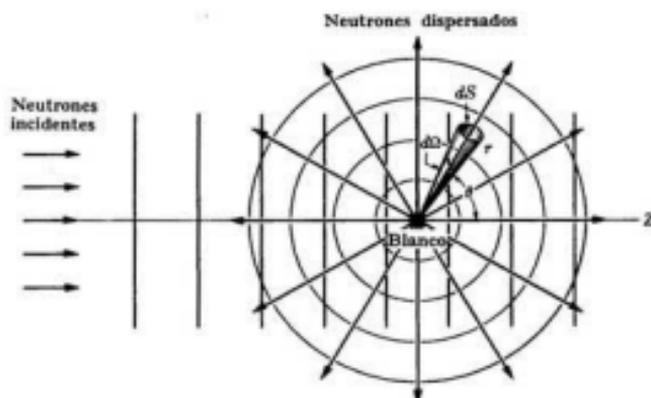


Fig. 7-9. Dispersión de partículas.

acelerador sobre un blanco que contiene átomos de hidrógeno, analizándose los protones dispersados. La desviación respecto a la dispersión coulombiana pura suministra información acerca de la fuerza nuclear. Análogamente, en la dispersión neutrón-protón se proyecta un haz de neutrones proveniente de un reactor u otra fuente de neutrones sobre un blanco de hidrógeno y se observan los neutrones dispersados. Los experimentos de dispersión neutrón-neutrón son más difíciles porque es imposible tener un blanco compuesto únicamente de neutrones; en consecuencia, es necesario emplear métodos indirectos.

Consideremos la dispersión n-p. Supongamos que un haz de neutrones de momentum $p = \hbar k$ se mueve en la dirección del eje Z, como en la fig. 7-9. Luego, se puede describir las partículas incidentes mediante la función de onda $\psi_{inc} = e^{ikz}$. La densidad de corriente correspondiente a estas partículas es $j_{inc} = v|\psi_{inc}|^2 = v$. Cuando los neutrones pasan cerca del blanco están sujetos a la acción de las fuerzas nucleares resultantes de su interacción con los protones y se desvían de la dirección inicial de movimiento. Los neutrones dispersados están representados a grandes distancias del blanco por una función de onda que se parece a una onda esférica, esto es, su función de onda tiene la forma e^{ikr}/r (ver problema 3.30). La intensidad de la dispersión no es necesariamente la misma en todas direcciones, dependiendo en general del ángulo θ que la dirección de dispersión forma con el eje Z. Podemos escribir entonces $\psi_{disp} = f(\theta)e^{ikr}/r$, donde $f(\theta)$ se denomina *amplitud de dispersión*. La función de onda total es

$$\psi = \psi_{inc} + \psi_{disp} = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (7.16)$$

El flujo de partículas dispersadas a través de la superficie dS por unidad de tiempo (fig. 7-9) es

$$v|\psi_{disp}|^2 = v|f(\theta)|^2 dS/r^2.$$

Pero dS/r^2 es igual al ángulo sólido $d\Omega$ subtendido por dS . Luego

Flujo de partículas dispersadas por unidad de tiempo
a través de $dS = v/f(\theta)^2 d\Omega$.

Se define la *sección eficaz diferencial* $\sigma(\theta)$ mediante

$$\sigma(\theta) = \frac{\text{flujo de partículas dispersadas por unidad de tiempo dentro de } d\Omega}{\text{densidad de corriente de partículas incidentes} \times d\Omega} = |f(\theta)|^2. \quad (7.17)$$

Si observamos $\sigma(\theta)$ experimentalmente, podemos obtener $f(\theta)$ aplicando la ec. (7.17). Luego podemos buscar las fuerzas nucleares que dan la función $f(\theta)$ observada. Esta es una forma de inferir cuál es la naturaleza de la interacción nuclear.

Cuando la energía de los neutrones incidentes es muy baja, es posible obtener una expresión simple para $f(\theta)$. Notemos en primer lugar que el haz incidente está compuesto de partículas de momentum $\hbar k$ paralelo al eje Z , pero que se mueven a diversas distancias de dicho eje por lo que tienen momentos angulares diferentes respecto al dispersor. En otras palabras, la función de onda e^{ikz} no da información acerca de la posición de las partículas y sólo podemos hablar de la probabilidad de que una partícula incidente dada tenga cierto momentum angular. Podemos decir entonces que la función de onda e^{ikz} describe un haz de partículas que tienen la misma energía y momentum pero diferentes valores del momentum angular. En otras palabras, podemos expresar e^{ikz} como suma de funciones de onda de momentum angular:

$$\psi_{\text{inc}} = e^{ikz} = \sum_l \psi_l, \quad (7.18)$$

donde cada ψ_l (llamada onda parcial) corresponde a un momentum angular dado y tiene la misma dependencia angular que las funciones Y_{l0} de la tabla 3-5. (Debemos tener $m_l = 0$ porque si las partículas se mueven según el eje Z su momentum angular respecto al origen de coordenadas debe ser perpendicular al eje Z , o sea $L_x = 0$).

Usando una imagen clásica, podemos definir el *parámetro de impacto* b como la distancia (perpendicular) al eje Z cuando la partícula está aún muy lejos a la izquierda de modo que $L = bp = b\hbar k$. Pero $L = \hbar \sqrt{l(l+1)} \approx \hbar l$. En consecuencia $b\hbar k \sim \hbar l$. Luego, según sea su momentum angular, las partículas caen dentro de las diferentes zonas marcadas en la fig. 7-10. Si la fuerza nuclear es de corto alcance, sólo hay dispersión apreciable cuando b es del orden del alcance o menor. Esto es: las únicas partículas del haz incidente que serán dispersadas son las que tienen $l > k \times \text{alcance}$. Para energías bajas, k es muy pequeño y sólo se dispersan las partículas con $l = 0$. Decimos entonces que tenemos dispersión s . En lenguaje cuántico podemos decir que en presencia de un dispersor de corto alcance se modifica la parte $l = 0$ de la función de onda ψ_{inc} , ec. (7.18) (o sea la onda parcial ψ_0) de un haz de neutrones de energía muy baja, transformándose en ψ_0' , mientras que para $l > 0$ las ψ_l son iguales a las de la ec. (7.18).

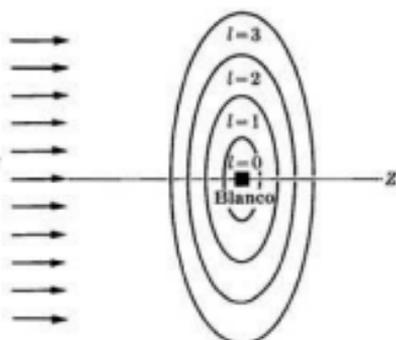


Fig. 7-10. Zonas de momento angular.

Por lo tanto, la función de onda modificada por la dispersión se puede expresar en la forma

$$\psi = \psi'_0 + \sum_{l>0} \psi_l.$$

Se puede demostrar que la onda parcial ψ_0 de momento angular nulo, correspondiente a la función de onda de partícula libre $\psi_{inc} = e^{ikz}$ es

$$\psi_0 = \frac{\text{sen } kr}{kr}.$$

La función $kr\psi_0 = \text{sen } kr$ está representada con una línea de trazos en la fig. 7.11(b). Para obtener la función de onda ψ'_0 de momento angular nulo modificada, notemos que en el caso de un pozo rectangular de potencial, mostrado en la fig. 7-11(a), la partícula es libre cuando $r > a$, mientras que para $r < a$ su función de onda depende de la energía potencial nuclear. Luego, la función de onda para $r > a$ sigue siendo una solución de partícula libre pero corrida en

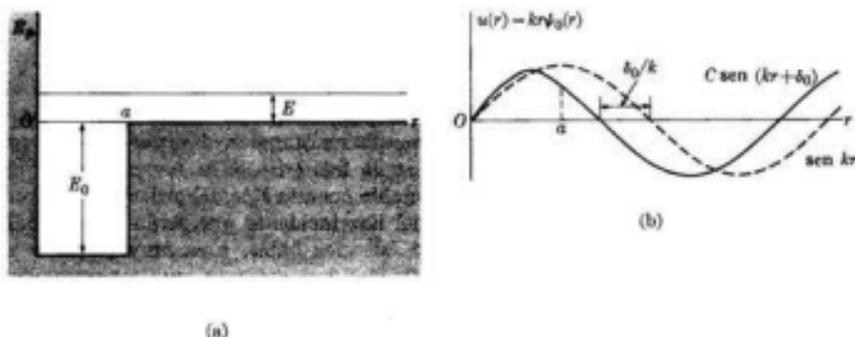


Fig. 7-11. (a) Pozo rectangular de potencial para el deuterón. (b) Funciones de onda para energía positiva.

dirección radial para que se una suavemente con la solución para $r < a$ (recordar el ejemplo 2.6). Debemos escribir entonces

$$\psi'_0 = C \frac{\text{sen}(kr + \delta_0)}{kr}.$$

La cantidad δ_0 es el desfase. La función de onda $kr\psi'_0 = C \text{sen}(kr + \delta_0)$ está representada con una línea llena en la fig. 7-11(b). Obsérvese que la amplitud de ψ'_0 también es diferente de la de ψ_0 . Se puede demostrar (ver el ejemplo 7.4) que la sección eficaz diferencial de dispersión está dada por

$$\sigma(\theta) = \frac{\text{sen}^2 \delta_0}{k^2}. \quad (7.19)$$

Como $\sigma(\theta)$ es independiente del ángulo θ , la dispersión es esféricamente simétrica. La sección eficaz total de dispersión es

$$\sigma = \int \sigma(\theta) d\Omega = \frac{4\pi \text{sen}^2 \delta_0}{k^2} \quad (7.20)$$

porque el ángulo sólido total alrededor del blanco es 4π . Podemos obtener experimentalmente el desfase δ_0 a partir del valor observado de σ . Por otro lado, si usamos la ec. (7.15) es posible demostrar que a energías muy bajas

$$\text{sen}^2 \delta_0 = \frac{\hbar^2 k^2 / 2m}{E_0 + E}.$$

Luego la ec. (7.20) se transforma en

$$\sigma = \frac{4\pi(\hbar^2/2m)}{E_0 + E}. \quad (7.21)$$

En los experimentos de dispersión el neutrón y el protón pueden tener sus espines paralelos (estado triplete) o antiparalelos (estado singlete) y en consecuencia podemos determinar si la fuerza depende o no del espín examinando la sección eficaz en cada caso. Los resultados experimentales muestran que las dos secciones eficaces son diferentes, confirmándose que la fuerza depende del espín. Suponiendo un potencial rectangular, se ha encontrado que la profundidad y el alcance para el estado triplete son $E_0 = 26,2$ MeV y $a = 2,25 \times 10^{-15}$ m, mientras que para el estado singlete ha resultado $E_0 = 17,8$ MeV y $a = 2,51 \times 10^{-15}$ m.

A medida que la energía de los neutrones incidentes aumenta, la dispersión afecta las ondas parciales de momentum angular mayor que cero. El efecto sobre cada onda parcial ψ_l está descrito por el correspondiente desfase δ_l , de modo que la sección eficaz total está dada por

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l \text{sen}^2 \delta_l. \quad (7.22)$$

Evidentemente, la ec. (7.20) corresponde al caso en que el único desfase distinto de cero es δ_0 . Los desfases δ_l son funciones de la energía. Midiendo σ a diferentes energías y analizando la distribución angular de las partículas dispersadas podemos obtener los δ_l experimentalmente. Por otro lado, podemos calcular teóricamente los δ_l suponiendo una energía potencial razonable para la interacción entre la partícula incidente y el dispersor. En consecuencia, los experimentos de dispersión son muy útiles en la búsqueda de la forma de la interacción nuclear.

EJEMPLO 7.4. Cálculo de la sección eficaz para la dispersión s .

Solución: Combinando las ecs. (7.16) y (7.18) podemos escribir

$$\psi = \sum_l \psi_l + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r},$$

de donde, comparando con la ec. (7.19), obtenemos

$$\psi_0 = \psi_0 + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Sabemos por el resultado del problema 3.18 que $\psi_0 = A(\sin kr)/r$. Un análisis más detallado (que omitimos) basado en la normalización de la función de onda indica que debemos hacer $A = 1/k$. Luego,

$$\psi_0 = \frac{\sin kr}{kr}.$$

Además, como ya se señaló en el texto,

$$\psi_0 = C \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr}.$$

Tenemos entonces que

$$C \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr} = \frac{\sin kr}{kr} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Recordando que $\sin x = (e^{ix} - e^{-ix})/2i$, obtenemos, después de operaciones algebraicas simples, la siguiente expresión para la amplitud de dispersión

$$f(\theta) = \frac{e^{i\delta_0} \sin \delta_0}{k^2}.$$

Luego, empleando la ec. (7.17), podemos escribir la sección eficaz diferencial en la forma

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2},$$

que es la expresión dada por la ec. (7.19) para dispersión s o con $l = 0$.

EJEMPLO 7.5. Cálculo de la sección eficaz para la dispersión coulombiana de una partícula cargada por un núcleo.

Solución: Cuando una partícula cargada — un electrón, un protón o una partícula α (o núcleo de He) — pasa cerca de un núcleo, experimenta una fuerza eléctrica que es repulsiva o atractiva según la carga de la partícula incidente. Como resultado, la partícula incidente se dispersa o desvía de su trayectoria original. Sea O la posi-

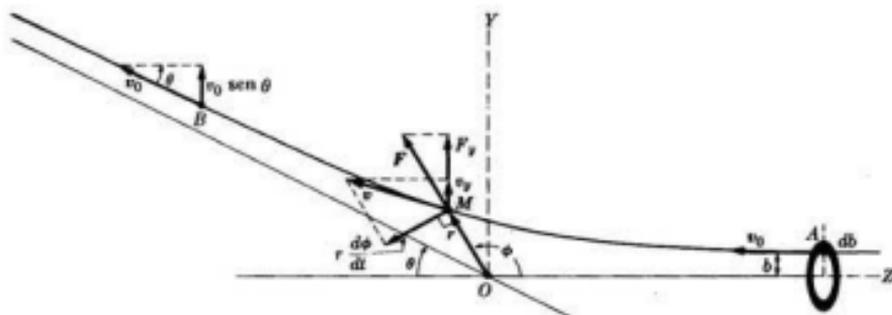


Fig. 7-12. Dispersión coulombiana de una partícula cargada.

ción del núcleo y A la posición inicial del proyectil muy lejos de O (fig. 7-12). La velocidad inicial en A de la partícula es v_0 . El parámetro de impacto b es la distancia (perpendicular) de A a la recta OZ que pasa por O y es paralela a v_0 . Luego, cuando la partícula está en A su momentum angular respecto a O es $L = mv_0 b$. Si la fuerza es central, el momentum angular permanece constante durante el proceso.

Si v es la carga de la partícula ($v = -1$ para electrones, $+1$ para protones y deuterones, y $+2$ para núcleos de He) y Zc es la carga del núcleo, la fuerza repulsiva que actúa sobre la partícula es

$$F = \frac{vZc^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}. \quad (7.23)$$

La partícula incidente describe una trayectoria hiperbólica bajo la acción de esta fuerza, sufriendo una desviación (o dispersión) dada por el ángulo θ , la cual es función de v_0 y de b , o (lo que es lo mismo) de la energía y del momentum angular del proyectil.

Cuando la partícula está en cualquier posición, tal como M, su momentum angular es $mv^2(d\phi/dt)$, ya que $r(d\phi/dt)$ es la componente de la velocidad perpendicular a r . En consecuencia, como el momentum angular debe permanecer constante porque la fuerza es central, se tiene

$$mv^2 \frac{d\phi}{dt} = mv_0 b. \quad (7.24)$$

La ecuación de movimiento en la dirección Y es

$$m \frac{dv_y}{dt} = F_y = F \sen \phi = \frac{vZc^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \sen \phi.$$

Eliminando r^2 por medio de la ec. (7.24), podemos escribir

$$\frac{dv_y}{dt} = \frac{vZc^2}{4\pi\epsilon_0 mv_0 b} \sen \phi \frac{d\phi}{dt}.$$

Para hallar la desviación de la partícula debemos integrar esta ecuación desde un extremo de la trayectoria al otro. En A el valor de v_y es cero porque el movimiento inicial es paralelo al eje Z; también $\phi = 0$. En B tenemos $v_y = v_0 \sen \theta$ y $\phi = \pi - \theta$. Obsérvese que en B la velocidad es nuevamente v_0 por simetría (o por conservación de la energía): la velocidad que la partícula pierde cuando se aproxima a O la vuelve

a ganar cuando se aleja de O . Luego,

$$\int_0^{\pi \sin \theta} dv_y = \frac{vZe^2}{4\pi\epsilon_0 m v_0 b} \int_0^{\pi-\theta} \sin \phi \, d\phi$$

o sea

$$v_0 \sin \theta = \frac{vZe^2}{4\pi\epsilon_0 m v_0 b} (1 + \cos \theta).$$

Recordando que $\cotg \frac{1}{2}\theta = (1 + \cos \theta)/\sin \theta$, obtenemos finalmente

$$\cotg \frac{1}{2}\theta = \frac{4\pi\epsilon_0 m v_0^2}{vZe^2} b. \quad (7.25)$$

Esta relación da el ángulo de dispersión en función del parámetro de impacto b o del momentum angular $L = m v_0 b$.

A continuación tenemos que hallar la sección eficaz definida para el caso general en la ec. (7.17). Supongamos que sobre un blanco nuclear O se proyecta un haz de partículas provenientes de un acelerador. No todas las partículas tienen el mismo momentum angular o parámetro de impacto por lo que no todas experimentan la misma desviación. Las que se desvían entre los ángulos θ y $\theta + d\theta$ son las partículas que tienen el parámetro de impacto entre b y $b + db$, esto es, las partículas que están en el anillo sombreado de la fig. 7-12, el cual tiene un área de $2\pi b \, db$. Si N es el número de partículas por unidad de sección transversal del haz incidente, el número de partículas que pasa en la unidad de tiempo por el anillo es $v_0 N(2\pi b \, db)$. Esta cantidad es igual al flujo de partículas dispersadas por unidad de tiempo dentro del ángulo sólido $d\Omega$ definido por θ y $\theta + d\theta$. La densidad de corriente inicial es evidentemente $v_0 N$. Por lo tanto, aplicando la ec. (7.17), se obtiene para la sección eficaz de dispersión

$$\sigma_C(\theta) = \frac{v_0 N(2\pi b \, db)}{v_0 N \, d\Omega} = 2\pi b \frac{db}{d\Omega}, \quad (7.26)$$

donde el subíndice C indica que se trata de dispersión coulombiana. De la ec. (7.25) se obtiene

$$b = (vZe^2/4\pi\epsilon_0 m v_0^2) \cotg \frac{1}{2}\theta$$

de donde

$$db = -\frac{1}{2}(vZe^2/4\pi\epsilon_0 m v_0^2) \operatorname{cosec}^2 \frac{1}{2}\theta \, d\theta.$$

Además

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta \, d\theta = 4\pi \sin \frac{1}{2}\theta \cos \frac{1}{2}\theta \, d\theta.$$

Sustituyendo estos valores en la ec. (7.26) y empleando sólo valores absolutos, ya que el signo negativo sólo significa que θ disminuye cuando b aumenta, obtenemos

$$\sigma_C(\theta) = \frac{v^2 Z^2 e^4}{4(4\pi\epsilon_0)^2 m^2 v_0^4} \operatorname{cosec}^4 \frac{1}{2}\theta. \quad (7.27)$$

Este resultado muestra que las partículas dispersadas por una fuerza inversamente proporcional al cuadrado de la distancia están distribuidas estadísticamente conforme a la ley $\operatorname{cosec}^4 \frac{1}{2}\theta$. La ec. (7.27) fue obtenida por el físico británico Ernest Rutherford (1871-1937), quien la empleó junto con sus colaboradores en experimentos realizados entre 1911 y 1913 para analizar la dispersión de partículas α al atravesar hojuelas finas. La verificación experimental de la ley $\operatorname{cosec}^4 \frac{1}{2}\theta$ suministró la evidencia para el modelo nuclear del átomo que ha sido aceptado desde entonces como el modelo atómico correcto.

Si la única fuerza ejercida por el núcleo blanco sobre el proyectil fuera la repulsión coulombiana, la ec. (7.27) sería válida para todas las energías. Sin embargo, cuando el proyectil tiene un momentum angular (o un parámetro de impacto) suficiente-

mente pequeño y una energía suficientemente alta como para que el mismo pase muy cerca del núcleo, puede haber desviaciones respecto a $\alpha_c(\theta)$ si además de la fuerza coulombiana existe una fuerza nuclear de corto alcance. A partir del análisis de estas desviaciones podemos computar los desfases correspondientes a los efectos nucleares. Estos cálculos proveen información sobre la fuerza nuclear entre dos protones, por ejemplo.

Cuando los proyectiles son electrones rápidos, pueden penetrar a través del núcleo. Esto también introduce una desviación respecto a $\alpha_c(\theta)$, la cual se debe en este caso a la distribución de carga dentro del núcleo. R. Hofstadter y sus colaboradores obtuvieron, analizando estas desviaciones, las curvas mostradas en la fig. 7-2.

Obsérvese que en la discusión anterior hemos usado una descripción clásica de la dispersión coulombiana, lo cual puede parecer un apartamiento inesperado del procedimiento desarrollado en la sección precedente para describir la dispersión nuclear. Empero, los cálculos matemáticos de la dispersión coulombiana usando métodos cuánticos son bastante difíciles y están más allá del alcance de este libro. Una de las razones de esta dificultad es que la fuerza coulombiana dada por la ec. (7.23) es de largo alcance y afecta, por lo tanto, a todas las ondas parciales de la ec. (7.18) aunque la energía sea muy baja. Por otra parte, la dispersión coulombiana es uno de los casos en que coinciden los resultados de las descripciones clásica y cuántica. Se puede demostrar que la amplitud de dispersión coulombiana está dada por

$$f_c(\theta) = \frac{\nu Z e^2}{2(4\pi\epsilon_0)mv_0^2} \operatorname{cosec}^2 \frac{1}{2}\theta e^{-\gamma \ln |\cot(\theta/2) + i\pi\epsilon_0|} \quad (7.28)$$

la cual, sustituida en la ec. (7.17), da el mismo valor de α_c que la ec. (7.27). En la ecuación anterior $\gamma = \nu Z e^2 / 4\pi\epsilon_0 \hbar v_0$ y ϵ_0 es una constante que depende de γ .

7.9 Modelo de capas

Uno de los objetivos básicos en la física nuclear es determinar el movimiento de los nucleones en un núcleo y obtener de él propiedades nucleares en los estados fundamental y excitados. El problema es más complejo que en el caso atómico debido a la falta de una fuerza central dominante y a la existencia de dos clases de partículas — neutrones y protones — que obedecen separadamente el principio de exclusión. Sin embargo, hay una fuerte evidencia que indica que cada nucleón se mueve en un campo promedio de fuerza producido por los otros nucleones y que se puede considerar central en primera aproximación. Así, usando un modelo de partículas independientes como en el caso de los electrones en un átomo, caracterizaríamos los estados de energía de los nucleones por medio de números cuánticos n y l que dan el nivel de energía y el momentum angular orbital. El número cuántico n indica el orden de energía creciente en que aparecen los niveles con el mismo l . Así, 1s, 2s, 3s, . . . , etc. significan el primero, segundo, tercero, etc. niveles con $l = 0$ en orden de energía creciente.

Así como los átomos presentan una estructura de capas y tienen capas completas cuando todos los niveles de energía han recibido su cuota total de electrones, los niveles nucleares presentan también una cierta estructura de capas. Como en un núcleo hay dos clases de partículas, hay una serie doble de capas: una para protones y otra para neutrones. Para ciertos valores de Z o de N correspondientes a capas completas, resultan núcleos que son particularmente estables, tal como los gases nobles son átomos con ciertas capas electrónicas

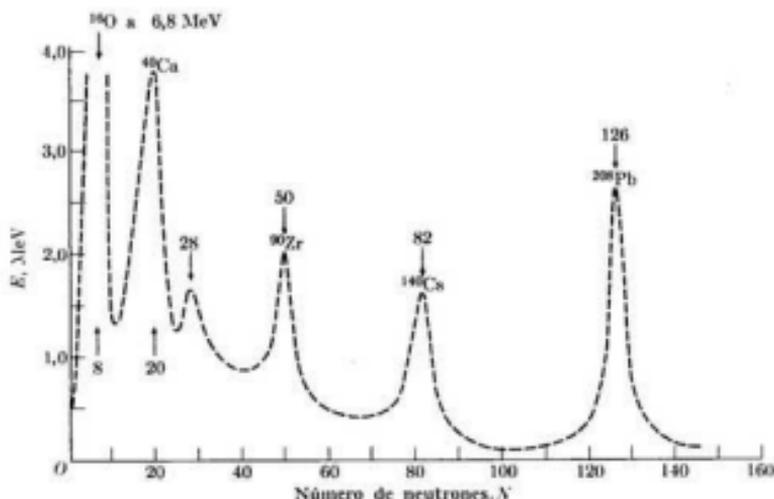


Fig. 7-13. Energía del primer estado excitado de núcleos par-par.

completas. Estos valores de Z o de N (comúnmente llamados "números mágicos") son 2, 8, 20, 28, 50, 82 y 126. Por ejemplo, la fig. 7-13 muestra la energía del primer estado excitado de varios núcleos par-par. Los núcleos mágicos tienen un primer estado excitado anormalmente alto, lo cual sugiere que en los números mágicos hay un gran espaciamiento de energía entre el último nivel de energía o capa lleno y el siguiente estado vacío. Esto ocurre también en los átomos de los gases nobles (recordar la fig. 4-5). Análogamente, el número de isótopos e isótonos estables con Z o N iguales a un número mágico, respectivamente, es relativamente grande (fig. 7-14). Además la sección eficaz de captura neutrónica de los núcleos con número N mágico es extremadamente baja (fig. 7-15), lo cual indica una unión muy débil del nucleón extra.

Para explicar los valores de los números mágicos, M. G. Mayer y J. H. D. Jensen propusieron independientemente en 1949 que además de la fuerza central media hay en los núcleos una fuerte *interacción espín-órbita* (no necesariamente de origen electromagnético como en el caso de los electrones atómicos discutido en la sección 3.9) que actúa sobre cada nucleón y es proporcional a $L \cdot S$. La existencia de una interacción espín-órbita está ampliamente apoyada por la evidencia experimental (ver la nota al final de esta sección). Como S puede ser paralelo o antiparalelo a L dando valores diferentes del momentum angular total $J = L + S$, cada nivel (n, l) se separa en dos niveles por la acción de la interacción espín-órbita, correspondiendo la energía más baja a L y S paralelos. Un estado de energía nucleónica está caracterizado entonces por los números cuánticos n, l, j , donde $j = l \pm \frac{1}{2}$. Para un valor dado de l , el estado con $j = l + \frac{1}{2}$ tiene menos energía que el estado con $j = l - \frac{1}{2}$. Esto es lo contrario de lo que ocurre con

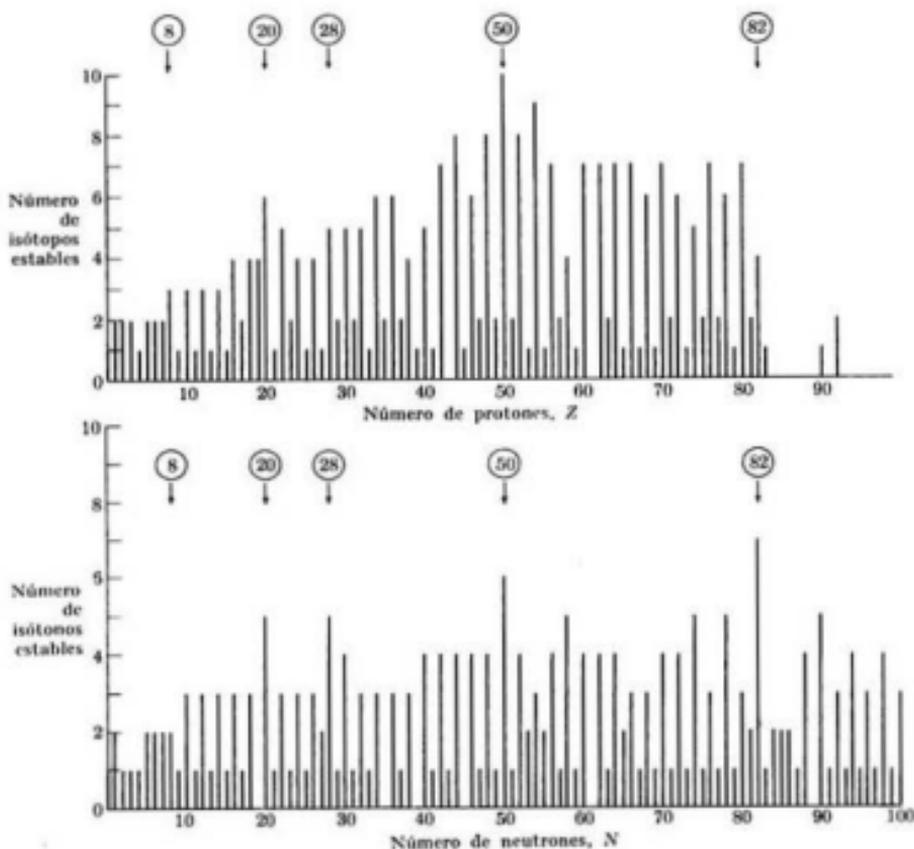


Fig. 7-14. Número de nucleidos estables en función de (a) el número atómico, (b) el número de neutrones.

los electrones atómicos y demuestra que la interacción espín-órbita no puede ser de origen electromagnético. Como

$$\begin{aligned}
 L \cdot S &= \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \\
 &= \frac{1}{2}(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4})\hbar^2 \\
 &= \begin{cases} \frac{1}{4}\hbar^2, & j = l + \frac{1}{2}, \\ -\frac{1}{2}(l+1)\hbar^2, & j = l - \frac{1}{2}. \end{cases}
 \end{aligned}$$

la separación entre dos estados con el mismo l pero diferente j es proporcional a $2l + 1$ y, por lo tanto, aumenta con l . La degeneración de cada estado n, l, j

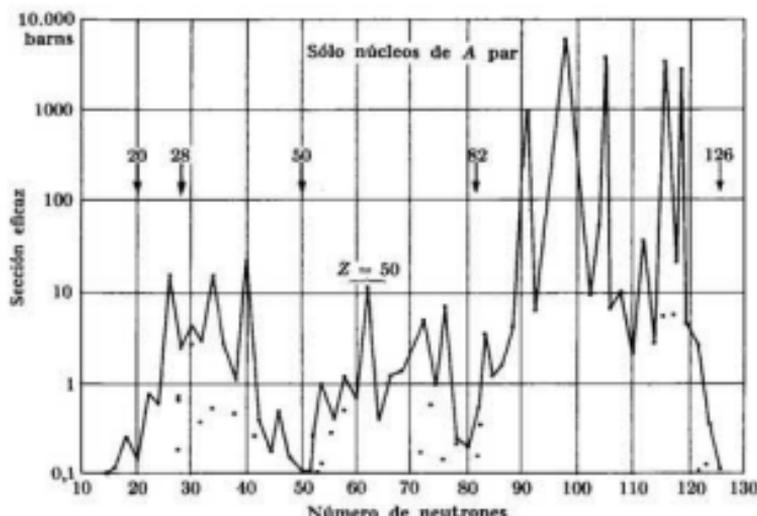


Fig. 7-15. Sección eficaz de captura electrónica en función del número de neutrones. [Adaptada de: B. Flowers, *Prog. in Nuc. Phys.* 2, 235 (1952); Pergamon Press, London.]

es $2j + 1$, correspondiente a las $2j + 1$ orientaciones posibles de \mathbf{J} respecto a un eje dado. Luego, de acuerdo con el principio de exclusión, el número máximo de neutrones o protones que puede haber en un nivel o capa n, l, j es $2j + 1$, esto es:

j	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{7}{2}$	$\frac{9}{2}$	$\frac{11}{2}$	$\frac{13}{2}$...
Número máximo de protones o neutrones	2	4	6	8	10	12	14	...

Tal como para los electrones atómicos, se designa cada estado nucleónico con las letras s, p, d, etc., correspondientes al valor de l y un subíndice que da el valor de j . Así, para $l = 0$ tenemos un estado $s_{1/2}$, para $l = 1$ tenemos estados $p_{1/2}$ y $p_{3/2}$, para $l = 2$ los estados son $d_{3/2}$ y $d_{5/2}$, y así sucesivamente.

En la fig. 7-16 se muestra esquemáticamente el ordenamiento de los niveles de energía de una partícula para protones y neutrones; en la misma se indica cómo cada nivel (n, l) debido a la fuerza central media se desdobla por acción de la interacción espín-órbita. La paridad de cada nivel está dada por $(-1)^l$. El orden de los niveles responde a las exigencias de la evidencia experimental. Se ve claramente los espaciamientos de energía en los números mágicos. Se presentan cada vez que aparece un nuevo valor de l más alto el cual produce un desdoblamiento espín-órbita grande. La pequeña diferencia entre los niveles pro-

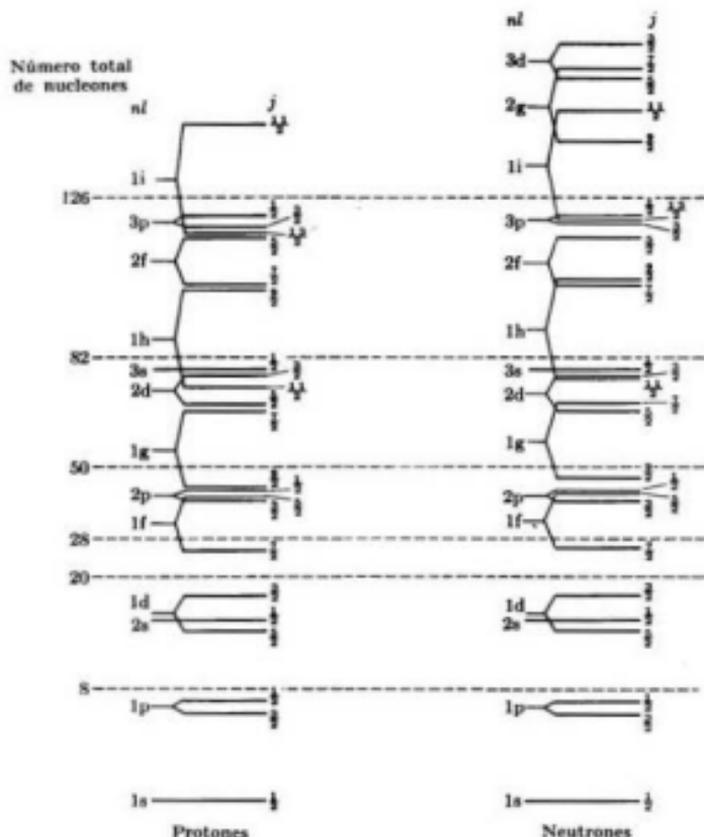


Fig. 7-16. Niveles de energía de protones y neutrones según el modelo de capas. [Adaptada de: P. F. A. Klinkenberg, *Revs. Mod. Phys.* 24, 63 (1952).]

tónicos y los neutrónicos se debe a la repulsión coulombiana entre los protones. Han sido propuestos varios potenciales empíricos de fuerzas centrales para reproducir el orden experimental de los niveles, pero ninguno de ellos tiene aún un fundamento teórico y experimental completo.

Se ha observado que todos los núcleos par-par tienen espín cero en su estado fundamental, mientras que en los núcleos de A impar con Z par y N impar (o a la inversa) el espín nuclear I coincide en la mayoría de los casos con el valor de j del último nucleón no apareado (en unos pocos casos es igual a $j - 1$). Si se excita el nucleón no apareado de un núcleo de A impar a un estado cercano, el espín nuclear del estado excitado coincide generalmente con el nuevo j del

nucleón excitado. Luego, cuando se está llenando un nivel (n, l, j) parece que los nucleones idénticos aparean sus momenta angulares totales de modo tal que si el número de nucleones idénticos (protones o neutrones) que hay en el nivel (n, l, j) es par, el momentum angular resultante es cero, y si es impar su momentum angular resultante es j (o $j - 1$). En el caso de los núcleos impar-impar (de los que sólo cuatro son estables), es más difícil determinar el espín nuclear; en principio están permitidos todos los valores enteros de I entre $j_p + j_n$ y $|j_p - j_n|$, donde j_p corresponde al protón no apareado y j_n al neutrón no apareado. En algunos casos se presenta el valor más alto de I y en otros el más pequeño.

Un modelo de capas con partículas independientes no puede dar cuenta de estas reglas de acoplamiento o apareamiento de los momenta angulares de los nucleones. Se atribuye estas reglas a la llamada interacción "residual", es decir la diferencia entre la interacción nuclear real que experimenta un nucleón y las fuerzas medias central y espín-órbita introducidas en el modelo de capas. La interacción residual contribuye a la estabilidad nuclear por medio de lo que se denomina *efecto de la energía de apareamiento*. Podemos ver que este efecto estabilizante en la tabla 7-2, la cual muestra el número de nucleidos estables y casi estables (o de vida larga). Hay una mayoría evidente de nucleidos estables par-par.

El modelo de capas ha tenido bastante éxito explicando muchas propiedades de los estados nucleares. Algunas veces es necesario hacer cálculos bastante complicados. Sin embargo, hay muchos casos en que los cálculos del modelo de capas no pueden explicar los hechos experimentales en forma precisa. Por ejemplo, los momentos cuadrupolares eléctricos calculados usando el modelo de capas son

TABLA 7-2 Número de nucleidos estables y de vida larga

Z	N	Estable	Vida larga
Par	Par	155	11
Par	Impar	53	3
Impar	Par	50	3
Impar	Impar	4	5

sistemáticamente demasiado pequeños, particularmente en las regiones que están entre números mágicos o capas cerradas.

Hay varios efectos *colectivos* en un núcleo debido al fuerte acoplamiento entre los nucleones. Los nucleones que ocupan el carozo compuesto de capas cerradas, se comportan de un modo bastante similar a una gota de líquido, la cual es capaz de mantener oscilaciones de forma alrededor de una forma esférica de equilibrio. Las oscilaciones colectivas se realizan a volumen constante y cada núcleo puede tener varios modos normales de oscilación. Los nucleones que ocupan las capas externas no llenas ejercen una especie de acción polarizante y tienden a dar al núcleo una forma no esférica de equilibrio que se parece mucho a un elipsoide alargado o achatado. Esta deformación es particularmente grande en las regiones $90 < N < 114$ y $Z > 88$, explicando el valor relativamente grande del mo-

mento cuadrupolar eléctrico de estos núcleos, cosa que no puede hacer el modelo de capas.

Se ha desarrollado una teoría que combina el modelo de capas y los efectos colectivos. Se denomina *modelo unificado* del núcleo; empero su análisis está por encima del nivel de este libro.

Nota: Evidencia experimental de la interacción espín-órbita en los núcleos

Hemos presentado la interacción espín-órbita nuclear como una hipótesis conveniente para explicar ciertas características de los niveles nucleares de energía. Sin embargo, ¿hay alguna evidencia experimental directa de esa interacción espín-órbita? La respuesta es afirmativa y proviene del análisis de los experimentos de dispersión. Así como la interacción entre un campo magnético y un momento dipolar magnético (que es de la forma $-\mathbf{B} \cdot \mathbf{M}$) implica un torque que tiende a alinear \mathbf{M} paralelamente a \mathbf{B} , una interacción espín-órbita de la forma $-\mathcal{I}(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ implica un torque que tiende a alinear \mathbf{S} paralelamente a \mathbf{L} (o en la dirección opuesta si tenemos signo positivo).

Supongamos que un haz no polarizado de protones (es decir con sus espines orientados al azar) incide sobre núcleos de helio, tal como se muestra en la fig. 7-17.

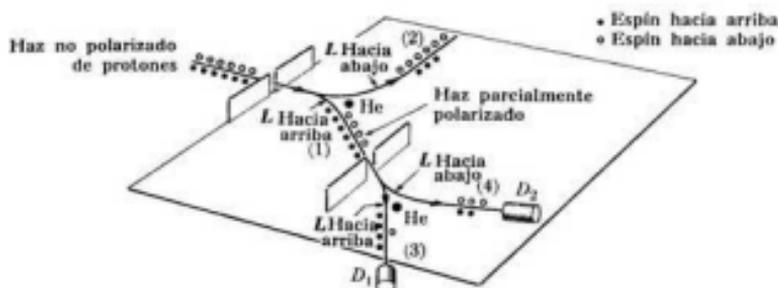


Fig. 7-17. Experimento de dispersión doble.

Consideremos los protones dispersados en el plano de la figura y usemos el núcleo de helio, que es el dispersor, como referencia para medir el momentum angular orbital. Los protones dispersados según la trayectoria (1) tienen su momentum angular L "hacia arriba" y los que siguen la trayectoria (2) tienen L "hacia abajo". La interacción espín-órbita entre los protones y el núcleo de helio en cada trayectoria favorece los protones con espín paralelo a L , por lo que en las trayectorias (1) y (2) los protones tienen sus espines preferentemente hacia arriba y hacia abajo, respectivamente y los dos haces están parcialmente polarizados. A continuación, el haz (1) sufre una segunda dispersión en otro núcleo de helio que lo desdobla en los haces (3) y (4) con L hacia arriba y hacia abajo, respectivamente. Los protones que siguen la trayectoria (3) tienen su espín preferentemente hacia arriba y los que siguen la (4) preferentemente hacia abajo. Como en el haz (1) hay más protones con espín hacia arriba que con espín hacia abajo, la interacción espín-órbita favorece la dispersión según la trayectoria (3) más que según la (4). En consecuencia el detector D_1 debe registrar una corriente de protones mayor que D_2 . Esto es lo que se observa en el experimento. En ausencia de interacción espín-órbita, los haces (3) y (4) deberían tener la misma intensidad. Por lo tanto, la evidencia experimental apoya claramente

la existencia de una interacción espín-órbita nuclear, tal como se manifiesta en la polarización producida en la dispersión.

EJEMPLO 7.6. Cálculo del momento dipolar magnético de un núcleo de A impar usando el modelo de capas.

Solución: Conforme al modelo de capas extremo con partículas independientes, en un núcleo de A impar que tiene Z impar y N par (o a la inversa), se atribuye el momento magnético al nucleón no apareado. Todos los otros nucleones tienen sus momenta angulares resultantes apareados en direcciones opuestas por lo que no contribuyen al momento dipolar magnético nuclear resultante. Consideremos un nucleón de momentum angular L y espín S . Según las ecs. (7.3) y (7.5), podemos escribir el momento magnético de un nucleón en la siguiente forma válida para neutrones y protones:

$$\mathbf{M} = (e/2m_p)(g_l\mathbf{L} + g_s\mathbf{S}), \quad (7.29)$$

donde $g_l = +1$ para protones y cero para neutrones, y los valores de g_s , fueron dados en la sección 7.4 para ambas clases de nucleones. Como L y S realizan un movimiento de precesión alrededor de su resultante J , el valor medio de \mathbf{M} tiene la dirección de J y está dado por

$$\bar{\mathbf{M}} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{u}_J \mathbf{u}_J = \frac{\mathbf{M} \cdot \mathbf{J}}{J^2} \mathbf{J},$$

donde \mathbf{u}_J es el versor en la dirección de J . La componente de $\bar{\mathbf{M}}$ según el eje Z es

$$\begin{aligned} \bar{M}_z &= (\mathbf{M} \cdot \mathbf{J}/J^2)J_z = (\mathbf{M} \cdot \mathbf{J}/J^2)m\hbar \\ &= (e\hbar/2m_p) [(g_l\mathbf{L} + g_s\mathbf{S}) \cdot \mathbf{J}/J^2]m. \end{aligned} \quad (7.30)$$

Como se explicó en la sección 7.4, el valor tabulado del momento magnético μ es por definición el valor de \bar{M}_z cuando m tiene su valor máximo (en nuestro caso, cuando $m = j$) dividido por $\mu_N = e\hbar/2m_p$. Recordando que $J^2 = j(j+1)\hbar^2$, tenemos

$$\mu = \frac{(\bar{M}_z)_{m=j}}{\mu_N} = \frac{g_l\mathbf{L} \cdot \mathbf{J} + g_s\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}}{(j+1)\hbar^2}. \quad (7.31)$$

Pero

$$\begin{aligned} \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} &= \frac{1}{2}(J^2 + L^2 - S^2) = \frac{1}{2}[j(j+1) + l(l+1) - \frac{1}{2}\hbar^2], \\ \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} &= \frac{1}{2}(J^2 - L^2 + S^2) = \frac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) + \frac{1}{2}\hbar^2]. \end{aligned}$$

Introduciendo estos resultados en la ec. (7.31), tenemos que para los dos casos $j = l \pm \frac{1}{2}$ el momento magnético es

$$\begin{aligned} \mu &= (j - \frac{1}{2})g_l + \frac{1}{2}g_s, & j &= l + \frac{1}{2}, \\ \mu &= \frac{j}{j+1} [(j + \frac{1}{2})g_l - \frac{1}{2}g_s], & j &= l - \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (7.32)$$

En el modelo de capas con partículas independientes tenemos que para A impar, se considera que el espín nuclear es igual al momentum angular de la partícula no apareada. Luego, haciendo $I = j$ en las ecs. (7.32) e introduciendo los valores de g_l y de g_s para protones y neutrones, obtenemos dos juegos de valores de μ , según que sea Z o N impar, en función del espín nuclear. Los mismos se denominan *líneas de Schmidt* y están representadas en las figs. 7-18 y 7-19 para Z impar y para N impar respectivamente. Los valores experimentales están indicados con cruces para $j = l + \frac{1}{2}$ y con círculos para $j = l - \frac{1}{2}$. Podemos ver que la mayoría de los momentos magnéticos no yacen sobre las líneas de Schmidt sino en la región que está entre ellas. La falta de acuerdo preciso no es sorprendente, ya que el modelo de capas con partículas independientes es bastante grosero. Es posible obtener un acuerdo mejor usando el modelo unificado del núcleo.

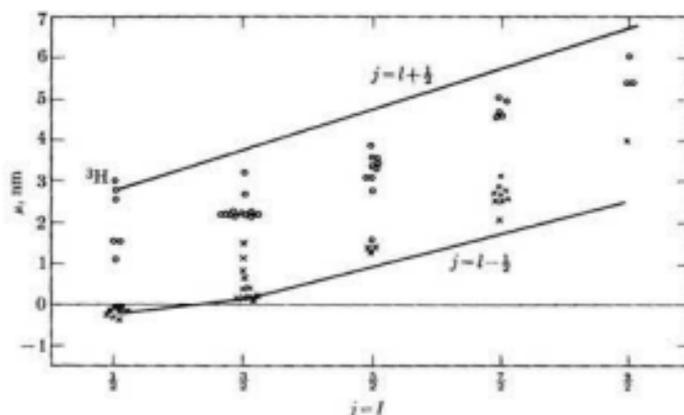


Fig. 7-18. Momentos dipolares magnéticos y líneas de Schmidt para núcleos con Z impar.

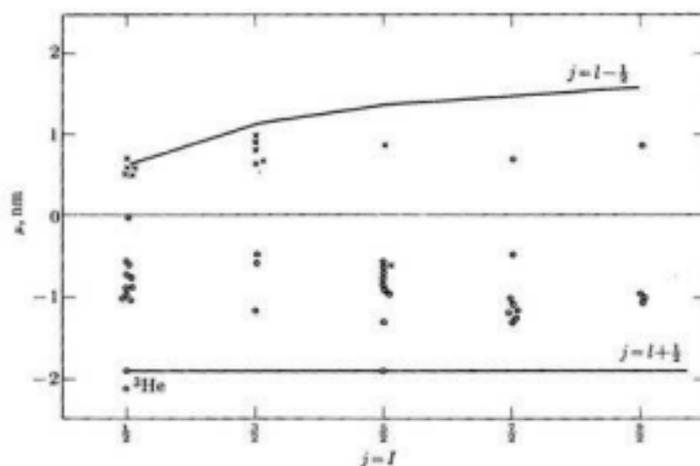


Fig. 7-19. Momentos dipolares magnéticos y líneas de Schmidt para núcleos con N impar.

7.10 Transiciones radiativas nucleares

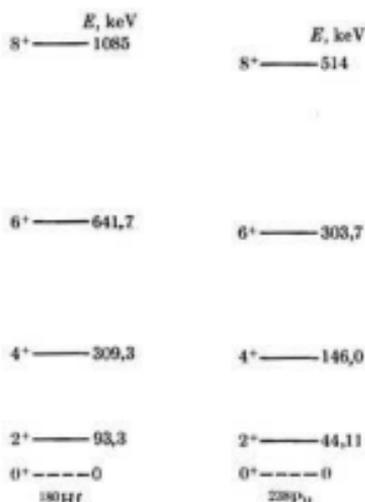
Un núcleo puede tener varios estados excitados además de la configuración del estado fundamental. Se los puede clasificar en dos grupos: *excitaciones de partícula* y *excitaciones colectivas*. En una excitación de partícula uno o más nucleones pasan a otro nivel de energía más alta, sin modificar esencialmente el movimiento

de los otros nucleones. Las energías de las excitaciones de partícula son del orden de un MeV.

Tal como se explicó en la sección anterior, los núcleos que están lejos de los números mágicos y que tienen capas incompletas no son esféricos sino que se parecen a elipsoides alargados o achatados. En estos núcleos deformados, como en las moléculas, los ejes principales rotan en el espacio resultando una *rotación colectiva* en la que participan todos los nucleones. La energía rotacional está cuantizada, por lo que un núcleo deformado tiene varios niveles rotacionales de energía. En los núcleos par-par los niveles rotacionales de energía están dados por

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}} I(I + 1), \quad (7.33)$$

donde I es el momentum angular de rotación de todo el núcleo, el cual, por razones de simetría, sólo puede tomar



valores pares, esto es $I = 0, 2, 4, \dots$. Por lo tanto, todos los niveles rotacionales tienen paridad par. El momento de inercia efectivo del núcleo es \mathcal{I} y siempre es menor que el momento de inercia que se obtiene considerando que el núcleo es un elipsoide rígido, porque no todos los nucleones participan de la misma manera en el movimiento rotacional. La fig. 7-20 muestra los niveles rotacionales de energía del ^{180}Hf y el ^{238}Pu . Estos niveles siguen claramente la ley dada por la ec. (7.33). El ordenamiento de los niveles rotacionales de energía es más complejo en los núcleos que no son par-par.

Fig. 7-20. Niveles rotacionales de energía del ^{180}Hf y el ^{238}Pu .

Puede haber además varios estados excitados vibracionales asociados con las oscilaciones colectivas mencionadas en la sección precedente. Estos estados excitados vibracionales están separados por la misma energía $\hbar\omega$, donde ω es la frecuencia angular vibracional. En los núcleos par-par el espín o momentum angular del primer estado excitado vibracional es 2 y el segundo estado excitado vibracional puede tener espín 0, 2 ó 4. Ambos niveles tienen paridad par. La fig. 7-21 muestra algunos niveles vibracionales de ^{82}Kr , ^{126}Te , ^{136}Xe y ^{192}Pt . Las energías de excitación colectiva rotacional y vibracional son, en general, mucho más bajas que las energías de excitación de partícula y llegan a unos pocos keV. Esto explica el primer estado excitado tan bajo en los núcleos altamente deformados que se encuentran entre los núcleos mágicos, tal como se muestra en la fig. 7-13.

Los núcleos que tienen capas completas son esféricos y no tienen niveles rotacionales o vibratoriales a baja energía. Los núcleos con capas casi completas están ligeramente deformados y no tienen niveles excitados rotacionales, aunque sí niveles vibratoriales. Vemos con este estudio que los niveles de energía de un núcleo son tan complejos como los de una molécula. Sin embargo, es más difícil predecir teóricamente los niveles de energía de un núcleo que los de una molécula a causa del conocimiento incompleto que tenemos de la interacción nuclear.

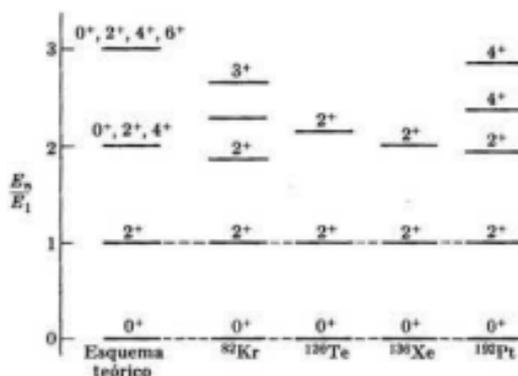


Fig. 7-21. Niveles vibratoriales de energía de algunos núcleos.

Un núcleo puede pasar a un estado excitado absorbiendo un fotón de energía apropiada o por colisión inelástica con una partícula rápida que pasa cerca, tal como un protón o un neutrón. Si la partícula está cargada, este último proceso se denomina *excitación coulombiana* y es muy útil para estudiar los niveles bajos de energía de los núcleos deformados.

Un núcleo excitado puede devolver la energía que tiene en exceso haciendo una transición al nivel fundamental con emisión de radiación electromagnética llamada *rayos gamma* por razones históricas. El espectro nuclear de rayos gamma es entonces de origen similar al de los espectros atómicos y moleculares. El espectro γ resulta del reajuste del movimiento de los nucleones en una transición entre dos estados estacionarios nucleares. En la fig. 7-22 están representadas algunas transiciones γ del ¹¹¹Cd, el ¹³¹Xe y el ¹³⁶Xe. A la izquierda se da el momento angular y la paridad de cada nivel y a la derecha la energía correspondiente respecto al estado fundamental.

En los átomos y en las moléculas sólo las transiciones dipolares eléctricas son importantes mientras que en los núcleos son a menudo importantes las transiciones multipolares eléctricas y magnéticas de orden superior, especialmente en las transiciones colectivas en que participan muchos nucleones. Las transiciones eléctricas y magnéticas se designan con los símbolos E y M seguidos del número 1, 2, 3, ... que da el valor de ΔI y que corresponde a la radiación dipolar,

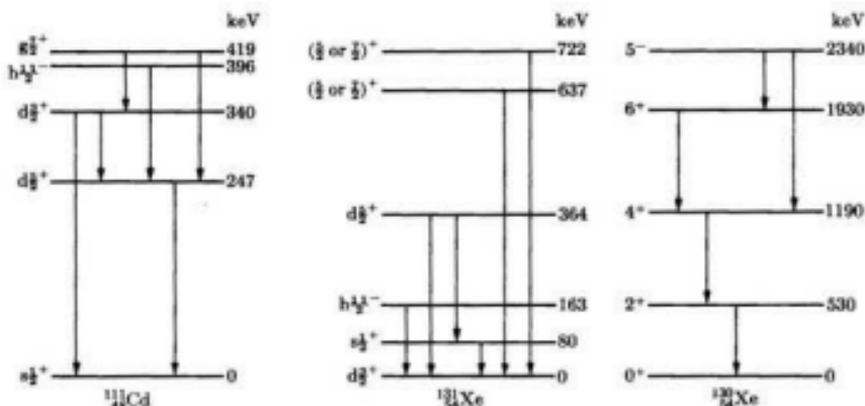


Fig. 7-22. Transiciones radiativas y del ^{112}Cd , el ^{124}Xe y el ^{136}Xe .

cuadrupolar, octopolar, etc. El tipo de transición está determinado por el cambio de momentum angular y de paridad en el núcleo, conforme al siguiente esquema:

Cambio de espín	$\Delta I = I_f - I_i$	1	2	3	4
Cambio de paridad	Sí	E1	M2	E3	M4
	No	M1	E2	M3	E4

Las probabilidades de transición radiativa dependen de la diferencia de energía entre los dos estados involucrados, del número másico del núcleo y del cambio de espín. La probabilidad de transición aumenta a medida que aumenta el cambio de energía y disminuye a medida que el valor de ΔI aumenta. En consecuencia, para un cambio dado de energía, cuanto mayor es la diferencia de momentum angular entre un estado excitado y el fundamental, menor es la probabilidad de transición y más larga la vida media del estado excitado, a no ser que exista la posibilidad de hacer una transición a otro estado excitado de energía más baja con un cambio menor de momentum angular. La fig. 7-23 muestra la vida media de estados excitados en función de la energía absorbida o emitida, para diferentes transiciones multipolares que involucren un protón, calculadas usando el modelo de capas para un núcleo de número másico 100 aproximadamente.

Las transiciones colectivas rotacionales y vibracionales, que tienen $\Delta I = 2$ (y sin cambio de paridad), son del tipo E2, o sea, transiciones cuadrupolares eléctricas. Las transiciones cuadrupolares eléctricas observadas en muchos núcleos con capas incompletas tienen probabilidades de transición mayores que las predichas por el modelo de capas. Esto sugiere que estos núcleos tienen un momento cuadrupolar eléctrico bastante grande respecto a los cálculos hechos con el mo-

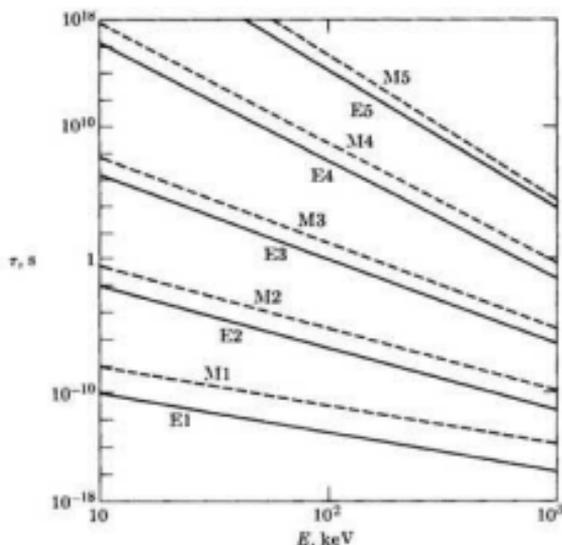


Fig. 7-28. Vida media de transiciones de una partícula que involucran un protón en un núcleo de número másico 100 aproximadamente, tal como las predice el modelo de capas.

delo de capas y que tienen entonces una deformación relativamente grande (recordar la fig. 7-4). Fue este hecho el que dio el impulso inicial al modelo colectivo del núcleo.

Podemos ver en la fig. 7-16 que en los núcleos de A impar que tienen Z o N ligeramente menor que los números mágicos 50, 82 ó 126 hay niveles de energía cercanos cuyos momentos angulares difieren grandemente. Esto da lugar a estados excitados que tienen vidas medias relativamente largas. Por ejemplo, en el ^{137}Ba ($Z = 56$ y $N = 81$), que tiene un neutrón menos que el número mágico 82, el neutrón no apareado puede estar en los estados $2d_{3/2}$, $3s_{1/2}$ ó $1h_{11/2}$. En la realidad, el estado fundamental corresponde a la configuración en que el neutrón suelto está en el estado $2d_{3/2}$ y el siguiente estado excitado corresponde a una configuración en la que el neutrón suelto está en el estado $1h_{11/2}$ [fig. 7-24(a)]. La diferencia de energía entre los dos estados es 0,661 MeV. Una transición entre los dos estados corresponde al $\Delta I = 4$ con cambio de paridad o sea que es una transición M4. La vida media observada del estado excitado es de cerca de 2,6 min. Otro ejemplo es ^{89}Kr ($Z = 36$ y $N = 47$). Este núcleo tiene tres neutrones menos que el número mágico 50. Los estados que compiten para la configuración del estado fundamental son $2p_{3/2}$ y $1g_{9/2}$. El primer estado tiene espín $\frac{1}{2}$ y paridad impar. La segunda configuración podría tener $\frac{7}{2}$ ó $\frac{9}{2}$ con paridad par, dando lugar a los niveles de energía mostrados en la fig. 7-24(b). La transición que se observa es $I = \frac{1}{2}^- \rightarrow I = \frac{7}{2}^+$ o sea una transición E3, con una energía de 0,032 MeV. La vida media del estado $I = \frac{1}{2}^-$ es aproximadamente 114 min.

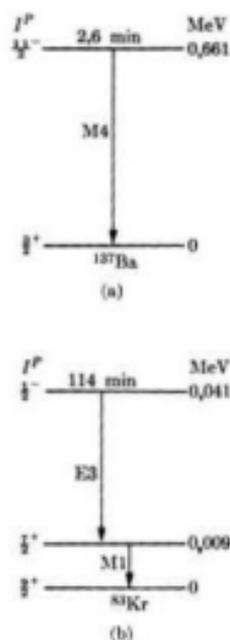


Fig. 7-24. Transiciones isoméricas en el ^{137}Ba y el ^{80}Kr .

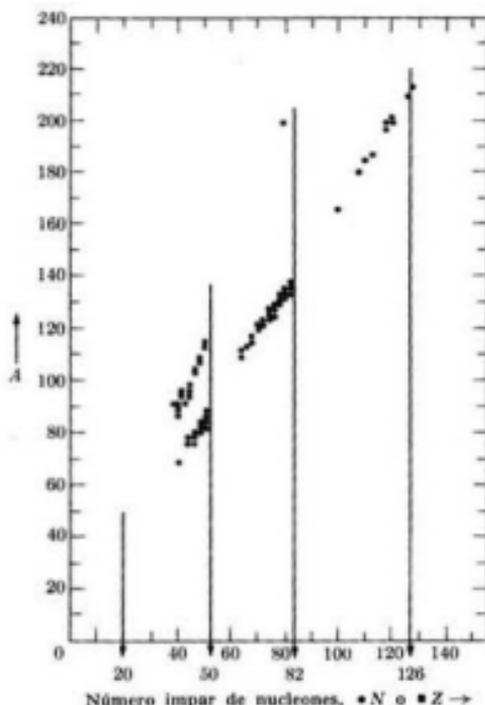


Fig. 7-25. Isómeros de vida larga con A impar. [Adaptada de: M. Goldhaber y R. D. Hill, *Revs. Mod. Phys.* **24**, 179 (1952).]

Los núcleos que están en estados excitados que tienen una vida razonablemente larga se denominan *isómeros*. Las transiciones con $\Delta I > 3$ se denominan *transiciones isoméricas*. La fig. 7-25 muestra la distribución de núcleos que tienen estados isoméricos. Aparecen en grupos denominados *islas de isomerismo* que yacen justo antes de los números mágicos conforme a las predicciones del modelo de capas. En realidad la explicación de estas islas de isomerismo es uno de los éxitos del modelo de capas.

Bibliografía

1. "The Nuclear Force", R. Marshak, *Sci. Am.*, marzo de 1960, pág. 98
2. "Nuclear Models", R. van Wageningen, *Am. J. Phys.* **28**, 425 (1960)
3. "Pauli and Nuclear Spin", S. Goudsmit, *Physics Today*, junio de 1961, pág. 18
4. "The Nucleus Today", D. Bromley, *The Physics Teacher* **2**, 260 y 320 (1964)

5. "Problem of Nuclear Structure", W. Weisskopf, *Physics Today*, julio de 1961, pág. 18
6. *Nuclear Forces*, D. Brink. Pergamon Press, New York, 1965
7. *Structure of Atomic Nuclei*, C. Cook. Van Nostrand, Momentum Books, New York, 1964
8. *Structure of Matter*, W. Finkelburg. Academic Press, New York, 1964, cap. 5, secs. 1.8
9. *Foundations of Modern Physical Science*, G. Holton y D. H. D. Roller. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1958, caps. 36, 37 y 38
10. *Principles of Modern Physics*, R. Leighton. McGraw-Hill, New York, 1959, caps. 13, 14, 16, 18 y 19
11. *Física nuclear*, I. Kaplan. Aguilar, Madrid, 1961
12. *Introducción al núcleo atómico*, J. Cuninghame. Ed. Alhambra, Madrid, 1966

Problemas

7.1 Examinar cuidadosamente la figura 7-1 (o la tabla de nucleidos que acompaña este libro) para verificar la aserción de que no existen en la naturaleza pares isobáricos adyacentes estables.

7.2 Hacer una lista de todos los grupos de más de 4 isótopos estables adyacentes. Por ejemplo, el titanio ($Z = 22$) tiene cinco isótopos estables adyacentes. Usar la fig. 7-1 o la tabla de nucleidos que viene con el texto.

7.3 Con la ayuda de la fig. 7-1 (o la tabla de nucleidos) investigar grupos isotónicos estables. Escribir el número neutrónico N para los grupos de más de cuatro isótonos estables. ¿Son estables algunos de estos isótonos adyacentes?

7.4 El boro común es una mezcla de los isótopos ^{10}B y ^{11}B . La masa atómica compuesta (o química) es de 10,811 uma. ¿Qué porcentaje de cada isótopo está presente en el boro natural (a) en número de átomos y (b) en masa?

7.5 Calcular el radio nuclear del ^{16}O , el ^{119}Sn y el ^{208}Pb .

7.6 Elijiendo el isótopo más abundante, calcular el radio nuclear de los nucleidos con Z igual a 10, 30, 50, 70 y 90. Calcular también el radio de la órbita electrónica interna empleando la ec. (3.11). Representar ambos radios en el mismo gráfico. Sacar conclusiones acerca de la

interacción de los electrones internos con el núcleo.

7.7 ¿Qué núcleos tienen un radio igual a la mitad del radio del ^{238}U ?

7.8 Estimar la energía cinética de un nucleón dentro de un núcleo usando la imagen cuántica de una partícula dentro de una caja de potencial de 10^{-15} m de ancho y considerando la longitud de onda λ de de Broglie del nucleón, la cual es del orden de $2\pi r$ donde r es 10^{-15} m.

7.9 La interacción entre el electrón y los momentos magnéticos nucleares da lugar al *desdoblamiento hiperfino* de los niveles de energía atómicos. La energía debida a esta interacción es proporcional a

$$(\mu_0/4\pi)\mu_N\mu_B\overline{(r^{-3})},$$

donde r es la distancia del electrón al núcleo. Demostrar que el desdoblamiento hiperfino es del orden de 10^{-4} eV en energía, dando lugar a una estructura hiperfina de las líneas espectrales que es del orden de 10^{-2} Å cuando las mismas están en el visible.

7.10 El desdoblamiento hiperfino de los niveles de energía atómicos, tratado en el problema anterior, también es proporcional a $\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$, donde \mathbf{I} es el espín nuclear y \mathbf{J} el momentum angular del electrón. Analizar el desdoblamiento hiperfino de los estados electrónicos $^2S_{1/2}$

${}^2P_{1/2}$ y ${}^2P_{3/2}$ del ${}^{23}\text{Na}$ ($l = \frac{1}{2}$). Determinar en cada caso el número de niveles y su espaciado relativo. Mostrar los resultados en un diagrama de niveles de energía.

7.11 El momento cuadrupolar eléctrico de una distribución elipsoidal de carga que tiene simetría axial es $Q = \frac{2}{5}Z(\alpha^2 - \beta^2)$, donde α se mide a lo largo del eje de simetría y β en dirección perpendicular. Se define el radio nuclear medio R mediante $R^3 = \alpha\beta^2$. (Esto garantiza que la esfera de radio R tiene el mismo volumen que el elipsoide.) Demostrar que si $\alpha = R + \Delta R$, es $\beta = R - \frac{1}{2}\Delta R$ y $Q = \frac{2}{5}ZR\Delta R$ hasta el primer orden de aproximación. Observar también que Q/ZR^3 , que está representada en la fig. 7-4, es proporcional a $\Delta R/R$. Determinar si este gráfico es más informativo que uno de los momentos cuadrupolares solos, en lo que respecta a la información sobre la deformación nuclear.

7.12 Usando los datos de la tabla 7.1 y los resultados del problema 7.11 estimar $\Delta R/R$ para el ${}^{177}\text{Lu}$ que es uno de los núcleos más deformados.

7.13 Estimar la energía de repulsión coulombiana de los dos protones del ${}^3\text{He}$ (suponiendo que están a una distancia de $1,7 \times 10^{-15}$ m). Comparar esta energía con la diferencia de energía de ligadura entre el ${}^3\text{H}$ y el ${}^3\text{He}$. ¿Es compatible este resultado con la hipótesis de que las fuerzas nucleares no dependen de la carga?

7.14 ¿Cuánta energía se necesita para sacar (a) un protón y (b) un neutrón del ${}^{16}\text{O}$ y del ${}^{17}\text{O}$? ¿Es el resultado una indicación de la existencia de fuerzas de apareamiento?

7.15 Utilizando las masas atómicas dadas en la tabla 7-1, calcular la energía total de ligadura y la energía de ligadura por nucleón en ${}^7\text{Li}$, ${}^{16}\text{O}$, ${}^{56}\text{Fe}$ y ${}^{238}\text{U}$.

7.16 La fórmula empírica de Weiszäcker, ec. (7.11), contiene cuatro términos. Representar cada término en función de A . En el cuarto término usar para Z y N los valores correspondientes al isóbaro más estable y elegir sólo algunos valores de A . Determinar la importancia relativa de cada término en las diferentes regiones de la tabla periódica.

7.17 Con la ayuda de la ec. (7.13) determinar el número atómico del nucleído estable para $A = 27, 64, 82, 125$ y 180 . Comparar estos valores con los datos de la fig. 7-1.

7.18 Empleando la fórmula de Weiszäcker calcular las masas atómicas de ${}^{12}\text{C}$, ${}^{17}\text{Al}$, ${}^{88}\text{Sr}$, ${}^{186}\text{Re}$ y ${}^{238}\text{U}$. Comparar con los valores que aparecen en la tabla 7-1 y juzgar la precisión de la fórmula.

7.19 Empleando la fórmula de Weiszäcker calcular la diferencia de masa entre los núcleos reflejados ${}^{20}\text{Na}$ y ${}^{20}\text{Mg}$. Comparar con el resultado que se obtiene usando los valores experimentales de las masas, que son 22,98977 y 22,99412 uma respectivamente.

7.20 (a) Calcular la energía de ligadura de: ${}^{16}\text{O}$, ${}^{18}\text{O}$, ${}^{14}\text{O}$, ${}^{17}\text{O}$, ${}^{18}\text{O}$ y ${}^{19}\text{O}$. (b) Hacer lo mismo para ${}^{14}\text{C}$, ${}^{15}\text{N}$, ${}^{16}\text{O}$, ${}^{17}\text{F}$ y ${}^{18}\text{Ne}$. (c) Con los resultados de (a) y de (b) explicar la variación de energía de ligadura al agregar un neutrón o un protón a un núcleo. Las masas de los núcleos que no aparecen en la tabla 7-1 son (en uma): ${}^{14}\text{C}$, 14,00324; ${}^{16}\text{O}$, 14,00860; ${}^{18}\text{O}$, 15,00307; ${}^{19}\text{O}$, 17,99916; ${}^{18}\text{O}$, 19,00358; ${}^{17}\text{F}$, 17,00209; ${}^{18}\text{Ne}$, 18,00571.

7.21 Se ha encontrado experimentalmente las siguientes diferencias de masa:

$$\begin{aligned} {}^3\text{H}_2 - {}^3\text{H} &= 1,5434 \times 10^{-3} \text{ uma}, \\ 3 {}^3\text{H} - \frac{1}{2} {}^{12}\text{C} &= 4,2300 \times 10^{-3} \text{ uma}, \\ {}^{12}\text{C} {}^1\text{H}_4 - {}^{16}\text{O} &= 3,6364 \times 10^{-3} \text{ uma}, \end{aligned}$$

Tomando como base ${}^{12}\text{C} = 12,000$ uma, calcular las masas atómicas de ${}^3\text{H}$, ${}^4\text{He}$ y ${}^{16}\text{O}$. Comparar con los valores experimentales.

7.22 Una aproximación empírica simple para el potencial nuclear es el potencial de Yukawa $E_p = -E_0 r_0 e^{-r/r_0}/r$, donde

$$E_0 = 50 \text{ MeV} \text{ y } r_0 = 1,5 \times 10^{-15} \text{ m}.$$

Representar el potencial de Yukawa para $r = 0,1r_0, 0,5r_0, r_0, 1,5r_0, 2r_0$ y $3r_0$, y comparar con la energía potencial eléctrica de dos protones a las mismas distancias.

7.23 Mostrar por qué los estados ${}^3\text{S}$, ${}^1\text{P}$, ${}^3\text{P}$ y ${}^3\text{D}$ del sistema neutrón-protón

son los únicos estados compatibles con un espín nuclear de uno.

7.24 Se puede demostrar que cuando se toman en cuenta todos los desfases, la amplitud $f(\theta)$ de dispersión de neutrones está dada por

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_l \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l e^{i\delta_l} \sin \delta_l Y_{l0}$$

donde θ es el ángulo de dispersión y los Y_{l0} son funciones propias del momento angular. Para energías no muy altas, sólo los dos primeros desfases, δ_0 y δ_1 , son necesarios para describir la dispersión de neutrones, siendo nulos, los desfases restantes. (a) Escribir $f(\theta)$ y la sección eficaz diferencial $\sigma(\theta)$ en esta aproximación. (b) Mostrar que la dispersión no es esféricamente simétrica. ¿Cómo se correlaciona la asimetría con los signos de los desfases? (c) Calcular por integración la sección eficaz total y verificar que coincide con los dos primeros términos de la ec. (7.22). [Sugerencia: Usar las expresiones de Y_{00} y de Y_{10} dadas en la tabla 3-1.]

7.25 Demostrar que en un experimento de dispersión elástica de protones sobre protones o de neutrones sobre protones, ninguna de las partículas se dispersa más de 90° en el sistema de referencia del laboratorio. (Suponer que las masas son iguales.) [Sugerencia: Usar las fórmulas no relativistas que relacionan el ángulo de dispersión en los sistemas de referencia C y L , dadas en el apéndice.]

7.26 ¿Qué ángulo en el sistema de referencia del laboratorio se dispersa una partícula α de 4 MeV cuando se aproxima a un núcleo de oro con un parámetro de impacto de $2,6 \times 10^{-12}$ m?

7.27 ¿Cuál es el parámetro de impacto de una partícula α de 4 MeV si se dispersa un ángulo de 15° en un núcleo de oro?

7.28 Hallar la distancia de máxima aproximación para protones de (a) 10 MeV y (b) de 80 MeV, que chocan frente con un núcleo de oro, y comparar con el radio nuclear. (c) ¿En cuál de los dos casos el protón "golpea" al núcleo? Hallar la energía cinética del protón cuando "golpea" al núcleo.

7.29 Una hojuela de aluminio dispersa 10^6 partículas α por segundo en una dirección dada. Si se reemplaza la hojuela de aluminio por una de oro del mismo espesor, ¿cuántas partículas α se dispersarán por segundo en la misma dirección?

7.30 El número de partículas α dispersada por una hojuela dada es 10^6 por segundo según un ángulo de dispersión de 10° . Calcular el número de partículas α dispersadas en cada intervalo de 10° hasta 180° . Hacer un gráfico de los resultados correspondientes de $\sigma(\theta)$.

7.31 Una haz de partículas α de 12,75 MeV se dispersa en una hojuela de aluminio. Se encuentra que el número de partículas dispersadas en una dirección dada comienza a desviarse a aproximadamente 54° del valor predicho por la dispersión coulombiana. Si se supone que las partículas α tienen un radio de 2×10^{-16} m, estimar el radio del núcleo de aluminio. [Sugerencia: Se puede demostrar que la distancia de máxima aproximación está dada por:

$$r = (zZe^2/4\pi\epsilon_0 mv^2) (1 + \operatorname{cosec} \frac{1}{2}\theta).]$$

7.32 ¿Para qué energía neutrónica vale la relación $k \times$ alcance de la fuerza nuclear = 0,5? ¿Se podría usar este resultado para estimar el límite superior de la energía para la cual sólo se necesita considerar la dispersión s de neutrones por protones?

7.33 Calcular la sección eficaz de dispersión nucleón-nucleón en el límite de bajas energías, $E \rightarrow 0$, para los potenciales triplete ($E_0 = 36,2$ MeV) y singlete ($E_0 = 17,8$ MeV). ¿Qué sección eficaz se mediría experimentalmente si los espines de las partículas estuvieran orientados al azar?

7.34 Calcular la sección eficaz de dispersión nucleón-nucleón en el estado triplete ($E_0 = 36,2$ MeV) para $E = 0,1, 0,5, 1$ y 5 MeV. ¿Puede usted concluir que a bajas energías la sección eficaz de dispersión nucleón-nucleón no es sensible a la energía?

7.35 (a) Usando el esquema de niveles del modelo de capas dado en la fig. 7-16, hallar la configuración nucleónica para ^2H , ^3H , ^3He , ^4He , ^7Li , ^{12}C , ^{13}C y ^{16}Cl .

(a) Predecir el espín nuclear en estos nucleidos. Comparar con los valores que aparecen en la tabla 7-1.

7.36 Calcular los momentos dipolares magnéticos de los núcleos del problema anterior usando el método del ejemplo 7.6 y comparar con los valores experimentales dados en la tabla 7-1.

7.37 El momento de inercia de un núcleo de masa M y radio medio R , considerado como una esfera sólida, es $\mathcal{I} = \frac{2}{5}MR^2$. Con un número másico A igual a 50, 100 y 150, estimar la energía (en MeV) de un rayo γ emitido en una transición de un nivel rotacional de energía con $l = 2$ a otro con $l = 0$. Comparar con la energía de los rayos γ emitidos por los núcleos par-par en esas regiones. ¿Cuál es su conclusión?

7.38 Estimar el momento de inercia del ^{180}Hf a partir de los niveles rotacionales de energía mostrados en la fig. 7-20. El momento de inercia respecto al eje de

simetría de un elipsoide de revolución es $\mathcal{I} = \frac{2}{5}Mb^2$, donde b es la longitud de los otros semiejes. Estimar la deformación $\Delta R/R$ del ^{180}Hf y comparar con el valor obtenido del momento cuadrupolar eléctrico. [Sugerencia: Recordar del problema 7.11 que $b = R - \frac{1}{2}\Delta R$.]

7.39 Refiriéndose a la fig. 7-22, determinar la energía y el orden multipolar de las transiciones γ mostradas para cada uno de los tres núcleos.

7.40 Refiriéndose a la fig. 7-22 (a) y (b) y suponiendo que cada uno de los niveles mostrados se debe a la transición de una sola partícula, escribir la configuración del estado fundamental y de cada uno de los estados excitados, ayudándose con el esquema de niveles del modelo de capas dado en la fig. 7-16.

7.41 Refiriéndose a la fig. 7-22 (c), determinar si se puede atribuir el esquema de niveles a excitaciones colectivas rotacionales.

PROCESOS NUCLEARES

- 8.1 *Introducción*
- 8.2 *Desintegración radioactiva*
 - 8.3 *Desintegración alfa*
 - 8.4 *Desintegración beta*
 - 8.5 *Reacciones nucleares*
 - 8.6 *Fisión nuclear*
 - 8.7 *Fusión nuclear*
- 8.8 *Origen de los elementos*

8.1 Introducción

En el capítulo anterior hemos analizado las propiedades básicas de los núcleos, considerados como agregados estables de nucleones y hemos propuesto un modelo que explica tales propiedades de un modo más o menos satisfactorio. Otra fuente de información acerca de la estructura nuclear es el análisis de procesos, tales como desintegraciones y reacciones nucleares, en los que se produce un reordenamiento de la energía o de la configuración de los nucleones. En este capítulo analizaremos algunos procesos nucleares. Muchos de ellos ocurren en forma natural, pero otros son producidos artificialmente en el laboratorio usando diferentes tipos de aceleradores o de reactores nucleares. La discusión teórica y experimental de los procesos nucleares es todavía un capítulo inconcluso de la física contemporánea, en el que se está haciendo mucha investigación.

8.2 Desintegración radioactiva

Recordamos al estudiante que al discutir la fig. 7-1 indicamos que muchos núcleos tienen una combinación de protones y neutrones que no conducen a una configuración estable. Estos núcleos son por consiguiente inestables o radioactivos. Los núcleos inestables tienden a aproximarse a una configuración estable liberando ciertas partículas. Estas partículas, observadas por primera vez a fines del siglo pasado por J. Becquerel, Pierre y Marie Curie y otros, fueron denominadas partículas α y β .

Las partículas alfa son núcleos de helio y se componen de dos protones y dos neutrones como se puede verificar midiendo su carga y su masa. De este modo cuando un núcleo emite una partícula alfa su número atómico Z disminuye en dos unidades y su número másico A en cuatro. Por consiguiente, el nuevo núcleo corresponde a un elemento químico diferente. Por ejemplo, cuando el núcleo radioactivo ${}_{92}^{238}\text{U}$ emite una partícula α , el núcleo residual es ${}_{90}^{234}\text{Th}$.

Las partículas β son electrones de carga $-e$. En consecuencia, cuando un núcleo emite una partícula β su número atómico aumenta en una unidad, pero el número másico no se altera. Por ejemplo, cuando el núcleo radioactivo ${}_{90}^{234}\text{Th}$ emite una partícula β , el núcleo residual es ${}_{91}^{234}\text{Pa}$. Algunos núcleos, en lugar de emitir electrones, liberan positrones con una carga $+e$; entonces el núcleo residual, después de la emisión del positrón, tiene un número atómico menor en una unidad. Por ejemplo, cuando el núcleo ${}_{7}^{12}\text{N}$ emite un positrón, el núcleo residual es ${}_{6}^{12}\text{C}$. Los dos tipos de desintegración β se designan β^- y β^+ , respectivamente. El núcleo residual queda algunas veces en un estado excitado y en la transición a su estado fundamental emite rayos gamma, como se explicó en la sección 7.10.

Muchos de los isótopos de elementos con $Z > 81$ (ó $A > 206$) son naturalmente radioactivos. Existen en la naturaleza otros pocos núcleos livianos tales como el ${}^{14}\text{C}$ y el ${}^{40}\text{K}$, también radioactivos. Muchos más núcleos radioactivos han sido producidos en el laboratorio usando reactores nucleares y aceleradores de partículas. La fig. 8-1 muestra una de las tres cadenas naturales radioactivas, la llamada *serie del uranio*, y la tabla 8-1 da la información pertinente. En esta

TABLA 8-1 Serie del uranio

Especie radioactiva	Nucleido	Tipo de desintegración	Vida media	Constante de desintegración, s^{-1}	Energía de la partícula, MeV
Uranio I (UI)	$^{238}_{92}\text{U}$	α	$4,51 \times 10^8$ y	$4,88 \times 10^{-18}$	4,19
Uranio X ₁ (UX ₁)	$^{234}_{90}\text{Th}$	β	24,1 d	$3,33 \times 10^{-7}$	0,19
Uranio X ₂ (UX ₂)	$^{234}_{91}\text{Pa}$	β	1,18 m	$9,77 \times 10^{-9}$	2,31
Uranio Z (UZ)	$^{234}_{91}\text{Pa}$	β	6,66 h	$2,88 \times 10^{-9}$	0,5
Uranio II (UII)	$^{234}_{92}\text{U}$	α	$2,48 \times 10^4$ y	$8,80 \times 10^{-18}$	4,768
Torio (Th)	$^{230}_{90}\text{Th}$	α	$8,0 \times 10^4$ y	$2,75 \times 10^{-18}$	4,68
Radio (Ra)	$^{226}_{88}\text{Ra}$	α	1620 y	$1,36 \times 10^{-11}$	4,777
Radón (Rn)	$^{222}_{86}\text{Rn}$	α	3,82 d	$2,10 \times 10^{-4}$	5,486
Radio A (RaA)	$^{218}_{84}\text{Po}$	α, β	3,05 m	$3,78 \times 10^{-9}$	α : 5,998 β :?
Radio B (RaB)	$^{214}_{82}\text{Pb}$	β	26,8 m	$4,31 \times 10^{-4}$	0,7
Astatine 218 (^{218}At)	$^{218}_{85}\text{At}$	α	1,3 s	0,4	6,70
Radio C (RaC)	$^{214}_{83}\text{Bi}$	α, β	19,7 m	$5,86 \times 10^{-4}$	α : 5,51 β : 3,17
Radio C' (RaC')	$^{214}_{84}\text{Po}$	α	$1,64 \times 10^{-4}$ s	$4,23 \times 10^9$	7,683
Radio C'' (RaC'')	$^{210}_{81}\text{Tl}$	β	1,32 m	$8,75 \times 10^{-4}$	1,96
Radio D (RaD)	$^{210}_{82}\text{Pb}$	β	21 y	$1,13 \times 10^{-9}$	0,0185
Radio E (RaE)	$^{210}_{83}\text{Bi}$	β	5,0 d	$1,60 \times 10^{-6}$	1,155
Radio F (RaF)	$^{210}_{84}\text{Po}$	α	138,4 d	$5,80 \times 10^{-8}$	5,300
Talio 206 (^{206}Tl)	$^{206}_{81}\text{Tl}$	β	4,2 m	$2,75 \times 10^{-9}$	1,51
Radio G (RaG)	$^{206}_{82}\text{Pb}$	Estable			

serie el número másico está dado por $4n + 2$, donde n es un entero. Las otras dos cadenas radioactivas naturales son la *serie del actinio* y la *serie del torio*, compuestas respectivamente de núcleos del tipo $4n + 3$ y $4n$. Los nucleidos pesados en estas dos series son $^{235}_{92}\text{U}$ y $^{232}_{90}\text{Th}$. Se sugiere al estudiante que haga un gráfico de estas dos series, similar al de la fig. 8-1, usando la carta de los nucleidos que se suministra con el texto.

En las dos secciones que siguen presentaremos un análisis más detallado de las desintegraciones α y β . Por ahora discutiremos ciertas características comunes a ambos procesos radioactivos. Se ha observado que todos los procesos radioactivos siguen una ley exponencial. Por lo tanto, si N_0 es el número inicial de núcleos inestables, el número de núcleos que quedan después de un tiempo t está dado por

$$N = N_0 e^{-\lambda t} \quad (8.1)$$

donde λ es una constante característica del nucleido, llamada *constante de desintegración*. Se expresa en s^{-1} (o en la inversa de cualquier otra unidad de tiempo). La ec. (8.1) está representada en la fig. 8-2. Para cada nucleido radioactivo hay un intervalo de tiempo T fijo, llamado *vida media*, durante el cual el número

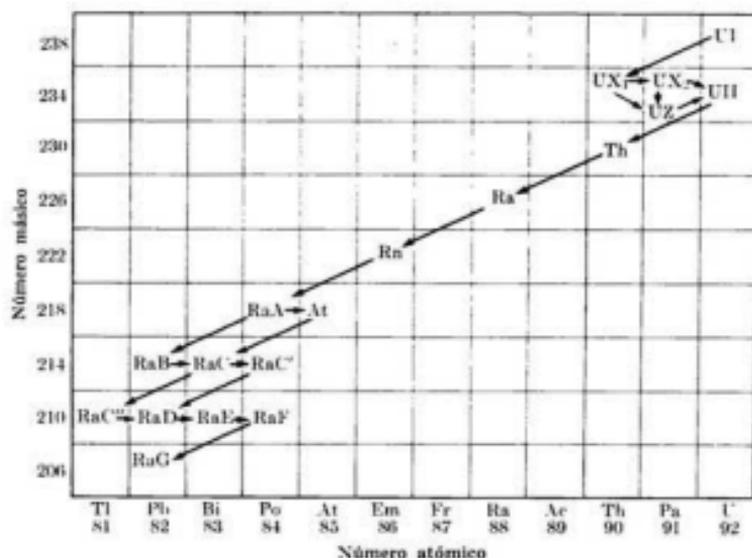


Fig. 8-1. Radioactividad natural del uranio o serie $4n + 2$.

de núcleos que había al comienzo del intervalo se reduce a la mitad al término del mismo. Así, si tenemos inicialmente N_0 núcleos (o átomos), después del tiempo T sólo quedan $N_0/2$, después de $2T$, $N_0/4$, y así sucesivamente. Para hallar este tiempo T , hagamos $N = \frac{1}{2}N_0$ y $t = T$ en la ec. (8.1). Entonces $\frac{1}{2}N_0 = N_0 e^{-\lambda T}$ o $e^{\lambda T} = 2$. Tomando logaritmos, tenemos $\lambda T = \ln 2 = 0,693$ o sea

$$T = 0,693/\lambda, \quad (8.2)$$

que relaciona T con λ . Las vidas medias determinadas van desde un gran número de años — tal como la vida media de la desintegración α del ^{209}Bi , que es de más o menos 2×10^{18} años, y la de la desintegración β^- del ^{135}In , que es de unos 6×10^{14} años — hasta fracciones de segundo (el ^8Be tiene una vida media de desintegración α del orden de 10^{-16} s).

Por medio de la ec. (8.1) podemos encontrar la rapidez con la cual los núcleos se desintegran:

$$dN/dt = -\lambda N_0 e^{-\lambda t} = -\lambda N. \quad (8.3)$$

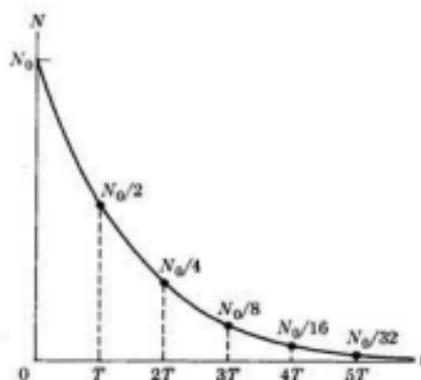


Fig. 8-2. Desintegración radioactiva en función del tiempo.

Esto indica que la tasa de desintegración dN/dt es proporcional al número de núcleos presentes. Por consiguiente, la tasa dN/dt disminuye en la misma proporción y con la misma vida media que el número N de núcleos. El valor absoluto $|dN/dt|$ de la tasa de desintegración se llama *actividad de la sustancia*.

Usualmente las tasas de desintegración se expresan en *curies*, abreviado Ci, en honor de Pierre y Marie Curie, descubridores del polonio y del radio. El curie se define como la actividad de una sustancia en la cual se desintegran $3,700 \times 10^{10}$ núcleos por segundo.* El milicurie (1 mCi = 10^{-3} Ci) y el microcurie (1 μ Ci = 10^{-6} Ci) son submúltiplos de esta unidad.

Las ecuaciones (8.1) y (8.3) son leyes estadísticas válidas solamente cuando el número de núcleos es muy grande y pueden ser interpretadas del siguiente modo. Hay una *probabilidad de desintegración por unidad de tiempo* λ de que un núcleo inestable se desintegre según un proceso específico. La probabilidad de que un núcleo se desintegre en el intervalo de tiempo dt es λdt . Si hay N núcleos presentes (siendo N muy grande), podemos esperar que un número de núcleos igual a $(\lambda dt)N$ se desintegre en el tiempo dt . Por lo tanto podemos escribir

$$dN = -(\lambda dt)N \quad \text{ó} \quad dN/dt = -\lambda N,$$

que es la ec. (8.3). El signo menos aparece porque N disminuye con el tiempo a consecuencia de la desintegración. El cálculo de la probabilidad de desintegración por unidad de tiempo para cada proceso de este tipo es un problema importante para el que debemos usar técnicas refinadas de la mecánica cuántica. Notar que según esta discusión no podemos hablar de la vida media de un núcleo solo o predecir con certeza cuándo un núcleo dado se desintegrará; repetimos que las ecs. (8.1) y (8.3) son correctas sólo en sentido estadístico.

EJEMPLO 8.1. Calcular la masa de 1,00 Ci de ^{14}C , cuya vida media es 5570 años.

Solución: Como $T = 5570$ años = $(5,570 \times 10^3) \times (2,156 \times 10^7 \text{ s/año}) = 1,758 \times 10^{11}$ s, la constante de desintegración es $\lambda = 0,693/T = 3,94 \times 10^{-12} \text{ s}^{-1}$. Además

$$|dN/dt| = 1 \text{ Ci} = 3,70 \times 10^7 \text{ s}^{-1}.$$

Por consiguiente, usando la ec. (8.3) con valores absolutos, encontramos que

$$N = \frac{1}{\lambda} \left| \frac{dN}{dt} \right| = 9,38 \times 10^{18} \text{ núcleos de } ^{14}\text{C},$$

que es también el número de átomos de carbono presentes. La masa atómica del ^{14}C es 14,0077 u. Luego, la masa del número anterior de átomos de carbono es

$$M = (14,0077 \times 1,6604 \times 10^{-27} \text{ kg átomo}^{-1}) \times (9,38 \times 10^{18} \text{ átomos}) \\ = 2,18 \times 10^{-7} \text{ kg}.$$

EJEMPLO 8.2. Un método de producir un nucleido radioactivo es colocar una muestra de una sustancia dada en el interior de un reactor nuclear. Los nucleidos radioactivos se producen como consecuencia de la captura de un neutrón por los núcleos de la sustancia. Por ejemplo, cuando bombardeamos ^{59}Co con neutrones,

* Esta tasa de desintegración es aproximadamente igual a la actividad de 1 g de Ra.

obtenemos ^{60}Co que es radioactivo β con una vida media de 5,27 años. Otro método para obtener nucleidos radioactivos es bombardear la sustancia con partículas cargadas, tales como protones o deuterones, usando aceleradores para suministrar energía a los proyectiles. En ambos casos el nuevo nucleido se produce a razón de g núcleos por segundo. Calcular el número de núcleos del nucleido radioactivo producido en función del tiempo.

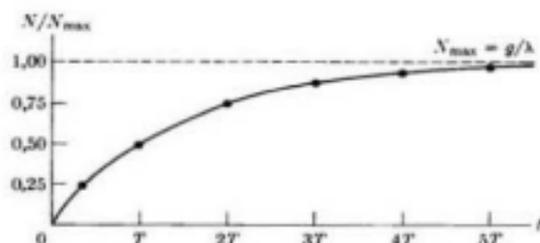


Fig. 8-3. Producción de un nucleido radioactivo en función del tiempo.

Solución: El nucleido radioactivo se fabrica a razón de g núcleos por segundo, pero al mismo tiempo, de acuerdo a la ec. (8.3), el nucleido se desintegrará a razón de λN núcleos por segundo, donde N es el número de núcleos presente en ese instante. Por lo tanto el incremento neto de núcleos por segundo* es

$$\frac{dN}{dt} = g - \lambda N.$$

Separando variables e integrando, tenemos

$$\int_{N_0}^N \frac{dN}{N - g/\lambda} = -\lambda \int_0^t dt \quad \text{ó} \quad \log \frac{N - g/\lambda}{N_0 - g/\lambda} = -\lambda t.$$

Suponiendo que el número de núcleos de la sustancia era inicialmente cero (esto es, $N_0 = 0$), tenemos a un tiempo t más tarde,

$$N = \frac{g}{\lambda} (1 - e^{-\lambda t}).$$

El número máximo de núcleos radioactivos que se puede producir en estas condiciones es $N_{\max} = g/\lambda$. En la fig. 8-3 se ilustra la variación de N con t . Observar que al instante $t = T$, tenemos $0,50 g/\lambda$ átomos y a $t = 2T$, $0,75g/\lambda$ átomos.

EJEMPLO 8.3. Una sustancia A se transforma por desintegración en otra sustancia B , también radioactiva. Si λ_A y λ_B son las respectivas constantes de desintegración, hallar la variación de B en función del tiempo. Suponer que la cantidad inicial de B es cero.

Solución: Según la ec. (8.3), la sustancia A se desintegra con la rapidez

$$dN_A/dt = -\lambda_A N_A,$$

* Note el estudiante que esta ecuación es matemáticamente idéntica a la que se obtiene para la caída libre de un cuerpo en un medio viscoso o para el establecimiento de una corriente eléctrica en un circuito inductivo.

de modo que $N_A = N_{A0}e^{-\lambda_A t}$. Por cada núcleo de A que se desintegra, se forma uno de B . Luego B se forma a razón de $\lambda_A N_A$ núcleos por segundo. Al mismo tiempo se desintegra a razón de $\lambda_B N_B$ núcleos por segundo. Por lo tanto, el incremento neto de núcleos por unidad de tiempo es

$$\frac{dN_B}{dt} = \lambda_A N_A - \lambda_B N_B \quad \text{ó} \quad \frac{dN_B}{dt} = \lambda_A N_{A0} e^{-\lambda_A t} - \lambda_B N_B.$$

La solución de esta ecuación que satisface la condición $N_B = 0$ para $t = 0$ es, como el estudiante puede verificar,

$$N_B = \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A} N_{A0} (e^{-\lambda_A t} - e^{-\lambda_B t}).$$

Si la sustancia B se desintegra en una sustancia estable C , el número de núcleos de C aumenta uniformemente hasta que, después de un tiempo muy largo comparado

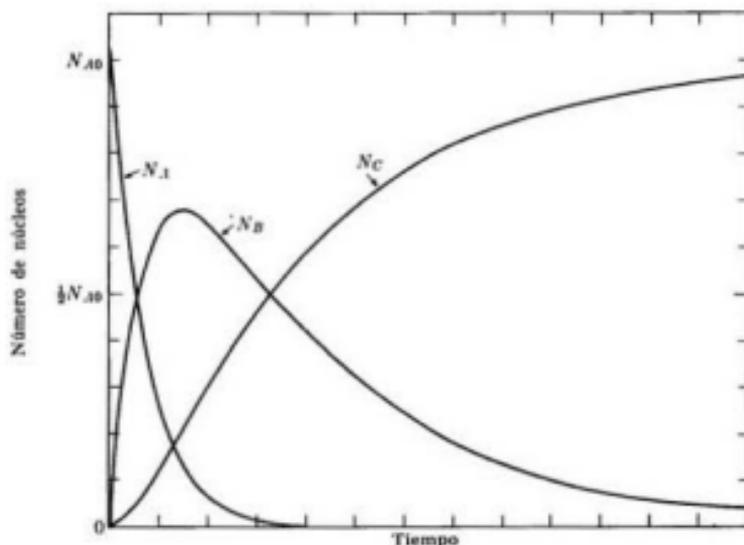


Fig. 8-4. Serie radioactiva con tres miembros. Solamente el originario, A ($T \approx 1$ h) está presente inicialmente. El intermedio B tiene una vida media de 5 h y el tercer miembro C es estable.

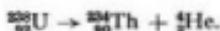
con las vidas medias de A y de B , el número de núcleos de C es igual a N_{A0} . En la fig. 8-4 se ilustra la variación de N_A , N_B y N_C con el tiempo. Al empezar observamos que B aumenta porque se produce más rápidamente de lo que se desintegra. Pero después de un cierto tiempo la situación se invierte porque la actividad de la sustancia originaria ha disminuido. Estos resultados se pueden extender a cadenas radioactivas más complicadas $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow \dots$, tales como las series radioactivas naturales. Un estudio de estas cadenas es útil, por ejemplo, cuando deseamos determinar la edad de una roca que contiene sustancias radioactivas hallando la proporción de cada sustancia en una muestra de la roca.

8.3 Desintegración alfa

Como hemos visto en la sección anterior, la desintegración alfa consiste en la emisión de una partícula α (núcleo de helio ${}^4_2\text{He}$), compuesta de dos protones y dos neutrones. El núcleo residual tiene un número atómico dos unidades menor y un número másico cuatro unidades menor que el núcleo originario. Luego, llamando X e Y a los núcleos originario y residual respectivamente, podemos escribir el proceso de desintegración α en la forma



Por ejemplo, ${}^{238}_{92}\text{U}$ es un emisor de partículas α y se desintegra según el esquema



La mayoría de los emisores de partículas α son núcleos pesados, correspondientes a los nucleidos que se encuentran al final de la tabla periódica. En efecto, se puede probar a partir de la expresión de la energía de ligadura nuclear, ec. (7.10), que la mayoría de los núcleos con $A > 150$ son emisores de partículas α . Empero, la mayoría de los núcleos emisores α tienen $A > 200$. Se supone que con pocas excepciones, las vidas medias de los núcleos livianos son tan grandes que este tipo de desintegración es prácticamente inobservable.

Una partícula α es un núcleo doblemente mágico compuesto de dos protones y dos neutrones, todos en una capa $s_{1/2}$, con un espín total igual a cero y paridad par. Las partículas α tienen entonces una estabilidad extraordinaria, y, por lo tanto, se comportan en muchos casos como una unidad similar a los protones y neutrones. El estudiante recordará que Rutherford usó partículas α como proyectiles para explorar el interior del átomo y establecer el modelo nuclear.

No debemos pensar, sin embargo, que las partículas α existen como tales en el interior del núcleo. Se supone que hay ciertas correlaciones en el movimiento de los nucleones que ocasionalmente hacen que algunos de ellos se agrupen en una configuración como la de la partícula alfa, la que por un corto tiempo actúa como una unidad dinámica. Cuando tal unidad está cerca de la superficie del núcleo, hay una cierta probabilidad de que el grupo de nucleones escape como partícula α .

En la fig. 8.5 se indica la energía potencial de interacción de una partícula alfa con el resto del núcleo, que es muy similar a la de un protón con el resto del núcleo (recordar la fig. 7-1). La energía de las partículas α (alrededor de 4 a 9 MeV) es menor que la altura de la barrera coulombiana en la superficie del núcleo (cerca de 40 MeV para la mayoría de los emisores α) y la partícula alfa sólo puede escapar penetrando la barrera de potencial (sección 2.8). Podemos calcular la probabilidad de desintegración por unidad de tiempo, λ , en función de la probabilidad P de penetrar la barrera. La cantidad P se calcula usando los métodos de la mecánica cuántica. Los resultados concuerdan muy bien con los valores experimentales de λ .

En la fig. 8-5 vemos que a mayor energía cinética E_{kin} de las partículas α , menor es la altura y el ancho de la barrera y, en consecuencia, mayor es la pro-

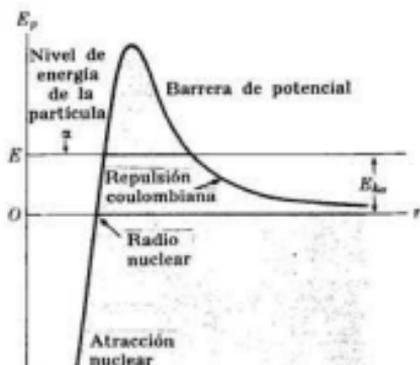


Fig. 8-5. Energía potencial de una partícula α y un núcleo.

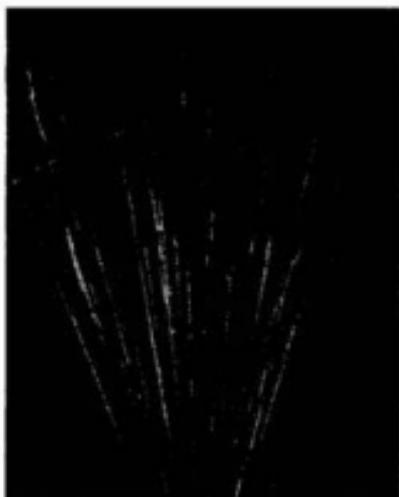


Fig. 8-6. Trazas de partículas α en una cámara de niebla. La traza desviada parece deberse a la reacción $^{14}\text{N}(\alpha, p)^{13}\text{O}$ que ha tenido lugar con un átomo de hidrógeno de la cámara. Dos grupos de partículas α , cada uno con un alcance característico, son fácilmente reconocibles en esta fotografía.

habilidad P de penetrarla. De este modo debemos esperar que la constante de desintegración λ aumente con E_{pot} , lo cual se puede verificar por inspección de la tabla 8-1. Un cálculo detallado muestra que la probabilidad de penetración P es muy sensible a la altura y ancho de la barrera, y, por consiguiente, a E_{pot} . Esto explica por qué (como se vio en la tabla 8-1) una variación de E_{pot} en un factor de alrededor de dos entre 4,20 MeV (que corresponde al ^{238}U) y 7,68 MeV (que corresponde al ^{210}Po), resulte en un cambio de λ que va desde $4,88 \times 10^{-18} \text{ s}^{-1}$ hasta $4,23 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, o sea en un factor de unos 10^{27} .

Como las partículas α están cargadas, ionizan los átomos de la sustancia por la cual se propagan. Esta ionización constituye uno de los métodos para detectar partículas alfa, usando dispositivos que o bien miden la cantidad de ionización (tal como la cámara de ionización) o bien la hacen visible (como las cámaras de niebla). La fig. 8-6 muestra la fotografía de las trazas de partículas α producidas en una cámara de niebla por una muestra radioactiva. A consecuencia de la ionización las partículas pierden energía hasta hacerse lo suficientemente lentas como para capturar dos electrones y convertirse en átomos de helio natural. Rutherford demostró en 1919 que las partículas α eran núcleos de helio: recogió (en un tubo que estaba al vacío) las partículas α emitidas por una sustancia y al hacer pasar una descarga eléctrica a través del tubo observó el espectro del helio.

La profundidad de penetración de las partículas α depende de su energía y de la sustancia a través de la cual se mueven. Esta penetración es en el aire sólo de unos pocos centímetros a temperatura y presión normales. Por ejemplo, las

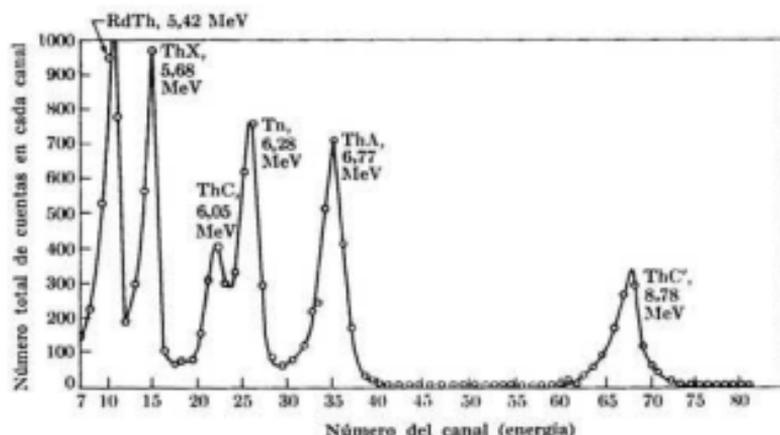


Fig. 8-7. Espectro de energía de la partícula α de una muestra de radio-torio (^{228}Th) y sus descendientes. [Tomado de la *National Nuclear Energy Series*, Vol. 14A, *The Actinide Elements*, G. Seaborg y J. Katz, editores (McGraw-Hill, Nueva York, 1954) capítulo 16. Autorizado por la Comisión de Energía Atómica de los Estados Unidos.]

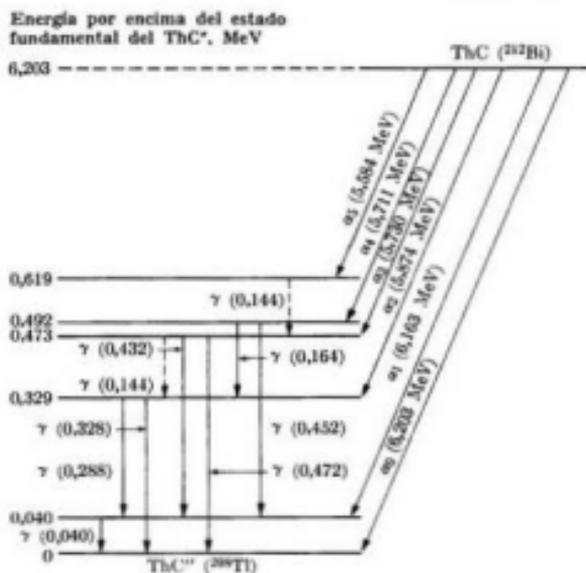
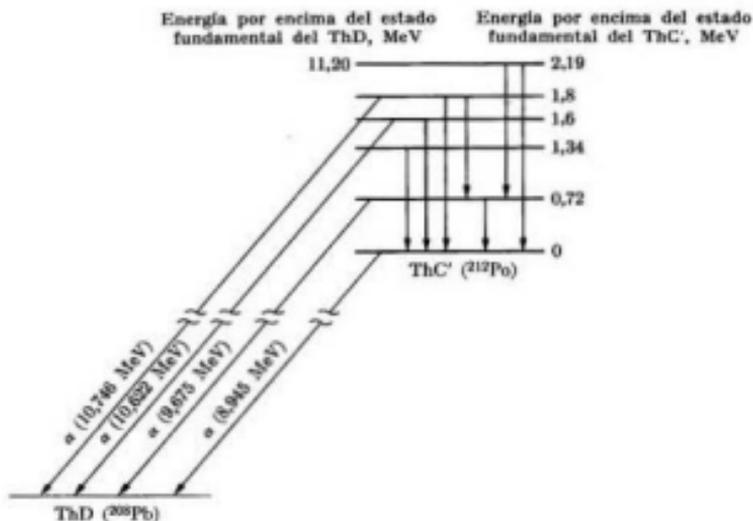
partículas α provenientes del ^{210}Po (5,3 MeV) y del ^{214}Po (7,7 MeV) tienen en el aire alcances de aproximadamente 3,8 cm y 7,0 cm, respectivamente. Empero estas partículas son fácilmente absorbidas por una hoja de papel o una lámina muy delgada de aluminio. En la fig. 8-6 observamos que las partículas α que producen las trazas forman dos grupos, cada uno con un alcance característico.

El hecho de que las partículas α emitidas por un nucleido dado tengan un alcance bien definido es una indicación de que también tienen una energía bien definida. La fig. 8-7 muestra el espectro de energía de las partículas α emitidas por diversos nucleidos. La energía, en unidades arbitrarias, corresponde al número de canal de un dispositivo para analizar energías. Uno puede ver claramente que las partículas α de cada nucleido tienen energía bien definida. Este hecho confirma que la desintegración α es un problema de dos cuerpos, como quedó indicado en la ec. (8.4); la desintegración α semeja entonces a la explosión de una granada en dos fragmentos. Suponemos que en el proceso de desintegración α , la energía y el momentum se conservan. Si Q es la energía liberada en la desintegración del núcleo originario X , supuesto en reposo en el laboratorio las energías cinéticas de la partícula α y del núcleo residual Y cuando están muy lejos uno de otro [ver apéndice II, ec. (A.27)] son

$$E_{k\alpha} = \frac{m_Y}{m_\alpha + m_Y} Q, \quad E_{kY} = \frac{m_\alpha}{m_\alpha + m_Y} Q. \quad (8.5)$$

El valor de Q se obtiene del cambio de masa en el proceso; esto es:

$$Q = (m_X - m_Y - m_\alpha)c^2, \quad (8.6)$$

Fig. 8-8. Esquema de desintegración α del ^{212}Bi en ^{208}Tl .Fig. 8-9. Esquema de desintegración α del ^{212}Po en ^{208}Pb .

ya que $m_X c^2$ es la energía interna del núcleo originario y $m_Y c^2$ y $m_\alpha c^2$ son las energías internas de los dos productos [ver apéndice II, ec. (A.22)]. Desde luego, para que ocurra emisión de una partícula α , es necesario que $Q > 0$. Si las masas se expresan en uma y Q en MeV, entonces la ec. (8.6) se convierte en

$$Q = 931,48(m_X - m_Y - m_\alpha). \quad (8.7)$$

En esta ecuación las masas pueden corresponder a los núcleos o a los átomos, ya que la masa de los electrones se cancela cuando se usan las masas atómicas.

Estrictamente hablando, las partículas α provenientes de un nucleido dado no tienen todas la misma energía, sino que presentan una cierta estructura fina. Por ejemplo, las partículas α emitidas por el ^{238}U tienen energías de 4,18 MeV y 4,13 MeV. Esto se explica porque, aunque el núcleo originario puede estar en su estado fundamental, el núcleo residual puede formarse en su estado fundamental o en un estado estacionario excitado. Esta situación se ilustra en la fig. 8-8, la que muestra el esquema de desintegración del ^{238}Bi (ThC); las seis transiciones α (así como los subsiguientes rayos γ emitidos) se indican por medio de flechas. En otros casos, ocurre la situación inversa: el núcleo originario puede estar en el estado fundamental o en algún estado excitado y el núcleo residual en el estado fundamental, como se muestra en la fig. 8-9 para el esquema de desintegración del ^{232}Po (ThC'). También se muestra algunas transiciones γ .

EJEMPLO 8.4. Calcular la energía cinética de las partículas α emitidas por el ^{238}U .

Solución: El proceso de desintegración es $^{238}\text{U} \rightarrow ^{234}\text{Th} + ^4\text{He}$. Las masas involucradas son $m_X = m(^{238}\text{U}) = 232,1095$ uma, $m_Y = m(^{234}\text{Th}) = 228,0998$ uma y $m_\alpha = 4,0039$ uma. Aplicando la ec. (8.7), obtenemos $Q = 5,40$ MeV. Un Q positivo significa que el proceso es exógeno y puede ocurrir espontáneamente. Usando la ec. (8.5), calculamos las energías cinéticas $E_{\alpha\text{Th}} = 0,10$ MeV y $E_{\alpha\alpha} = 5,30$ MeV. Obtenemos este valor de $E_{\alpha\alpha}$ suponiendo que el ^{234}Th está en su estado fundamental. Pero si el ^{234}Th ha quedado en un estado excitado entonces el valor de $E_{\alpha\alpha}$ es menor. El valor experimental para las partículas α más energéticas del ^{238}U es $E_{\alpha\alpha} = 5,32$ MeV, luego nuestra interpretación teórica parece ser correcta.

EJEMPLO 8.5. Discutir la estabilidad del ^{238}U respecto a la emisión de otras clases de partículas.

Solución: Podemos pensar que además de la desintegración α algunos núcleos presenten desintegración protón, neutrón, deuterón, o de algún otro tipo. Tales desintegraciones no han sido observadas porque los valores de Q para estos procesos son negativos. Por lo tanto, estas desintegraciones no pueden ocurrir a menos que se suministre energía y se lleve el núcleo originario a un estado excitado, lo que puede suceder en ciertas reacciones nucleares. Como ilustración, podemos calcular los valores de Q para la emisión de varias clases de partículas por el ^{238}U , usando la ec. (8.7) con m_α y m_Y reemplazadas por las masas correspondientes de la partícula emitida y del núcleo residual. Los resultados aparecen en la tabla 8-2. Todos los Q son negativos, de modo que el ^{238}U es estable y no se desintegra en tales productos. La razón de la emisión α por el ^{238}U está en que la masa de la partícula α es relativamente pequeña debido a su energía de ligadura relativamente grande.

TABLA 8-2 Valores de Q para la emisión de diferentes partículas nucleares por el ^{231}U

Partícula	Masa	Núcleo residual	Masa	Q , MeV
n	1,0090	^{231}U	231,1082	— 7,16
p(^1H)	1,0081	^{231}Pa	231,1078	— 6,05
d(^2H)	2,0147	^{229}Pa	230,1060	— 10,4
t(^3H)	3,0170	^{228}Pa	229,1033	— 10,1

8.4 Desintegración beta

En la fig. 7-1 los núcleos estables se designaron por medio de cuadrados negros. En dicha figura los núcleos que yacen por encima de la región de estabilidad emiten electrones (carga $-e$), proceso denominado *desintegración β^-* . Experimentalmente resulta que el núcleo residual tiene el mismo número másico y su número atómico es una unidad mayor que el del núcleo originario. Esto es, en la desintegración β^- aparece un neutrón reemplazado por un protón por lo que los núcleos originario y residual son isóbaros. El proceso se puede expresar entonces:



Observar que la carga total se conserva, ya que la carga en el primer miembro de la ec. (8.8) es Ze y en el segundo es $(Z+1)e - e = Ze$. Además, el número total de nucleones se conserva, ya que A permanece constante. Por ejemplo, el ^{14}C es un emisor β^- y se transforma según el esquema



Análogamente, en la fig. 7-1, aquellos núcleos que yacen por debajo de la región de estabilidad experimentan desintegración β^+ , proceso que consiste en la emisión de *positrones* (carga $+e$). Los positrones son partículas que tienen la misma masa y espín de los electrones, pero su carga es positiva en lugar de negativa. La existencia de los positrones fue predicha en 1927 por P. A. M. Dirac basándose en consideraciones teóricas (como resultado de ciertas exigencias de la teoría de la relatividad que no podemos tratar aquí) y C. Anderson los observó por primera vez en los rayos cósmicos en 1932. Se ha verificado que en la desintegración β^+ el número atómico del núcleo residual es menor en una unidad que el núcleo originario (también en conformidad con la ley de conservación de la carga), pero que su número másico es el mismo que el del núcleo originario (de acuerdo con la conservación de los nucleones). De este modo en la desintegración β^+ aparece un protón reemplazado por un neutrón. Por consiguiente, el proceso se puede expresar por



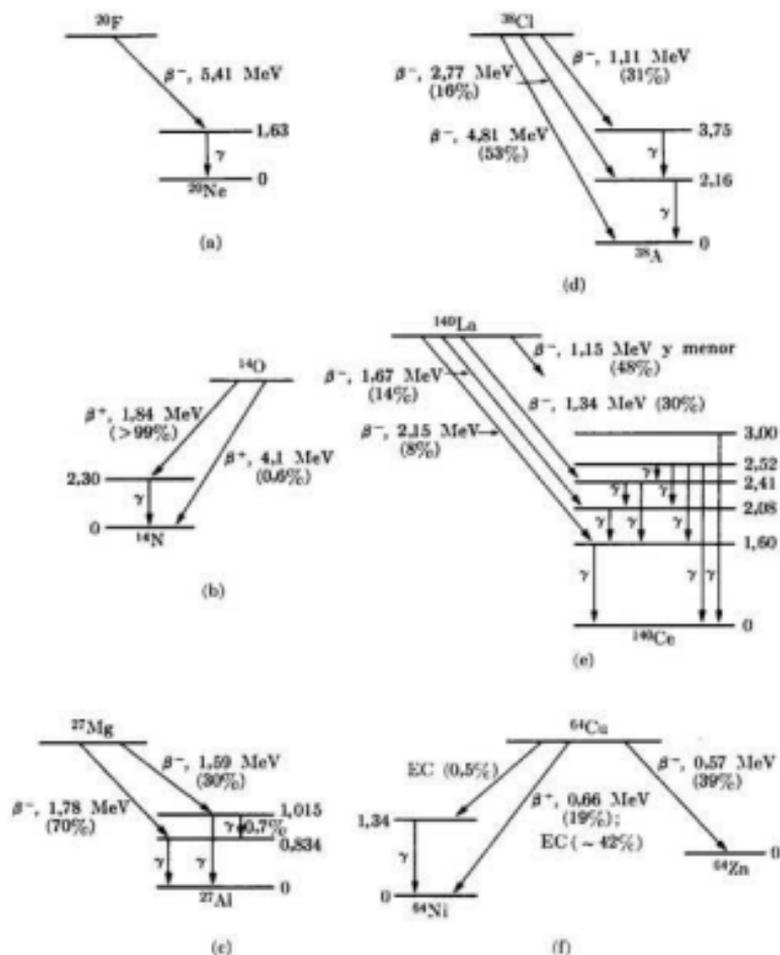
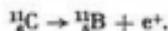


Fig. 8-10. Esquema de desintegración de varios emisores β . (a) ^{20}F , (b) ^{14}O , (c) ^{27}Mg , (d) ^{35}Cl , (e) ^{140}La y (f) ^{64}Cu .

Por ejemplo, el ^{11}C es un emisor β^+ y se transforma conforme al esquema



En algunos casos se ha observado que el núcleo originario en lugar de emitir un positrón, captura un electrón de una de las capas atómicas internas, digamos un electrón K. Estos son electrones s. Como el lector recordará de la sección 3.5,

los electrones s tienen órbitas muy penetrantes que llegan muy cerca del núcleo; por lo tanto, la probabilidad de ser capturados por un protón es relativamente grande. Este proceso, llamado *captura electrónica* (CE), también resulta en el reemplazo de un protón por un neutrón en el núcleo residual. Se puede expresar por



Una vez más se observa que la carga eléctrica y el número de nucleones se conservan en el proceso. A la captura del electrón sigue la emisión de rayos X por el núcleo residual al pasar un electrón externo en el estado vacante dejado en la capa K. Estos rayos X son los mismos que los rayos característicos del átomo residual, discutidos en la sección 4.7.

Como en la desintegración α , el núcleo residual resultante de la desintegración β o de la CE puede haber quedado en su estado fundamental o en un estado excitado; en el último caso el proceso es seguido de emisión γ . La fig. 8-10 muestra los esquemas de desintegración de algunos emisores β .

Una de las características más interesantes de la desintegración β es que los electrones y positrones son emitidos con un amplio intervalo de energías cinéticas (y momenta), desde cero hasta un máximo compatible con la energía total disponible. En otras palabras, los electrones y positrones tienen un espectro continuo de energía. La fig. 8-11(a) muestra la distribución de energía de los electrones resultantes de la desintegración β^- del ${}^{211}\text{Bi}$ (RaE) y la fig. 8-11(b) la distribución de energías de los positrones emitidos en la desintegración β^+ del ${}^{13}\text{N}$. Pero las ecs. (8.8) y (8.9) son procesos de dos cuerpos, similares a la desintegración α , y las leyes de conservación de la energía y del momentum requieren que en el sistema de referencia del centro de masa, en el cual el núcleo originario está en reposo, la energía disponible (el Q del proceso) se reparta en una propor-

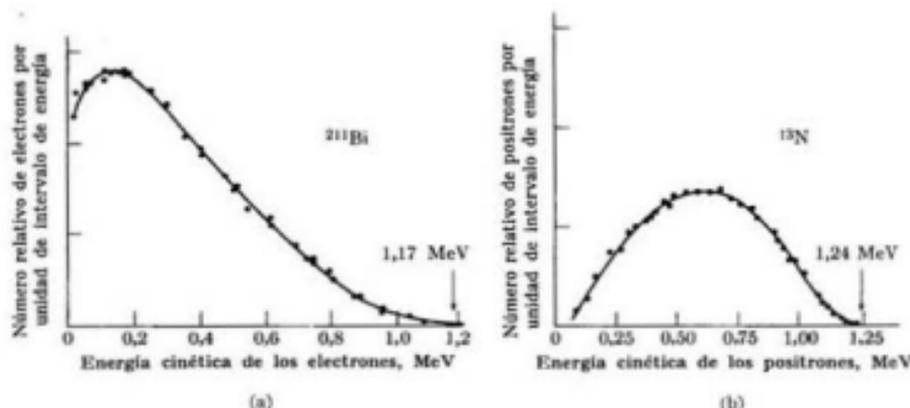


Fig. 8-11. (a) Espectro de energía del electrón emitido en la desintegración β^- del ${}^{211}\text{Bi}$. [Datos tomados de G. Neary, *Proc. Roy. Soc. (London)* A175, 71 (1940).] (b) Espectro de energía del positrón emitido en la desintegración β^+ del ${}^{13}\text{N}$. [Datos obtenidos por Siegbahn y Slatis, *Ark. Ast. Math. Fysik* 82A, N.º 9 (1945).]

ción fija entre el núcleo residual y el electrón o el positrón (recordar la ec. 8.5 para la desintegración α). Esto está en contradicción con el resultado experimental mencionado.

Para aclarar esta nueva dificultad, Pauli sugirió en 1930 que debe haber alguna otra partícula involucrada en la desintegración β , de modo que resulten tres partículas. La tercera partícula tiene que ser neutra para cumplir con la ley de conservación de la carga, y de masa muy pequeña, ya que la masa está esencialmente contenida en las otras dos partículas observadas. Por estas dos razones la nueva partícula fue denominada *neutrino* (nombre propuesto por Enrique Fermi y que significa "neutrón pequeño"). Se designa con el símbolo ν . Como veremos en la sección 9.5 se ha encontrado que hay dos clases de partículas neutras, casi idénticas, asociadas con la desintegración β . Una, el neutrino, se emite en la desintegración β^+ y en la captura electrónica, mientras que la partícula emitida en la desintegración β^- se denomina *antineutrino* y se designa con $\bar{\nu}$.

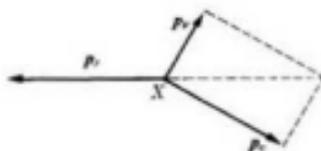


Fig. 8-12. Conservación del momento en la desintegración β .

Empero, en este capítulo nos referiremos en la mayoría de los casos a ambas partículas con el nombre de "neutrino". Se supone que el neutrino lleva consigo la energía y el momento necesarios para restaurar la conservación de ambas cantidades. En el sistema de referencia del centro de masa la suma de los momentos de las tres partículas resultantes debe ser cero (fig. 8-12). Pero hay un infinito número de modos en los cuales la energía total disponible se puede repartir entre los tres productos, lo cual explica claramente la distribución continua de energía de los electrones y positrones. Por lo tanto, los procesos (8.8), (8.9) y (8.10) deben ser escritos nuevamente en la forma:

$$\text{Desintegración } \beta^-: \quad {}^A_Z X \rightarrow {}^A_{Z-1} Y + e^- + \bar{\nu}, \quad (8.11)$$

$$\text{Desintegración } \beta^+: \quad {}^A_Z X \rightarrow {}^A_{Z-1} Y + e^+ + \nu, \quad (8.12)$$

$$\text{CE:} \quad {}^A_Z X + e^- \rightarrow {}^A_{Z-1} Y + \nu. \quad (8.13)$$

Todo lo que podemos decir es que el neutrino es una invención interesante para salvar dos leyes de conservación. Pero ¿hay confirmación adicional de su existencia? Por el lado teórico podemos hacer un análisis estadístico para determinar cómo se reparte la energía liberada en el proceso de desintegración entre el electrón (o el positrón) y el neutrino (ver ejemplo 8.8). Cuando se compara este análisis con la distribución experimental de energía de los electrones (o los positrones) y el neutrino, se obtiene excelente concordancia, suponiendo que la masa en reposo del neutrino es muy pequeña (menor de $10^{-9} m_e$). Realmente la masa en

reposo del neutrino se considera igual a cero ($m_0 = 0$) y así para un neutrino, la relación energía momentum es $E = cp$. Desde el punto de vista experimental es fácil comprender que debido a sus propiedades, el neutrino deberá ser muy difícil de observar, ya que es insensible a la acción de los campos eléctrico y magnético y su masa en reposo, pequeñísima o nula, no nos permite usar medidas de masa para observar su emisión o captura. En efecto, el neutrino eludió la observación directa hasta 1956, cuando C. Cowan y F. Reines probaron fuera de toda duda su existencia. Su experimento está explicado en el ejemplo 8.6.

Se puede considerar que los núcleos inestables que yacen por encima de la región de estabilidad en la fig. 7-1 tienen demasiados neutrones (o muy pocos protones), y que los que están debajo tienen demasiados protones (o muy pocos neutrones). Luego, podríamos esperar que estos núcleos alcancen estabilidad emitiendo sus neutrones o protones en exceso. Sin embargo, esto no es lo que sucede — a menos que el núcleo esté en un estado excitado — porque no se dispone de suficiente energía para tales procesos (recordar la tabla 8-2). Se ha observado que, en su lugar, se emiten electrones y positrones. En consecuencia, podemos suponer que el núcleo alcanza estabilidad cuando, por *desintegración β^- un neutrón se transforma en un protón* según el esquema



mientras que en la *desintegración β^+ , un protón se transforma en un neutrón* de acuerdo al esquema



En el caso de captura electrónica, el proceso es



De esta manera un núcleo se puede deshacer de sus neutrones o protones en exceso, sin emitir realmente ninguna de estas partículas. Esta teoría de la desintegración β fue propuesta en 1934 por Fermi. Las ecs. (8.14), (8.15) y (8.16) son compatibles con las (8.11), (8.12) y (8.13) y expresan de un modo fundamental lo que sucede en la desintegración β .

Los procesos anteriores nos permiten inferir otra propiedad del neutrino: su espín. El neutrón, el protón, el electrón y el positrón tienen un espín igual a $\frac{1}{2}$. Por consiguiente, en el proceso β^+ , $p \rightarrow n + e^+ + \nu$, el momentum angular en unidades de \hbar , es $\frac{1}{2}$, mientras que el momentum angular de $n + e^+$ debe ser $\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} = 1$ ó 0 , dependiendo de que el neutrón y el positrón tengan sus espines paralelos o antiparalelos. Luego, el neutrino debe tener un espín igual a $\frac{1}{2}$, y de tal manera orientado que el espín total o la suma de los momenta de las tres partículas de la derecha sea $\frac{1}{2}$. Así se salva la ley de la conservación del momentum angular. El mismo razonamiento se aplica a los otros dos procesos: (8.14) y (8.16). Esto también explica los cambios de espín ΔI del núcleo observados en la desintegración β . Si el electrón (o positrón) y el neutrino tienen sus espines paralelos (estado triple), entonces tenemos $\Delta I = \pm 1$ ó 0 , pero si sus espines son antiparalelos (estado sencillo), entonces $\Delta I = 0$.

El proceso (8.14) ha sido observado con neutrones libres, ya que la reacción es exógena. En efecto la energía disponible es

$$Q = 931,48 [m_n - (m_p + m_e + m_\nu)] \text{ MeV} = 0,7834 \text{ MeV}.$$

Los neutrones libres se desintegran de acuerdo a la ec. (8.14) con una vida media de 13 min. Esta es una de las razones por las cuales los neutrones libres no existen. Estos, poco tiempo después de ser producidos, son capturados por otros núcleos o se desintegran en protones, electrones y neutrinos. Por otra parte, los procesos (8.15) y (8.16) son endógenos, como el estudiante puede verificar calculando el valor de Q para cada proceso; por lo tanto, los protones libres son estables respecto a la desintegración β , lo que explica la existencia del hidrógeno. De otro modo todo el hidrógeno habría desaparecido, bien por captura del electrón orbital o bien por desintegración del protón nuclear. Sin embargo, los procesos (8.15) y (8.16) pueden ocurrir en núcleos más complejos, donde la diferencia entre las energías de ligadura del núcleo original y el residual suministra la energía necesaria. Empero, los neutrones ligados en núcleos, en general, no se desintegran espontáneamente, porque la presencia de otros nucleones puede hacer el proceso energéticamente imposible. Por esa razón la mayoría de los neutrones son estables en los núcleos.

La desintegración β ilustra dos hechos fundamentales de la física. Uno es la importancia de las leyes de conservación en el análisis de los procesos que ocurren en la naturaleza. El otro es la naturaleza variable de las partículas fundamentales. Es decir, que estas partículas, aunque tienen propiedades bien definidas, no son estructuras permanentes y una de ellas puede transformarse en otras varias con las limitaciones impuestas por las leyes de conservación. Este es un concepto radicalmente nuevo que no estaba contemplado ni en la mecánica clásica ni en la cuántica. El carácter interrelacional de las partículas fundamentales da una visión enteramente nueva de las ideas acerca de la estructura de la materia. En el capítulo 9 exploraremos detalladamente esta nueva situación.

Todavía no se ha desarrollado una teoría completa y satisfactoria que tome en cuenta todas las transformaciones entre las partículas fundamentales. Se supone que procesos tales como (8.14), (8.15), (8.16) y otros (que se explicarán en el capítulo 9) son el resultado de una interacción diferente, llamada *interacción débil*. A partir del análisis de las vidas medias y de la distribución de energía de los emisores β se ha estimado que la intensidad de la interacción débil es del orden de 10^{-38} cuando se la compara con la intensidad de la interacción nuclear o fuerte, o de alrededor de 10^{-11} cuando se la compara con la interacción electromagnética. Actualmente ambas interacciones, la fuerte y la débil, suministran áreas de investigación interesantes y excitantes para los físicos, y presumiblemente continuarán haciéndolo en los años venideros.

EJEMPLO 8.6. Análisis del experimento sobre detección del neutrino realizado por Cowan-Reines.

Solución: Cuando un protón captura un antineutrino, se produce un neutrón y un positrón, es decir:



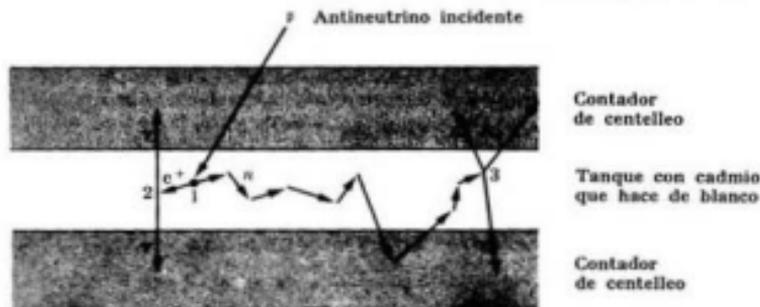


Fig. 8-13. Diagrama esquemático del arreglo experimental para la detección del neutrino. El neutrino entrante reacciona con un protón en 1. El positrón producido se aniquila con un electrón en 2 y el neutrón es capturado por un núcleo de cadmio en 3.

Este proceso de captura de un antineutrino se puede relacionar con la ec. (8.15) del mismo modo que el proceso de captura de un electrón, ec. (8.16), está relacionado con la ec. (8.15).

Los reactores nucleares producen gran cantidad de emisores β , que son los productos de fisión del uranio (ver sección 8.5), de suerte que los reactores nucleares son fuentes copiosas de antineutrinos. Si los antineutrinos provenientes de un reactor caen sobre un material hidrogenado, tiene lugar el proceso (8.17).

El positrón se puede detectar porque al chocar con un electrón se aniquilan ambas partículas y se puede detectar fácilmente la emisión de rayos γ (sección 9.3) por medio de un contador de centelleo. (Ver apéndice VII.) Se puede detectar el neutrón añadiendo cadmio a la sustancia hidrogenada. Los neutrones — después de haber disminuido la velocidad de su movimiento a través de la sustancia a consecuencia de los choques con otros núcleos — son capturados por los núcleos de cadmio con emisión de algunos rayos γ . Esta cadena de procesos está ilustrada en la fig. 8-13. Hay, desde luego, un retardo de varios microsegundos entre la producción de los rayos γ resultantes de la aniquilación electrón-positrón y la emisión de rayos γ como consecuencia de la captura del neutrón por el cadmio. Los dos conjuntos de rayos γ son identificados por medio de circuitos electrónicos apropiados. Un análisis de los resultados experimentales suministra evidencia convincente de que la supuesta cadena de procesos ha tenido lugar y que los antineutrinos provienen realmente del reactor. Otros varios experimentos han confirmado la hipótesis del neutrino. En el experimento de Cowan-Reines, llevado a efecto en un sótano situado debajo de uno de los reactores de Savannah River, el flujo de neutrinos fue aproximadamente de $4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ y el número de eventos registrados fue cerca de tres por hora. Se considera que el flujo de neutrinos, provenientes principalmente del sol, que alcanzan la tierra es más o menos de $4 \times 10^{26} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$.

EJEMPLO 8.7. Determinación de la energía disponible para cada uno de los procesos de desintegración β descritos por las ecs. (8.11), (8.12) y (8.13).

Solución: Consideremos primero la desintegración β^- , ec. (8.11). Inicialmente tenemos un núcleo de número atómico Z y masa m_Z . Al final del proceso tenemos un núcleo de número atómico $Z + 1$ y masa m_{Z+1} , más un electrón (masa m_e) y un neutrino (masa cero). Luego la energía disponible para el proceso es

$$Q_{\beta^-} = [m_Z - (m_{Z+1} + m_e)]c^2 = (m_Z - m_{Z+1} - m_e)c^2.$$

Normalmente se usa la masa atómica M_Z en lugar de la masa nuclear, tal que $M_Z = m_Z + Zm_e$. Haciendo esta sustitución, obtenemos

$$Q_{\beta^-} = (M_Z - M_{Z+1})c^2. \quad (8.18)$$

Para la desintegración β^+ (ec. 8.32), tenemos

$$Q_{\beta^+} = (m_Z - m_{Z-1} - m_e)c^2$$

o, transformando a masas atómicas,

$$Q_{\beta^+} = (M_Z - M_{Z-1} - 2m_e)c^2. \quad (8.19)$$

Finalmente, para la captura electrónica (ec. 8.13),

$$Q_{CE} = (M_Z - M_{Z-1})c^2. \quad (8.20)$$

De este modo, siempre que la masa atómica de un átomo dado es mayor que la de uno u otro de los isóbaros vecinos, se desintegrará sea por β^- o por captura electrónica. Empero, para la desintegración β^+ las masas deben diferir al menos en $2m_e$ (cerca de $1,097 \times 10^{-9}$ uma o 1,022 MeV). Se sugiere que el estudiante verifique estas reglas observando varios grupos de isóbaros en una tabla de nucleidos. Al escribir estas ecuaciones hemos despreciado el efecto debido a la energía de ligadura de los electrones en los átomos. La energía Q se reparte (como energía cinética) entre los productos de desintegración. Si despreciamos la energía de retroceso del núcleo residual, Q da también la energía cinética máxima del electrón o del positrón en las ecs. (8.11) y (8.12).

Ilustremos estas reglas importantes con algunos ejemplos. El núcleo de ^{14}C se desintegra en ^{14}N de acuerdo al esquema de la ec. (8.11), dando un electrón y un neutrino. Las masas de los átomos son $M_Z(^{14}\text{C}) = 14,007682$ uma y $M_{Z+1}(^{14}\text{N}) = 14,007515$ uma. Por consiguiente, la ec. (8.18) da $Q_{\beta^-} = 0,000167$ uma o 0,1556 MeV. La energía cinética máxima de los electrones emitidos que se ha observado es 0,155 MeV, valor que concuerda muy bien.

Consideremos a continuación la desintegración del ^{11}C en ^{11}B , de acuerdo al esquema de la ec. (8.12). Las masas de los átomos involucrados son $M_Z(^{11}\text{C}) = 11,01492$ uma y $M_{Z+1}(^{11}\text{B}) = 11,01279$ uma. Luego, su diferencia de masa es 0,00213 uma ó 1,985 MeV, la cual es mayor que $2m_e$ o 1,022 MeV. Por lo tanto, la emisión del positrón es posible con

$$Q_{\beta^+} = 1,985 \text{ MeV} - 1,022 \text{ MeV} = 0,963 \text{ MeV}.$$

La energía cinética máxima medida en los positrones observados en esta desintegración es 0,96 MeV, también en excelente acuerdo.

Finalmente, consideremos la desintegración del ^7Be , cuya masa es $M_Z(^7\text{Be}) = 7,01915$ uma. Como se explicó anteriormente, se encuentra que el ^7Be se desintegra en ^7Li , cuya masa es $M_{Z-1}(^7\text{Li}) = 7,01822$ uma. La diferencia de masa es 0,00093 uma ó 0,866 MeV. Esta es menor que 1,022 MeV, y, en consecuencia, la emisión de un positrón es imposible. La desintegración ocurre entonces por medio de captura electrónica, con $Q_{CE} = 0,866$ MeV.

EJEMPLO 8.8. Cálculo de la forma del espectro de energía en la desintegración β .

Solución: Consideremos un gran número de núcleos con radioactividad β . Observemos los electrones (o positrones) emitidos durante un cierto intervalo de tiempo. Designemos con dN el número de electrones (o positrones) emitidos con una energía cinética comprendida entre E_{ke} y $E_{ke} + dE_{ke}$. Nuestro propósito es calcular dN/dE_{ke} , que es el número de electrones (o positrones) por unidad de intervalo de energía. Designaremos con E_0 la energía cinética disponible para el electrón y el neutrino, la cual, si despreciamos la energía de retroceso del núcleo residual, es prácticamente

igual a Q . Entonces $E_0 = E_{\nu} + E_{e^-}$. Obviamente E_0 debe ser igual a la energía máxima del electrón. Cuando la energía cinética del electrón cae dentro del intervalo dE_{e^-} , la del neutrino está en el intervalo $dE_{\nu} = -dE_{e^-}$. Después de la desintegración podemos tratar al electrón y al neutrino como partículas libres encerradas en una caja de potencial muy grande. Entonces dN/dE_{e^-} debe ser proporcional al número de estados electrónicos por unidad de intervalo de energía, es decir, $g_e(E_{e^-})$, y al número de estados neutrínicos por unidad de intervalo de energía $g_\nu(E_{\nu})$. Esto es, $dN/dE_{e^-} \sim g_e(E_{e^-})g_\nu(E_{\nu})$. Según el problema 2.11, tenemos $g(p) dp \sim p^2 dp$, y por lo tanto

$$g(E) = g(p) dp/dE \sim p^2 dp/dE.$$

Para un neutrino que tiene masa en reposo nula, la relación energía momentum es $p = E_{\nu}/c$. En consecuencia

$$g_\nu(E_{\nu}) \sim E_{\nu}^2 = (E_0 - E_{e^-})^2.$$

Para un electrón (que debe ser tratado en forma relativista), la relación energía-momentum es $E_{e^-} = c\sqrt{m_e^2 c^2 + p_e^2} - m_e c^2$. Luego

$$g_e(E_{e^-}) \sim (E_{e^-} + m_e c^2)(E_{e^-}^2 + 2m_e c^2 E_{e^-})^{1/2}.$$

Por consiguiente tenemos

$$dN/dE_{e^-} = C(E_{e^-} + m_e c^2)(E_{e^-}^2 + 2m_e c^2 E_{e^-})^{1/2}(E_0 - E_{e^-})^2, \quad (8.21)$$

donde C es una constante de proporcionalidad que depende de varios otros factores involucrados en la desintegración β , tales como el número atómico Z del núcleo que se desintegra y la intensidad de la interacción débil responsable de la desintegración. Depende además de la energía del electrón. Haciendo el gráfico de dN/dE_{e^-} en función de E_{e^-} podemos comparar con el resultado experimental mostrado en las figuras 8-11(a) y (b). En general los resultados concuerdan de modo satisfactorio. Podemos observar que la ec. (8.21) se ha deducido basándose en la hipótesis de que el neutrino tiene masa en reposo nula. Empero, si la masa en reposo no fuese cero, podríamos haber obtenido un resultado diferente. Por lo tanto, la confirmación experimental de la ec. (8.21) es una prueba indirecta de que el neutrino tiene una masa en reposo despreciable. Dado el grado de precisión de los experimentos que se realizan actualmente, podemos decir que la masa en reposo del neutrino debe ser menor que $0,001m_e$, y, por lo tanto, se puede tomar con seguridad igual a cero.

8.5 Reacciones nucleares

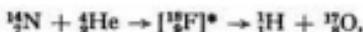
Cuando dos núcleos, venciendo la repulsión coulombiana, llegan a quedar muy cerca uno del otro (dentro del alcance de la fuerza nuclear), puede ocurrir un reagrupamiento de los nucleones. Esto puede dar lugar a una *reacción nuclear*, similar al reagrupamiento de átomos en la molécula en una reacción química. Las reacciones nucleares se producen comúnmente bombardeando un núcleo (M_1) que sirve de blanco con un proyectil nuclear (m_1), en la mayoría de los casos un nucleón (neutrón o protón) o un núcleo ligero tal como un deuterón o una partícula alfa. Generalmente no se emplea núcleos más pesados debido a que para vencer la repulsión eléctrica entre núcleos pesados se necesita un proyectil con gran energía cinética. Algunas veces se usa fotones como proyectiles. En la mayoría de las reacciones se produce la misma u otra partícula (m_2) dejando un núcleo final o residual (M_2) en su estado fundamental o en un estado excitado.

La reacción se designa con los símbolos $M_i(m_i, m_f)M_f$, donde los núcleos inicial y final aparecen a la izquierda y a la derecha del paréntesis y las partículas ligeras, la entrante y la saliente, están en el interior del mismo. Por ejemplo, cuando bombardeamos ^{14}N con partículas alfa (^4He), el resultado puede ser un protón (^1H) y un núcleo residual ^{17}O . Este proceso se puede escribir en la forma



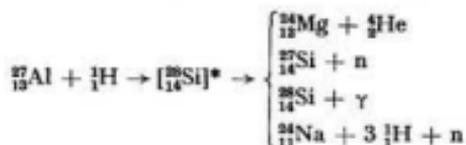
o usando una notación más abreviada $^{14}\text{N}(\alpha, p)^{17}\text{O}$.

En general, cuando las energías de las partículas involucradas no son demasiado altas, se supone que una reacción nuclear ocurre en dos etapas. Primero: una partícula o proyectil entrante es capturado, con lo cual se forma un núcleo intermedio o compuesto que está en un estado altamente excitado. En la segunda etapa, el núcleo compuesto se puede desexcitar, bien por emisión de la misma partícula que entró o bien por algún otro medio. Luego se puede escribir el ejemplo anterior en la forma



donde ^{18}F es el núcleo intermedio o compuesto. El asterisco es para indicar que el núcleo está en un estado excitado.

Generalmente hablando, para una determinada primera etapa de una reacción nuclear, hay varios modos de desexcitación del núcleo compuesto. Cada modo se denomina "canal". Por ejemplo, cuando el ^{27}Al se bombardea con protones, resultan varios productos, algunos de los cuales aparecen en la lista siguiente:



Algunas reacciones nucleares no pueden ser descritas por medio del modelo del núcleo compuesto. Un ejemplo es la *reacción de stripping* (NT)



o $^{24}\text{Mg}(d, p)^{23}\text{Mg}$. Cuando el deuterón llega muy cerca del núcleo, la evidencia experimental indica que en este proceso el neutrón es capturado y el protón repelido sin formación del núcleo compuesto.

Las reacciones nucleares son esencialmente procesos de choque en los cuales se debe conservar la energía, el momentum angular, el número de nucleones y la carga; se usan métodos de las mecánicas newtoniana y relativista para calcular algunas de estas cantidades (ver apéndice II). Si las partículas entrantes y sa-

N. del T.: No hay acuerdo en la designación castellana de esta reacción. Se ha propuesto "desgarramiento" y "desnudamiento" sin mucha aceptación. Como los que investigan este tema en América Latina y diversos países de Europa usan sistemáticamente la designación inglesa, la solución más conveniente será castellanizarla.

lientes son las mismas, el proceso se llama *dispersión*. La dispersión es *elástica* si el núcleo queda en el mismo estado, de modo que la energía cinética se conserva, e *inelástica* si el núcleo queda en un estado diferente. En este último caso, la energía cinética de la partícula saliente difiere de la energía cinética de la partícula entrante.

El Q de una reacción nuclear $M_i(m_i, m_j)M_f$ está dado por la expresión

$$Q = [(M_i + m_i) - (M_f + m_j)]c^2. \quad (8.22)$$

En la ecuación anterior todas las masas son atómicas. Si Q es positivo, la reacción ocurre para todos los valores de la energía cinética del proyectil entrante; pero si Q es negativo, m_i debe tener como mínimo una cierta energía cinética (umbral) para producir la reacción. Como veremos en el ejemplo 9.3, el umbral de energía cinética de la partícula entrante en el sistema de referencia L es

$$E_k = -Q \frac{M_i + m_i + m_j + M_f}{2M_i}$$

si hay que tratar las partículas en forma relativista. Sin embargo, si se las puede tratar en forma no relativista, de modo que Q sea pequeño y se pueda reemplazar $m_j + M_f$ por $M_i + m_i$ en el numerador, el umbral de energía cinética del proyectil en el sistema de referencia L es

$$E_k = -Q \frac{M_i + m_i}{M_i} = -Q \left(1 + \frac{m_i}{M_i} \right).$$

Que es la expresión usada en la mayoría de los casos.

En algunos casos el proyectil es capturado, pero no se emite una nueva partícula. En su lugar se emite un rayo gamma (un fotón), cuya energía depende de varios factores, tales como el estado del núcleo resultante y la energía de ligadura más la energía cinética de la partícula capturada. Un ejemplo de una reacción por captura es $^{27}\text{Al}(n, \gamma)^{28}\text{Al}$. Otro es la captura de un neutrón por hidrógeno en la reacción $^1\text{H}(n, \gamma)^2\text{H}$; el átomo resultante es deuterio. El proceso inverso también puede ocurrir: un núcleo puede absorber un fotón o rayo γ de energía suficiente para que una partícula sea expulsada. Este proceso, que es equivalente al efecto fotoeléctrico en los átomos, se denomina *reacción fononuclear*. Ejemplos: $^{26}\text{Mg}(\gamma, p)^{25}\text{Na}$ y $^1\text{H}(\gamma, n)^1\text{H}$.

Se puede describir una reacción nuclear en términos de una *sección eficaz*. El concepto de sección eficaz se introdujo en las secciones 1.9 y 7.8 para ciertos procesos. Desde luego, para cada reacción nuclear particular hay una sección eficaz que se expresa en función de la energía del proyectil o partícula entrante. Las secciones eficaces se definen experimentalmente del siguiente modo. Supongamos que una muestra de espesor Δx (donde Δx es pequeño) y área A , contenga n_t núcleos por unidad de volumen que hacen de blanco y esté expuesta a una densidad de corriente $n_a v$ de partículas entrantes (de tipo a) por unidad de área y unidad de tiempo, donde n_a es el número de partículas entrantes por unidad de volumen y v la velocidad de cada una de ellas. Si se observa que N_s

partículas (de tipo b) salen de la muestra por unidad de tiempo, la sección eficaz para la reacción (a, b) es

$$\sigma(a, b) = \frac{N_b}{(n_a v) (n_t A \Delta x)}. \quad (8.23)$$

Esta definición coincide con la ec. (7.16), ya que $n_t A \Delta x$ es el número total de núcleo blanco y por lo tanto $N_b / (n_t A \Delta x)$ da el flujo total por unidad de tiempo de partículas salientes por núcleo blanco. Observar que N_b está expresado en s^{-1} , que $n_a v$ lo está en $m^{-3} m s^{-1}$ ó $m^{-2} s^{-1}$, que $n_t A \Delta x$ es un número adimensional y que σ está expresada en m^2 como en los casos anteriores. La mayoría de las secciones eficaces son del orden de $R^2 \sim 10^{-28} m^2$, donde R es el radio nuclear. La cantidad $10^{-28} m^2$ se denomina un *barn*, abreviado *b*, como se mencionó en la sección 7.3. Es una unidad usada comúnmente para expresar las secciones eficaces de los procesos nucleares. Un submúltiplo es el *milibarn*, *mb*, igual a $10^{-32} m^2$.

Dada una partícula a entrante, puede resultar varias partículas diferentes salientes b, b', b'' , correspondientes a los diversos canales de reacción, cada uno con su propia sección eficaz $\sigma(a, b), \sigma(a, b')$, etc. La sección eficaz total de la reacción para una partícula a es entonces

$$\sigma(a) = \sigma(a, b) + \sigma(a, b') + \sigma(a, b'') + \dots$$

Las secciones eficaces macroscópicas total y parcial de una muestra dada están definidas por

$$\Sigma_{ab} = n_t \sigma(a, b)$$

y

$$\Sigma_a = n_t \sigma(a),$$

(8.24)

ambas expresadas en m^{-1} .

La sección eficaz de cada reacción nuclear depende de la energía de la partícula entrante. En muchas reacciones nucleares la sección eficaz presenta picos muy pronunciados denominados *resonancias*, que corresponden a los valores de la energía para los cuales la reacción está más favorecida o es más probable. Estas resonancias están íntimamente relacionadas con los niveles de energía del núcleo compuesto. La fig. 8-14(a) y (b) muestra la sección eficaz total y la de captura para neutrones en aluminio en función de la energía del neutrón. La figura 8-14(c) da la sección eficaz, en unidades arbitrarias, para la reacción nuclear $^{37}\text{Cl}(p, n)^{37}\text{A}$ en función de la energía del protón. Del análisis de tales curvas podemos obtener amplia información acerca de la estructura nuclear y los estados de energía.

En muchos casos el núcleo proveniente de una reacción nuclear es inestable o radioactivo. En efecto, es por medio de reacciones nucleares que se forman los núcleos radioactivos artificiales. La radioactividad artificial fue descubierta por F. Joliot e I. Curie en 1934, mientras estudiaban las reacciones nucleares

producidas por el bombardeo de elementos ligeros con partículas α . Una de las reacciones que observaron fue



El núcleo ${}^{13}_7\text{N}$ es inestable y se desintegra según el esquema



Otras series interesantes de reacciones son aquellas provenientes de la combinación de captura neutrónica y desintegración β de los isótopos del uranio, que produce núcleos nuevos con $Z = 93$ (neptunio), $Z = 94$ (plutonio), $Z = 95$ (americio), y así sucesivamente hasta llegar a $Z = 100$. La cadena parcial de reacciones se muestra en la fig. 8-15, donde cada flecha horizontal representa una captura neutrónica y cada una de las verticales una desintegración β .

EJEMPLO 8.9. Atenuación de un haz de partículas de tipo α en función de la distancia x recorrida en un blanco.

Solución: Llamando $I = n_{\alpha}v$ a la densidad de corriente de partículas entrantes que inciden sobre una capa de espesor Δx , tenemos según las ecs. (8.23) y (8.24) que

$$I\Sigma\Delta x = N_{\alpha}/A$$

da el número de partículas retiradas del haz incidente por unidad de área y por unidad de tiempo; en otras palabras, da la disminución en la densidad de corriente de los proyectiles, que debe ser designada por $-\Delta I$, ya que ΔI es negativa. Así, podemos escribir

$$\Delta I = -I\Sigma\Delta x. \quad (8.25)$$

Si el espesor Δx es muy pequeño, en su lugar se puede escribir

$$dI = -I\Sigma dx \quad \text{ó} \quad dI/I = -\Sigma dx.$$

Integrando y llamando I_0 al flujo de partículas entrantes cuando $x = 0$, obtenemos

$$I = I_0 e^{-\Sigma x}. \quad (8.26)$$

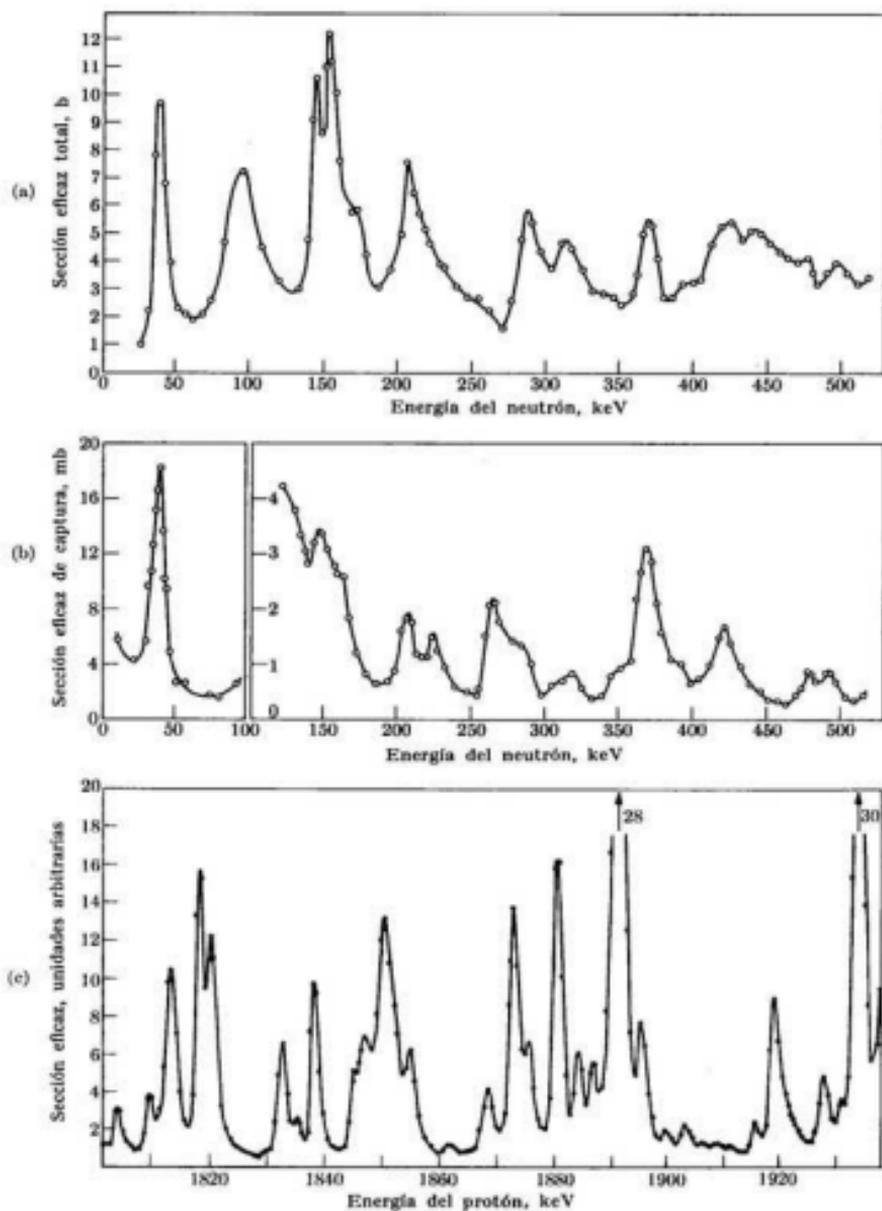
Podemos usar esta ecuación para determinar Σ después de medir I_0 e I . Una vez conocido Σ , obtenemos σ usando la ec. (8.24).

EJEMPLO 8.10. Descubrimiento del neutrón.

Solución: Una aplicación histórica e interesante de las leyes de conservación es el descubrimiento del neutrón. En 1930 Bothe y Becker observaron que cuando bombardeaban el boro y el berilio con partículas α , se producía una radiación de alto poder de penetración. Esta radiación no estaba constituida por partículas cargadas porque no era afectada por campos eléctricos o magnéticos. Por esa razón pensaron que la radiación consistía en rayos γ de alta energía, y escribieron la reacción en la forma



El Q de esta reacción es 10,4 MeV. Como la energía cinética de las partículas α es de unos 5 MeV, la energía total disponible es 14 MeV en el sistema de referencia del CM. Esta energía se debe repartir entre el átomo de ${}^{13}_6\text{C}$ y el fotón γ . Luego,



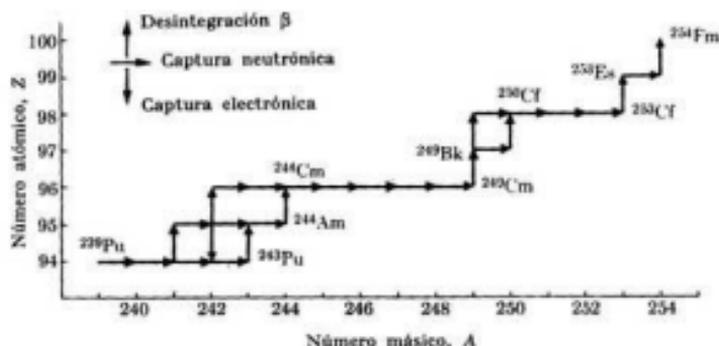


Fig. 8-15. Secuencias de reacciones nucleares para la producción de nucleidos pesados por medio de la irradiación del ^{239}Pu con neutrones lentos.

los rayos γ deben tener una energía ligeramente menor de 14 MeV. A partir de las medidas de absorción se estimó que la energía del fotón debería ser aproximadamente 7,5 MeV. Dos años más tarde (1932) Curie y Joliot observaron que cuando la radiación proveniente de la reacción anterior pasaba a través de un material hidrogenado, se producía protones altamente energéticos, con una energía máxima de más o menos 7,5 MeV. La interpretación natural fue suponer que los protones habían sido sacados por el choque con los fotones γ producidos en la reacción anterior, resultando en un efecto Compton nuclear (γ, p). Los protones más energéticos resultan de los choques frontales en los cuales los fotones retroceden o se desvían 180° . Si E_γ y $p_\gamma = -E_\gamma/c$ son la energía y el momentum del fotón incidente, E_γ' y $p_\gamma' = -E_\gamma'/c$ los del fotón que retrocede, y E_k y $p_k = \sqrt{2m_p E_k}$ los del protón (que se debe tratar en forma no relativista), la conservación de la energía y del momentum da

$$E_\gamma = E_\gamma' + E_k, \quad E_\gamma/c = -E_\gamma'/c + \sqrt{2m_p E_k},$$

de la cual podemos obtener

$$E_\gamma = \frac{1}{2}(E_k + \sqrt{2(m_p c^2)E_k}).$$

Insertando el valor máximo de E_k , 7,5 MeV, y recordando que $m_p c^2$ es 938 MeV aproximadamente, obtenemos $E_\gamma \approx 64$ MeV. Este valor de la energía de los fotones de los rayos γ es mayor que la energía suministrada por la reacción, cuyo valor dado más arriba es 14 MeV, o que la obtenida a partir de las medidas de absorción. Es más, considerando el efecto de los productos de la reacción Be-He sobre otras sustancias, obtenemos otros valores de E_γ , en algunos casos tan altos como 90 MeV. Por lo tanto, no podemos obtener resultados sistemáticos para la energía de los rayos γ en la ec. (8.27), compatibles con la conservación de la energía y del momentum.

En 1932 el físico británico J. Chadwick mostró que todas estas dificultades desaparecían y las leyes de conservación seguían valiendo si, en lugar de rayos γ , eran emitidas partículas neutras, con una masa cercana a la de los protones. El proceso

◀ Fig. 8-14. (a) Sección eficaz total y (b) de captura del aluminio para neutrones en función de la energía de éstos. [Datos tomados de R. Henkel y H. Barschall, *Phys. Rev.* 80, 145 (1950).] (c) Sección eficaz para la reacción $^{27}\text{Al}(p, n)^{27}\text{Si}$ en función de la energía del protón. [Datos de Schoenfeld, Duborg, Preston y Goodman, *Phys. Rev.* 85, 873 (1952).]

podía ser entonces escrito en la forma



Chadwick hizo cuidadosas medidas de la energía cinética de los protones y de los átomos de nitrógeno que los neutrones arrancaban al atravesar una sustancia que contenía hidrógeno o nitrógeno. Esto permitió calcular la masa del neutrón, obteniéndose un valor comprendido entre 1,005 y 1,008 uma, que es compatible con las energías involucradas en la reacción anterior. Más tarde, medidas hechas con mayor precisión dieron $m_n = 1,008665$ uma.

Los experimentos de Chadwick fueron la base de nuestro modelo actual del núcleo, el cual supone que el núcleo está compuesto de protones y neutrones. Hasta ese momento los científicos consideraban que los núcleos se componían de protones y electrones (A protones y $A - Z$ electrones, o un total de $2A - Z$ partículas). Pero esa hipótesis traía como consecuencia dificultades insalvables: los electrones eran demasiado grandes comparados con el radio nuclear, sus momentos magnéticos eran 10^3 veces mayores que los momentos magnéticos nucleares y su presencia en el interior del núcleo hacía imposible dar cuenta de los valores observados de los espines nucleares. De este modo la oportuna aparición del neutrón fue más que bienvenida.

EJEMPLO 8.11. Una hoja de oro de 0,3 mm de espesor se expone a una corriente de neutrones lentos de densidad igual a 10^7 neutrones $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$. La sección eficaz de captura del ${}^{197}\text{Au}$ para neutrones térmicos es $94 \times 10^{-28} \text{ m}^2$. La densidad del oro es $19,3 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ y su masa atómica es 197,2 uma. Hallar el número de núcleos de ${}^{198}\text{Au}$ formados por segundo y por cm^2 de la hoja, de acuerdo a la reacción ${}^{197}\text{Au}(n, \gamma){}^{198}\text{Au}$.

Solución: Designemos la sección eficaz de captura del ${}^{197}\text{Au}$ para neutrones térmicos por $\sigma(n, \gamma)$ y el número de átomo de oro por unidad de volumen por n_{Au} . Entonces la sección eficaz macroscópica para captura de neutrones, es de acuerdo a la ec. (8.24), $\Sigma = n_{\text{Au}}\sigma(n, \gamma)$. Si I_0 es la densidad de la corriente neutrónica incidente, el número de neutrones que no han sido capturados después de recorrer una distancia x es, de acuerdo a la ecuación 8.26, $I = I_0 e^{-\Sigma x}$. El número de neutrones capturados en la distancia x es entonces

$$I_0 - I = I_0(1 - e^{-\Sigma x}),$$

que es igual al número de núcleos de ${}^{198}\text{Au}$ formados. En nuestro caso,

$$n_{\text{Au}} = \frac{19,3 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}}{197,2 \text{ uma} \times 1,66 \times 10^{-27} \text{ kg uma}^{-1}} = 5,89 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$$

es el número de átomos de ${}^{197}\text{Au}$ por m^3 . Por lo tanto, $\Sigma = n_{\text{Au}}\sigma(n, \gamma) = 562 \text{ m}^{-1}$. Haciendo $x = 0,3 \text{ mm} = 3 \times 10^{-4} \text{ m}$, tenemos $\Sigma x = 0,1686$ y $e^{-\Sigma x} = 0,845$. Luego,

$$I_0 - I = 10^7 \text{ n cm}^{-2} \text{ s}^{-1} (1 - 0,845) = 1,55 \times 10^6 \text{ n cm}^{-2} \text{ s}^{-1}.$$

lo cual da el número de neutrones absorbidos y de átomos de ${}^{198}\text{Au}$ formados por cm^2 y por segundo.

EJEMPLO 8.12. Determinación de los niveles de energía del ${}^{28}\text{Si}$ usando la reacción nuclear ${}^{27}\text{Al}(p, \alpha){}^{24}\text{Mg}$ y su inversa, ${}^{24}\text{Mg}(\alpha, p){}^{27}\text{Al}$.

Solución: El núcleo compuesto formado en la reacción ${}^{27}\text{Al}(p, \alpha){}^{24}\text{Mg}$ es ${}^{28}\text{Si}$, de modo que podemos escribir



Es de esperar que la sección eficaz para esta reacción muestre picos bien definidos (esto es, resonancias) cuando la energía total en el sistema de referencia C del ${}^{27}\text{Al} + {}^1_1\text{H}$

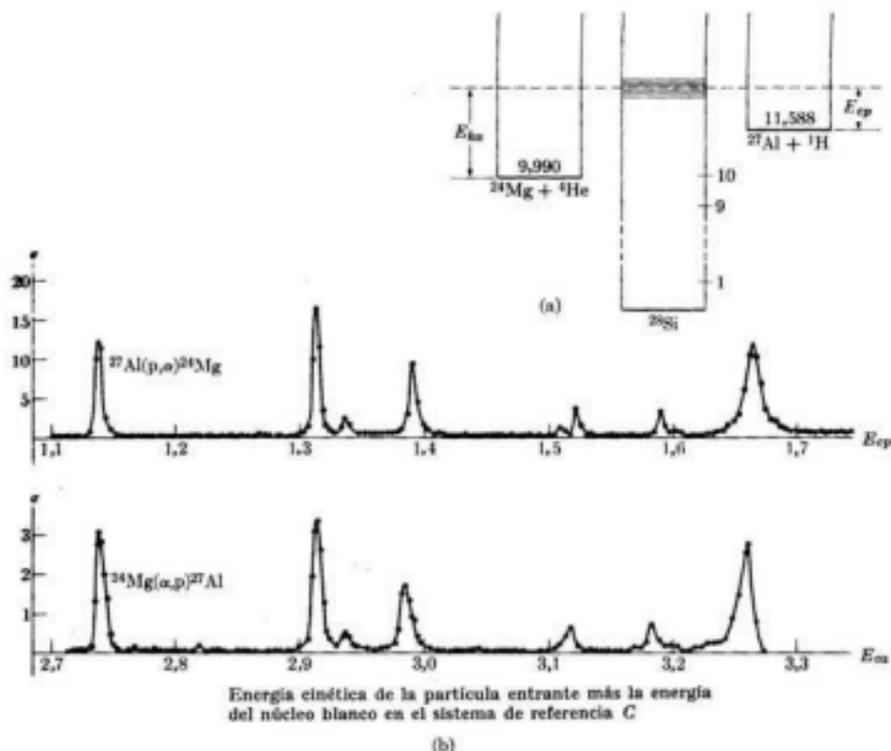


Fig. 8-16. Evidencia del concepto de núcleo compuesto por medio del uso de las reacciones $^{27}\text{Al}(p, \alpha)^{24}\text{Mg}$ y $^{24}\text{Mg}(\alpha, p)^{27}\text{Al}$. El núcleo compuesto es ^{28}Si . (a) Relaciones de energía, (b) sección eficaz de ambas reacciones. [Datos de Kaufmann, Goldberg, Koester y Mooring, *Phys. Rev.* 88, 673 (1952).]

menos la energía de la masa en reposo del ^{28}Si coincida con la energía necesaria para excitar el ^{28}Si a uno de sus estados estacionarios. Esta energía es

$$[M(^{27}\text{Al}) + m_p - M(^{28}\text{Si})]c^2 + E_{kp} = (11,588 + E_{kp}) \text{ MeV},$$

donde E_{kp} es la energía total del sistema $(p, ^{27}\text{Al})$ en el sistema de referencia C. Una vez que el núcleo compuesto está formado, puede descomponerse en $^{24}\text{Mg} + \alpha$. El ^{24}Mg puede estar en su estado fundamental o en un estado excitado; el estado del núcleo ^{24}Mg determina la energía cinética de la partícula α y de los rayos γ observados cuando el núcleo ^{24}Mg pasa a su estado fundamental. La reacción inversa, esto es,



produce un núcleo de ^{28}Si con una energía de excitación dada por

$$[M(^{24}\text{Mg}) + m(^4\text{He}) - M(^{28}\text{Si})]c^2 + E_{ka} = (9,990 + E_{ka}) \text{ MeV},$$

donde E_{2a} es ahora la energía total del sistema (α , ^{24}Mg) en el sistema de referencia C. En la fig. 8-16(a) aparece un bosquejo de las diferentes relaciones de energía.

De nuestra discusión se deduce claramente que las secciones eficaces para las reacciones $^{27}\text{Al}(p, \alpha)^{24}\text{Mg}$ y su inversa, $^{24}\text{Mg}(\alpha, p)^{27}\text{Al}$, deben mostrar el mismo conjunto de resonancias. Sin embargo, para cada resonancia la energía cinética del sistema (α , ^{24}Mg) es sistemáticamente mayor que la del sistema (p , ^{27}Al) en la cantidad $(11,588 - 9,990) \text{ MeV} = 1,598 \text{ MeV}$ cuando las energías están referidas a sus respectivos sistemas C. Esta conclusión está confirmada por los resultados experimentales mostrados en la fig. 8-16(b), que da las secciones eficaces para protones con energías entre 1,1 y 1,8 MeV y para partículas α con energías desde 2,7 hasta 3,4 MeV. El resultado constituye una verificación satisfactoria del concepto de núcleo compuesto y sirve para mostrar el origen de las resonancias en las reacciones nucleares. Es posible determinar los niveles de energía del ^{27}Si en la región de energía considerada, a partir de las energías de los picos que aparecen en la figura.

8.6 Fisión nuclear

La fisión es un importante proceso nuclear. Consiste en la división de un núcleo pesado, tal como el uranio o el torio, en dos fragmentos de tamaño comparable. La fisión como proceso natural es muy rara. (Se cree que el ^{238}U se fisiona espontáneamente con una vida media de aproximadamente 10^{16} años.) El método usual de producir fisión artificialmente es excitar los núcleos. El umbral o energía mínima de activación necesario para fisionar un núcleo pesado es de 4 a 6 MeV. Uno de los medios más efectivos de inducir fisión es por captura de neutrones. En algunos casos la energía de ligadura del neutrón capturado es suficiente para excitar el núcleo por encima del umbral de energía, de modo que tiene lugar la partición en dos fragmentos. Este es, por ejemplo, el caso del núcleo $^{235}_{92}\text{U}$, que experimenta fisión después de capturar un neutrón *lento* (o térmico). El proceso se puede expresar por la ecuación



Para otros casos, a fin de que la fisión ocurra, los neutrones deben tener algo de energía cinética — del orden de 1 MeV — además de la energía de ligadura. Esto es lo que ocurre con el $^{238}_{92}\text{U}$ que se fisiona solamente después de capturar un neutrón *rápido*. La razón de este comportamiento diferente está en algunos detalles de la estructura de los diferentes núcleos, relacionados con el término de apareamiento en la fórmula de masa dada en la ec. (7.12). El núcleo $^{235}_{92}\text{U}$ es par-impar, con 143 neutrones, y cuando captura un neutrón se forma el núcleo par-par $^{236}_{92}\text{U}$. El neutrón capturado se aparea con el último neutrón impar del $^{235}_{92}\text{U}$, liberando la energía de apareamiento $\delta \sim 0,57 \text{ MeV}$. Por otra parte, el $^{238}_{92}\text{U}$ es un núcleo par-par, con 146 neutrones, todos apareados, y cuando captura un neutrón resulta un núcleo par-impar, el $^{239}_{92}\text{U}$ sin energía de apareamiento disponible. Por la misma razón el $^{239}_{94}\text{Pu}$, con 145 neutrones, experimenta fisión por captura de neutrones lentos. La tabla 8-3 da la energía de excitación de algunos núcleos que resultan de la captura neutrónica y sus energías de activación para la fisión; de esta información es posible deducir cuáles núcleos son fisionables por neutrones térmicos.

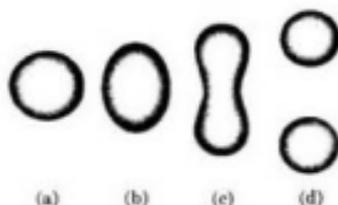
TABLA 8-3 Fisionabilidad de núcleos pesados con neutrones térmicos

Núcleo que hace de blanco	Núcleo compuesto	Energía de excitación, MeV	Umbral de energía, MeV
^{235}U	$[^{235}\text{U}]$	6,6	4,6
^{235}U	$[^{238}\text{U}]$	6,4	5,3
^{235}U	$[^{239}\text{U}]$	4,9	5,5
^{232}Th	$[^{232}\text{Th}]$	5,1	6,5
^{231}Pa	$[^{231}\text{Pa}]$	5,4	5,0
^{237}Np	$[^{237}\text{Np}]$	5,0	4,2
^{239}Pu	$[^{239}\text{Pu}]$	6,4	4,0

TABLA 8-4 Umbrales de energía para la fotofisión

Nucleido	Umbral de fotofisión, MeV
^{235}U	$5,08 \pm 0,15$
^{235}U	$5,31 \pm 0,25$
^{235}U	$5,18 \pm 0,27$
^{239}Pu	$5,31 \pm 0,27$
^{232}Th	$5,40 \pm 0,22$

Un núcleo puede también estar lo suficientemente excitado como para experimentar fisión por absorción de rayos γ de energía igual o mayor que el umbral de energía necesario para la fisión. Este proceso se denomina *fotofisión*. En la tabla 8-4 se da los umbrales de energía para la fotofisión de algunos núcleos.


Fig. 8-17. Deformación de un núcleo según la energía de excitación.

La fig. 8-17 representa el mecanismo que se ha propuesto para explicar la fisión nuclear. Se considera un núcleo cuya forma de equilibrio es esférica, como en la fig. 8-17(a). Al excitarlo en forma apropiada, puede experimentar vibraciones colectivas, como se explicó en la sección 7.10. Cuando la energía de excitación es baja, las oscilaciones en torno a la forma esférica son pequeñas, de modo que en su máxima deformación el núcleo adopta la forma elipsoidal que

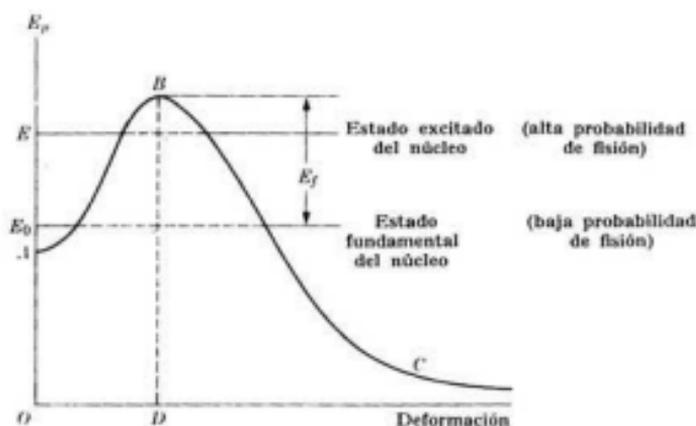


Fig. 8-18. Función de energía potencial para un núcleo sometido a deformación.

se muestra en la fig. 8-17(b). Una vez que la energía de excitación ha sido liberada en forma de rayos γ , el núcleo retorna a la forma de equilibrio. El proceso ha sido, por consiguiente, de captura neutrónica radiativa. Cuando la energía de excitación es mayor, el núcleo se deforma más, como en la fig. 8-17(c). Aun en este caso hay alguna probabilidad de que pueda retornar a la forma original después de la desexcitación por emisión de rayos γ . Pero si la energía de excitación es suficientemente grande, la deformación puede ser de tal magnitud que la repulsión eléctrica entre las dos mitades sea mayor que la interacción nuclear de corto alcance, y existe una mayor probabilidad de que el núcleo, en lugar de retornar a la forma esférica liberando rayos γ , se deforme más y más hasta dividirse en dos fragmentos — como se indica en la fig. 8-17(d) — resultando la fisión.

La fig. 8-18 muestra esquemáticamente la energía potencial de un núcleo en función de su deformación. Para deformaciones menores que un cierto valor crítico, designado con D en la figura, las fuerzas nucleares dominan a las fuerzas eléctricas y la energía potencial aumenta con la deformación, resultando la curva AB . Esta es la región de las oscilaciones estables. Para deformaciones mayores que D , las fuerzas eléctricas dominan a las nucleares, y la energía potencial disminuye cuando la deformación aumenta, resultando la curva BC , la cual corresponde a la división en dos fragmentos; éstos se separan debido a su repulsión coulombiana. Si E_0 se refiere al estado fundamental del núcleo, el umbral de fisión es E_f . Esta curva debe ser tomada solamente en sentido cualitativo.

Si el núcleo está inicialmente en un estado con energía menor que la correspondiente a B tal como E_0 o E , experimenta oscilaciones sin fisión. La barrera de potencial evita la fisión espontánea. El núcleo puede, empero, penetrar a través de la barrera de potencial, resultando fisión espontánea. La probabilidad

de atravesarla es relativamente baja cuando el núcleo está en el estado fundamental, de modo que la fisión espontánea es un proceso bastante improbable. Sin embargo, la penetrabilidad de la barrera aumenta con la energía de excitación del núcleo, haciendo que la fisión sea más probable. Si el núcleo tiene una energía de excitación mayor que E_p , obviamente experimenta fisión. Por lo tanto, la fisión por captura neutrónica ocurrirá si la energía de ligadura más la energía cinética del neutrón capturado son suficientes para que el núcleo sobrepase la barrera de potencial. Como dijimos anteriormente si la energía de ligadura es por sí sola suficiente, ocurre la fisión por neutrones lentos. Para el ^{238}U la altura de la barrera de potencial es de unos 5,3 MeV, por lo que este valor es la energía crítica necesaria para producir la fisión del ^{238}U por captura de neutrones. Es importante observar, no obstante, que no hay un solo umbral de energía o una deformación crítica única; estas cantidades dependen del modo de excitación de los núcleos y del estado inicial de los mismos.

La captura de un neutrón no conduce necesariamente a fisión aunque haya energía disponible, porque (como se explicó previamente), antes que el núcleo tenga tiempo de dividirse, puede liberar su energía de excitación en forma de rayos γ , resultando captura radiativa en lugar de fisión. Por consiguiente, cuando tiene lugar la captura del neutrón, dos procesos competitivos entran en juego: captura radiativa (n, γ) y fisión (n, f). Cada uno de ellos está caracterizado por su propia sección eficaz — designada por $\sigma(n, \gamma)$ y $\sigma(n, f)$ respectivamente — que depende de la energía del neutrón. Los valores de estas secciones eficaces están dados en la tabla 8-5 para neutrones con una velocidad de 2200 m s⁻¹, que corresponde a la velocidad media de los neutrones térmicos a temperatura ambiente. En la última columna aparece el número medio de neutrones liberados por fisión.

TABLA 8-5 Propiedades de algunos materiales fisionales por neutrones térmicos

Núcleo	$\sigma(n, f)$, barns	$\sigma(n, \gamma)$, barns	ν
^{235}U	525	53	2,51
^{238}U	577	101	2,44
^{239}Pu	742	286	2,89

La fisión no es un proceso simétrico; en general los dos fragmentos tienen números mágicos desiguales. La división con más probabilidad es la que da lugar a fragmentos con números mágicos próximos a 95 y 135 respectivamente, como se ilustra en la fig. 8-19, que da los productos de fisión del ^{235}U , el ^{235}U y el ^{239}Pu para neutrones térmicos. Esto también se puede ver en la fig. 7-1, donde los nucleidos radioactivos por encima de la región de estabilidad son particularmente abundantes alrededor de $A = 90$ y $A = 135$, asociados con $N = 50$ y $N = 82$, respectivamente. La razón de esta asimetría parece ser la tendencia de los núcleos pesados a dividirse en fragmentos que tienen capas neutrónicas cerradas alrededor de los números mágicos 50 y 82, respectivamente.

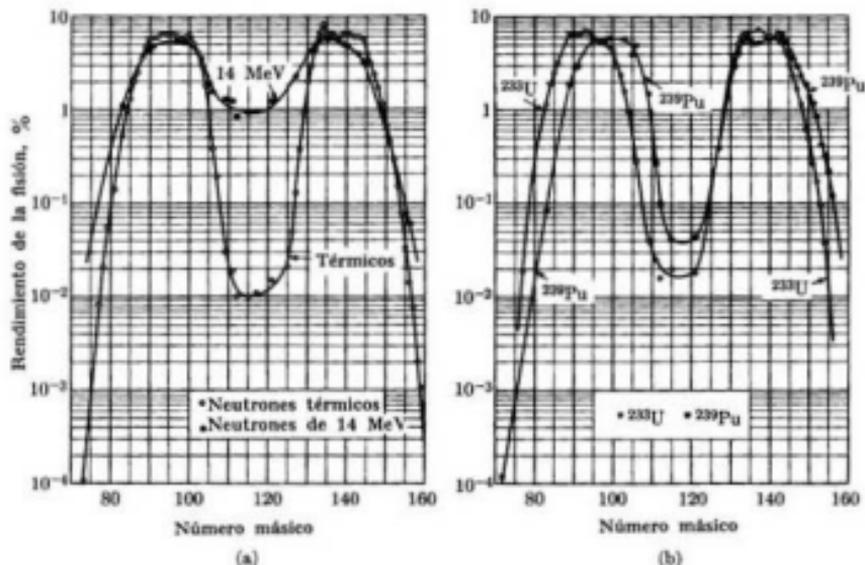


Fig. 8-19. (a) Rendimiento de la fisión térmica y rápida del ^{235}U . (b) Rendimiento de la fisión térmica del ^{235}U y ^{239}Pu . [Datos tomados de S. Katcoff, *Nucleonics* 16, N.º 4, 78 (abril 1958).]

Hay dos propiedades que hacen de la fisión un proceso muy importante para las aplicaciones prácticas: una es que *en la fisión se liberan neutrones* y la otra es que *en la fisión se libera energía*.

Podemos ver que hay neutrones liberados en la fisión examinando la región de estabilidad en la fig. 7-1. Para los núcleos más pesados, tales como el uranio, el cociente entre neutrones y protones es $N/Z \sim 1,55$. Este, desde luego, será aproximadamente el cociente para los fragmentos resultantes. Pero en la misma figura vemos que para núcleos estables de masa media, el cociente es $N/Z \sim 1,30$. Esto significa que los fragmentos resultantes tienen demasiados neutrones y, por lo tanto, yacen por encima de la región de estabilidad. Por consiguiente, tienen radioactividad β^- . En efecto, uno de los métodos de producir isótopos con radioactividad β^- es la fisión del uranio. Sin embargo, el exceso de neutrones es tan grande que algunos de ellos son liberados en el momento de la fisión. El número medio de neutrones liberados por fisión (designado por ν) está dado en la tabla 8-5 para algunos nucleidos, suponiendo que la fisión se induce por medio de neutrones lentos.

La energía liberada en la fisión nuclear puede obtenerse de la energía de ligadura por nucleón, representada en la fig. 7-5. Para un núcleo pesado, la energía de ligadura es de aproximadamente 7,5 MeV por nucleón, pero para los núcleos de masa media, correspondientes a los dos fragmentos, es cerca de 8,4 MeV por nucleón, con lo cual resulta un aumento de la energía de ligadura por nucleón de

más o menos 0,9 MeV, o un total de 200 MeV aproximadamente para todos los nucleones en un núcleo de uranio. Este es entonces el orden de magnitud de la energía liberada en la fisión de un átomo de uranio. La energía liberada aparece como energía cinética de los fragmentos, de los neutrones liberados y de los productos de desintegración (electrones, fotones y neutrinos) resultantes de la desintegración β de los fragmentos radioactivos. Como los neutrinos emitidos en la desintegración β (así como también unos pocos fotones) normalmente escapan del material en el cual la fisión tiene lugar, sólo se puede retener unos 185 MeV por átomo, energía todavía considerablemente mayor que la liberada en una reacción química (que es del orden de 3 a 10 eV por átomo).

Por ejemplo, la energía liberada en la fisión del ^{235}U se distribuye, en promedio, como sigue:

Energía cinética de los fragmentos	167 MeV
Energía cinética de los neutrones de fisión	5
Energía de los rayos γ (radiados en el instante de la fisión)	7
Energía de los electrones de desintegración β^-	5
Energía de desintegración γ de los fragmentos	5
Energía de los neutrinos de desintegración β^-	11
Energía total	<u>200 MeV</u>

La distribución exacta de la energía varía, desde luego, de un caso a otro.

El hecho de que por cada neutrón absorbido para producir una fisión, son emitidos más de dos neutrones (en promedio) sugiere la posibilidad de una *reacción en cadena*. Esto es, si las cosas se arreglan de tal modo que después de cada fisión al menos uno de los nuevos neutrones produzca otra fisión, y de los neutrones liberados en ésta, al menos uno produzca una fisión, y así sucesivamente, entonces resulta un proceso autosostenido o reacción en cadena. (Las reacciones en cadena son muy comunes en química. La combustión es una reacción en cadena. Para que una sustancia arda se necesita que una de sus moléculas tenga una cierta energía de excitación de modo que pueda combinarse con una molécula de oxígeno. Pero una vez que una de las moléculas se ha excitado y combinado con el oxígeno, la energía liberada es suficiente para excitar más moléculas del combustible, y en consecuencia la combustión prosigue.) Si en cada etapa del proceso más de un neutrón por fisión produce una nueva fisión, el número de éstas crece exponencialmente resultando una reacción en cadena divergente. Esto es lo que sucede en una bomba atómica. Pero si en promedio sólo un neutrón produce una nueva fisión, resulta una reacción en cadena uniforme que se puede mantener bajo condiciones controladas. Es lo que sucede en un *reactor nuclear*.

En los reactores nucleares *rápidos* se utiliza los neutrones con la misma energía con la cual son liberados en el proceso de fisión. En los reactores nucleares *térmicos* primero se reduce la velocidad de los neutrones haciéndolos chocar con los átomos de alguna otra sustancia, llamada *moderador*, hasta que alcanzan el equilibrio térmico con la sustancia. Se dice entonces que los neutrones son *térmicos*.

El moderador debe ser una sustancia que tenga pequeño número másico y pequeña sección eficaz de captura neutrónica. El agua, el agua pesada y el grafito son las sustancias que más se usan como moderadores.

La energía liberada en un reactor nuclear se extrae por medio de un fluido circulante llamado *refrigerante*. En los reactores de potencia esta energía se usa para calentar o para generar potencia eléctrica. En los reactores de investigación los neutrones son empleados en diferentes clases de experimentos o en la producción de isótopos.

EJEMPLO 8.13. Determinación de la energía liberada cuando el ^{235}U y el ^{238}U capturan un neutrón, y la posibilidad de fisión del ^{235}U y del ^{238}U por neutrones térmicos.

Solución: El Q para la reacción de captura de un neutrón por un átomo de número másico A es

$$Q = (M_A + m_n - M_{A+1})c^2 = 931,48(M_A + m_n - M_{A+1}) \text{ MeV},$$

donde las masas en la segunda expresión deben ser expresadas en uma, y todas son masas atómicas.

Considerando el caso del ^{235}U el cual, después de capturar el neutrón se convierte en ^{236}U , tenemos $M_A(^{235}\text{U}) = 235,1170$ uma y $M_{A+1}(^{236}\text{U}) = 236,1191$ uma. Usando $m_n = 1,0090$ uma, encontramos que $Q = 6,43$ MeV. Por otra parte, la barrera de potencial del ^{235}U para la fisión es más o menos de 5,3 MeV. Por consiguiente, la energía de excitación del ^{236}U que se forma cuando el ^{235}U captura un neutrón, es mayor que la altura de la barrera de potencial para la fisión. Concluimos entonces que el núcleo ^{236}U que resulta cuando el ^{235}U captura un neutrón, experimenta fisión aun si el neutrón es tan lento que su contribución a la energía cinética es despreciable.

Considerando el caso del ^{238}U , que se convierte en el ^{239}U después de capturar un neutrón, tenemos $M_A(^{238}\text{U}) = 238,1249$ uma y $M_{A+1}(^{239}\text{U}) = 239,1287$ uma. Luego, el Q de la reacción de captura es 4,85 MeV, que es menor que la altura de la barrera de fisión del ^{238}U en cerca de 0,6 MeV. Por lo tanto, no se produce fisión a menos que el neutrón capturado tenga suficiente energía cinética para totalizar la energía necesaria para ello. Se ha encontrado experimentalmente en el laboratorio que la mínima energía cinética de los neutrones debe ser de alrededor de 1 MeV para fisiónar el ^{238}U .

8.7 Fusión nuclear

El proceso inverso de la fisión nuclear es la *fusión* nuclear. Esta consiste en la formación de un núcleo más pesado a partir de dos núcleos que chocan. Debido a la repulsión coulombiana entre los núcleos, éstos deben tener una cierta energía cinética para vencer la barrera de potencial coulombiana y llegar a situarse lo suficientemente cerca uno del otro a fin de que las fuerzas nucleares produzcan la acción consolidante necesaria. Este problema no se presenta en la fisión nuclear debido a que el neutrón carece de carga eléctrica y, por lo tanto, puede aproximarse al núcleo aun cuando su energía cinética sea muy pequeña o prácticamente nula. Como la barrera coulombiana aumenta con el número atómico, la fusión nuclear ocurre a energías cinéticas razonables sólo en núcleos muy ligeros con bajo número atómico (carga nuclear pequeña).

Estimaremos ahora la energía cinética necesaria para poner en contacto dos núcleos de números atómicos Z_1 y Z_2 . En la expresión de la energía potencial eléctrica de los dos núcleos ($E_p = Z_1 Z_2 e^2 / 4\pi\epsilon_0 r$) tomemos r igual a la suma de los radios nucleares, o aproximadamente 10^{-14} m. Entonces obtenemos $E_p \sim 2,4 \times 10^{-14} Z_1 Z_2 \text{ J} = 1,5 \times 10^5 Z_1 Z_2 \text{ eV} = 0,15 Z_1 Z_2 \text{ MeV}$. Esto da la altura de la barrera de potencial y, en consecuencia, la energía cinética inicial mínima relativa de los dos núcleos, necesaria para que ocurra la fusión. Si las partículas en colisión no tienen energía cinética igual o mayor que E_p , la fusión no puede ocurrir. Sin embargo, a energías ligeramente inferiores que E_p hay alguna probabilidad de fusión por penetración de la barrera coulombiana. La energía cinética media de un sistema de partículas que tienen una temperatura T es del orden de kT , o cerca de

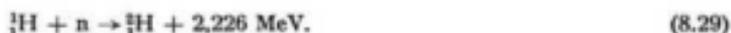
$$8,6 \times 10^{-5} T \text{ eV,}$$

donde T está expresado en grados absolutos. Luego la energía de 10^5 eV corresponde a la temperatura de más o menos 10^9 K, la cual es mucho mayor que las temperaturas que se cree existen en el centro del sol. Aún así, la fusión es uno de los procesos más importantes que ocurren en el sol, y es su principal fuente de energía. La fusión tiene lugar entre el número relativamente pequeño de núcleos ligeros que tienen energía bien por encima de la energía media a la temperatura del sol.

Concluimos que para que tenga lugar la fusión de un gran número de núcleos, es necesario que los núcleos que reaccionan tengan una temperatura mucho mayor que las generadas por las más exotérmicas de las reacciones químicas. Estas temperaturas extremas crean un problema: el recipiente para contener las partículas en reacción, ya que no se conoce ningún material que soporte tales temperaturas. Además, a estas temperaturas los núcleos están privados de todos sus electrones circundantes (debido a las colisiones) y la sustancia consiste en una mezcla neutra de núcleos cargados positivamente y electrones negativos llamada *plasma*. Se ha intentado contener este plasma por medio de campos magnéticos. Además, cuando la intensidad de los campos magnéticos crece rápidamente, el plasma se comprime adiabáticamente y su temperatura aumenta hasta que comienza la fusión. Se han construido varios dispositivos ingeniosos que ejecutan estas dos funciones: contener las partículas y elevar su temperatura.

Refiriéndonos a la fig. 7-6, podemos ver que en la fusión nuclear de los núcleos ligeros ($A < 20$) se libera energía. Cuando dos núcleos livianos se funden en uno más pesado la energía de ligadura del núcleo producto es mayor que la suma de las energías de ligadura de los núcleos separados, y esto da lugar a una liberación de energía. Si las condiciones son apropiadas, la energía liberada en la fusión es suficiente para excitar otros núcleos, originándose una reacción en cadena. Esta se convierte en una explosión nuclear por un mecanismo similar al de una explosión química, pero en este caso, dicha explosión se debe a fuerzas nucleares en lugar de eléctricas. La reacción en cadena también puede ocurrir bajo condiciones controladas, aunque todavía no se ha construido un reactor de fusión completamente satisfactorio.

La reacción de fusión más simple es la captura de un neutrón por un protón (núcleo de hidrógeno) para formar un deuterón:



La gran ventaja de esta reacción es que no hay barrera de potencial eléctrico que vencer. Como se verá en la próxima sección, los científicos suponen que esta reacción de fusión desempeñó un importante papel en las primeras etapas tempranas de la evolución del universo. Actualmente, sin embargo, esta reacción de fusión no tiene relativamente importancia debido a la falta de un número suficiente de neutrones libres. No obstante, la reacción (8.29) ocurre cuando los neutrones provenientes de un reactor nuclear se difunden a través de una sustancia hidrogenada, tal como agua o parafina.

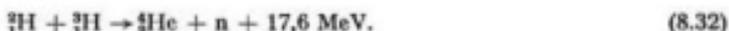
Otra reacción de fusión simple ocurre entre dos protones. Como un núcleo diprotón no existe, el proceso está acompañado por la conversión de uno de los protones en un neutrón a expensas de la energía de ligadura del deuterón resultante, y la emisión de un positrón y un neutrino. Esto es,



Una tercera reacción de fusión importante es la del hidrógeno y el deuterio, resultando un núcleo de tritio:



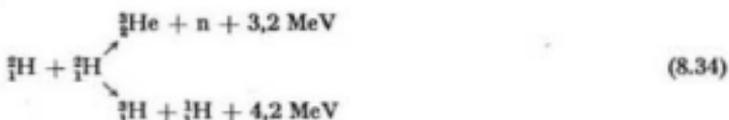
Una reacción de fusión que tiene una sección eficaz grande y libera una gran cantidad de energía ocurre entre el deuterio y el tritio:



Otra posible reacción de fusión con el deuterio, que involucra el ${}^3\text{He}$, es



Empero, como no se puede disponer fácilmente de tritio y de ${}^3\text{He}$, la reacción de dos núcleos de deuterio o deuterones es de más importancia práctica. Tiene la ventaja adicional de usar una sola clase de núcleos. Los productos resultantes pueden ser diferentes; ocurren dos posibilidades con más o menos la misma probabilidad:

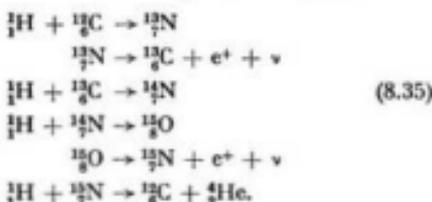


Las secciones eficaces para los procesos (8.32) y (8.34) están ilustradas en la fig. 8-20.

Aunque la energía liberada en una sola reacción de fusión es mucho menor que la liberada en una sola reacción de fisión, la energía por unidad de masa es mayor

(debido a que el deuterio es un combustible muy liviano). Para la reacción de fusión deuterio-deuterio, la energía es de unos 2×10^{14} J por kilogramo de combustible. Esto es más del doble del valor para la fisión del uranio. Debido a la abundancia relativa del deuterio (cerca de un átomo de deuterio en aproximadamente 7000 átomos de hidrógeno), y el costo relativamente bajo de extracción del deuterio del agua (cerca de 30 centavos de dólar por gramo), los científicos predicen que — una vez que un dispositivo para fusión controlada llegue a ser práctico — el proceso de fusión suministrará una fuente casi ilimitada de energía.

Las reacciones de fusión son las fuentes de energía del sol y otras estrellas. Uno de los más importantes procesos de fusión es el ciclo de Bethe o del carbono, que es equivalente a la fusión de cuatro protones en un núcleo de helio. El ciclo ocurre en las siguientes etapas:



Sumando todas las reacciones y cancelando los términos comunes, tenemos

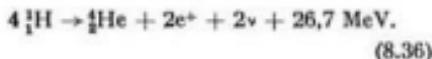
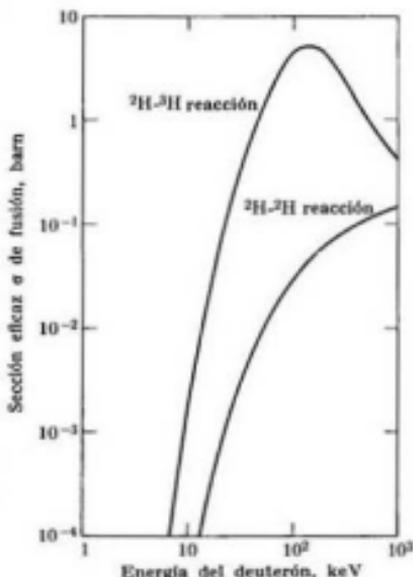


Fig. 8-20. Secciones eficaces de las reacciones de fusión deuterón-deuterón y deuterón-tritón en función de la energía del deuterón. [Datos tomados de A. Bishop, *Project Sherwood* (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1958).]



La energía neta liberada en el proceso es 26,7 MeV, o sea cerca de $6,6 \times 10^{14}$ J por kg de ${}^1_1\text{H}$ consumido. Observar que el átomo de carbono actúa como catalizador, porque se regenera al final del ciclo. El tiempo necesario para que un átomo de carbono efectúe este ciclo en el sol es de más o menos 6×10^6 años. En la fig. 8-21 se ilustra esquemáticamente este ciclo. Otra reacción de fusión que ocurre en las estrellas es el ciclo de Critchfield o protón-protón, que consta de los siguientes pasos:



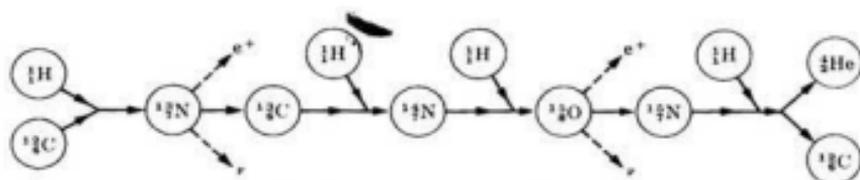


Fig. 8-21. Ciclo del carbono.

Combinadas en forma adecuada, estas reacciones también dan la ec. (8.36). El período del ciclo protón-protón en el sol es de aproximadamente 3×10^9 años. En la fig. 8-22 se muestra esquemáticamente el ciclo.

Como se explicará en la próxima sección, los astrofísicos piensan que el ciclo protón-protón predomina sobre el ciclo del carbono en el sol y estrellas de estructura similar, pero que en muchas estrellas jóvenes la situación es inversa, siendo el ciclo del carbono más importante. En estrellas más viejas con temperaturas mayores, se cree que tienen lugar otros tipos de reacciones de fusión.

Se estima que el proceso (8.36) está ocurriendo en el sol a razón de $5,64 \times 10^{11}$ kg por segundo de hidrógeno que se fusiona en helio, liberando una energía de $3,7 \times 10^{25}$ W. De ésta, sólo unos $1,8 \times 10^{14}$ W llegan a la tierra, principalmente en forma de radiación electromagnética; empero, esta cantidad es todavía 10^5 veces mayor que toda la potencia industrial generada en la tierra.

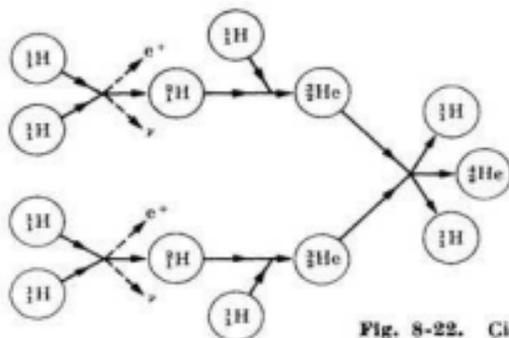


Fig. 8-22. Ciclo protón-protón.

8.8 Origen de los elementos

Consideraremos ahora la cuestión interesante e importante del origen de los elementos. Por origen significamos el mecanismo por el cual el universo llegó a la composición actual suponiendo la existencia de cierta materia primaria. Lo que digamos será meramente especulativo, ya que la evidencia disponible es incompleta.

Una de las claves usadas en nuestra especulación es la abundancia relativa en el universo de los diferentes elementos químicos, como se muestra en la fig. 8-23,

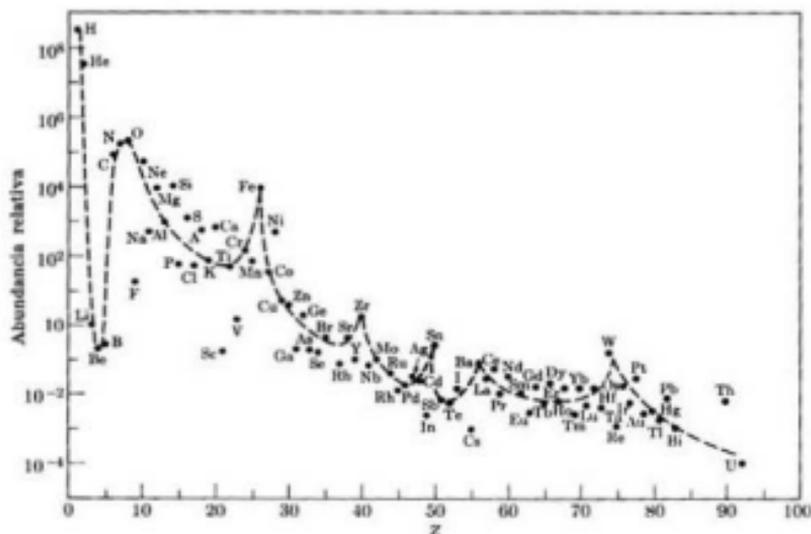


Fig. 8-23. Abundancia de los elementos en el cosmos. [Datos tomados de H. Urey y H. Brown, *Phys. Rev.* 88, 248 (1952).]

y la otra es su composición isotópica. Como se ve en la figura, el más abundante es el hidrógeno, seguido por el helio. Después que la abundancia disminuye violentamente para el litio, berilio y boro, tiende a seguir un decrecimiento regular, nivelándose para $Z > 35$ ó $A > 80$, pero con algunos máximos pronunciados especialmente para el hierro y nucleidos vecinos. Los elementos terminan con el $Z = 92$, ya que la cantidad de núcleos con $Z > 92$ existentes es prácticamente nula, aunque han sido producidos en el laboratorio hasta $Z = 103$. En cuanto a la composición isotópica, los elementos más livianos son los más ricos en aquellos isótopos estables con menor contenido de neutrones, mientras que los núcleos más pesados son los más ricos en isótopos con alto contenido de neutrones. Además, los núcleos de A par son más abundantes que los de A impar. Otra característica interesante es que no se encuentra en la naturaleza núcleos con $A = 5$ u 8 .

Se ha encontrado que la abundancia relativa y composición isotópica son las mismas no sólo en muestras tomadas en varias partes y profundidades de la corteza terrestre sino también en las tomadas en meteoritos que han llegado a la tierra desde el espacio externo. Esta composición constante sugiere que, al menos en nuestra galaxia, todos los elementos se formaron por aproximadamente el mismo proceso. El "comienzo" del proceso se estima haber ocurrido hace aproximadamente $(8 \pm 2) \times 10^9$ años. Este número se obtuvo tomando en cuenta varias consideraciones astrofísicas, tales como la velocidad de alejamiento de las galaxias y el análisis de las cadenas radioactivas naturales.

Han sido propuestas muchas teorías para explicar esta composición general del universo, pero ninguna de ellas es completamente satisfactoria. Actualmente, la más aceptable (atribuida a Fowler, Hoyle, Burbidge y Greenstein, entre otros) postula que los elementos se sintetizan en las estrellas en condiciones variables. La secuencia de procesos que contempla esta teoría es como sigue: supongamos que inicialmente (esto es, en el "comienzo") haya una gran masa de hidrógeno en estado gaseoso (quizá con algunos neutrones libres). Debido a fluctuaciones estadísticas e interacciones gravitacionales, parte de este hidrógeno puede condensar en cúmulos o estrellas, alcanzando una densidad del orden de 10^5 kg m^{-3} . En el proceso de condensación hay una transformación de energía potencial gravitacional en energía cinética, con lo cual resulta un aumento de la temperatura del gas (a unos 10^7 K). A estas temperaturas es posible el ciclo protón-protón de la ec. (8.37). Comienza entonces a formarse helio. Es posible que como subproductos de las reacciones del ciclo protón-protón se forme cantidades relativamente pequeñas de núcleos con masas atómicas mayores. Por ejemplo, el ${}^7_3\text{Li}$ se produce por el proceso



Parte del litio se transforma de nuevo en helio en la reacción



Otras reacciones de fusión, tales como (8.29), (8.31) y (8.32), pueden también tener lugar, pero en cantidad mucho menor.

Como el helio tiene mayor masa que el hidrógeno, los núcleos de helio producidos en el ciclo protón-protón son transportados al centro (o carozo) de la estrella por acción gravitacional. La densidad del carozo puede entonces llegar a 10^8 kg m^{-3} . La ganancia en energía cinética resultante de los núcleos de helio del carozo aumenta la temperatura de éste (hasta valores de 10^8 K). La temperatura en la superficie de una estrella en cuyo interior se haya acumulado gran cantidad de núcleos de helio aumenta y, en consecuencia, su color cambia. El aumento de temperatura y densidad de los núcleos de helio en el centro aumenta la posibilidad de producción de ${}^8_4\text{Be}$ por la reacción de la fusión de helio



seguida, en más o menos 10^{-16} s , por el proceso de desintegración



Sin embargo, debido a la concentración relativamente grande de helio, es posible que otro núcleo de este elemento sea capturado antes de ocurrir esta desintegración, con lo cual resulta la reacción



Alternativamente, los productos intermedios de la cadena protón-protón, ${}^3_1\text{H}$ y ${}^7_3\text{Li}$, pueden ser capturados por el berilio, formando ${}^{10}_4\text{B}$ y ${}^{11}_5\text{B}$, respectivamente, aunque

en mucha menor cantidad que el ^{12}C . Muchas otras reacciones menos probables pueden tener lugar, resultando otros elementos ligeros.

La cadena de procesos que acabamos de describir explica cómo pueden ser saltados los vacíos en $A = 5$ y 8 . Este mecanismo también permite comprender la escasez de litio, berilio y boro, y explica además la gran abundancia relativa del ^{13}C . La producción sucesiva de núcleos de mayor masa tales como ^{16}O , ^{20}Ne y otros, es posible por el mismo proceso de captura del helio. La única limitación a la captura del helio es la cantidad de energía que el núcleo de ^4He necesita para vencer la repulsión coulombiana de los núcleos más pesados. La fig. 8-24 es una representación esquemática de la serie de procesos propuestos por esta teoría de la captura (o combustión) del helio.

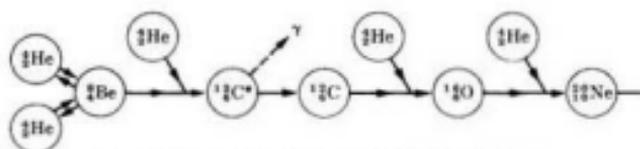
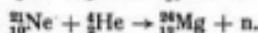


Fig. 8-24. Proceso de combustión del helio.

En la producción de núcleos más pesados se usa grandes cantidades de helio y tiene lugar una contracción gravitacional adicional de la estrella, conduciendo a densidades del carozo del orden de 10^9 kg m^{-3} (con un aumento correspondiente en la energía cinética de los núcleos y una temperatura del carozo que se aproxima a 10^9 K). Bajo tales condiciones de densidad muy alta y temperatura extrema, son posibles otras reacciones nucleares que pueden producir núcleos de mayor número másico, hasta el grupo del hierro (alrededor de $A = 60$), pero no más pesados, debido a las limitaciones energéticas mencionadas anteriormente. Se puede producir neutrones libres en algunos casos a través de reacciones (α, n), tales como



Estos neutrones, junto con algunos de los originales (o primarios) que no se han desintegrado en protones, están disponibles para extender la producción de núcleos hasta números másicos mayores — esto es, núcleos que están más allá del grupo del hierro — por captura neutrónica en vez de captura de partículas cargadas. En muchos casos las reacciones por captura neutrónica dan lugar a la desintegración β^- (como hemos visto, cuando un núcleo adquiere demasiados neutrones, se desintegra por emisión de electrones). El núcleo resultante tiene un número atómico mayor después de la desintegración β^- y la cadena puede de este modo avanzar hacia mayores valores de Z . Desde luego, a medida que el tiempo transcurre, el número de neutrones libres disminuye. Esto explica en-

tonces el que los elementos más pesados sean relativamente menos abundantes, ya que su producción depende casi enteramente de la captura neutrónica.

Como el "encendido" inicial de una estrella está basado en fluctuaciones estadísticas, no se puede esperar que todas ellas sigan la misma secuencia con igual rapidez, y por lo tanto las estrellas se encuentran actualmente en diferentes etapas de evolución. El sol mismo está todavía preponderantemente en la primera etapa de evolución; se supone que su composición es 81,76 % de hidrógeno, 18,17 % de helio y 0,07 % para los elementos restantes. Las estrellas en las cuales el ciclo protón-protón aparece actualmente como el proceso dominante se llaman *estrellas de la secuencia principal*. Aquellas en las que actualmente el proceso más importante parece ser la combustión del helio se denominan *gigantes rojas* debido al color que presentan. Se supone que en muchas estrellas las tres etapas de la síntesis nuclear propuesta por esta teoría tienen lugar simultáneamente, con hidrógeno quemándose en la superficie, reacciones de helio prevaleciendo en una capa intermedia (y más caliente) y elementos pesados produciéndose en el carozo de la estrella, más caliente aún. Las estrellas que han evolucionado del modo predicho por esta teoría se denominan *estrellas de primera generación*.

En algunos casos las inestabilidades que se suceden durante la evolución y envejecimiento de una estrella pueden conducir a la eyección de parte del material de su interior al espacio interestelar, donde se mezcla con el hidrógeno no condensado y el polvo del espacio exterior. Más tarde, parte de esta mezcla se condensa en *estrellas de segunda generación (y posterior)*. Es en estas estrellas más jóvenes que el ciclo del carbono, ec. (8.35), juega un papel importante.

La teoría del origen de los elementos es mucho más compleja de lo que pueda indicar esta revisión limitada, pero no podemos explorar este tema más detalladamente aquí. Lo que hemos dicho será suficiente para que el estudiante aprecie las ideas expuestas en esta área interesante, incitante y creativa de la física.

Bibliografía

1. "Resource Letter NR-1 on Nuclear Reactions", T. Griffy, *Am. J. Phys.* **35**, 297 (1967)
2. "The Discovery of Nuclear Fission", H. Graetzer, *Am. J. Phys.* **32**, 9 (1964)
3. "A Study of the Discovery of Fission", E. Sparberg, *Am. J. Phys.* **32**, 2 (1964)
4. "Nuclear Fission", R. Leachman, *Sci. Am.*, agosto de 1965, pág. 49.
5. "Thermonuclear Reactions", G. Thomson, *Am. J. Phys.* **28**, 221 (1960)
6. "Recent Developments in Controlled Fusion", A. Bishop, *Physics Today*, marzo de 1964, pág. 19
7. "The origin of the Elements" por W. A. Fowler y "The Structure of Nuclei" por V. Weisskopf en *The Scientific Endeavor*. Rockefeller Institute Press, New York, 1965
8. *Structure of Matter*, W. Finkelburg. Academic Press, New York, 1964, cap. V, secs. 9-19

9. *Principles of Modern Physics*, R. Leighton. McGraw-Hill, New York, 1959, caps. 16 y 17
10. *Física nuclear*, I. Kaplan. Aguilar, Madrid, 1961
11. *Introducción al núcleo atómico*, J. Cuninghame. Ed. Alhambra, Madrid, 1966
12. *Radioactivity and Its Measurement*, W. Mann y S. Garfinkel. Van Nostrand Momentum Books, Princeton, N. J., 1966
13. *A Source Book in Physics*, W. Magie. Harvard University Press, Cambridge, Mass., 1963; pág. 613 (Becquerel); pág. 617 (P. y M. S. Curie)

Problemas

8.1 La vida media del ^{90}Sr es de 28 años. Determinar: (a) la constante de desintegración del ^{90}Sr , (b) la actividad de 1 mg de ^{90}Sr en curies y en núcleos por segundo, (c) el tiempo necesario para que 1 mg se reduzca a 250 μg , (d) la actividad al tiempo calculado en (c).

8.2 Una muestra de material radioactivo recién preparada se desintegra en un nucleido estable y se mide su actividad cada 20 segundos. Se han medido las siguientes actividades (en μCi), comenzando en $t = 0$ s: 410; 190; 90; 43; 20; 9,6; 4,5; 2,15; 1,00; 0,48; 0,23. (a) Hacer un gráfico del logaritmo natural de la actividad en función del tiempo. (b) Hallar la constante de desintegración y la vida media de la muestra. (c) ¿Cuántos núcleos radioactivos había en la muestra al instante $t = 0$ s?

8.3 Un material está compuesto de dos sustancias radioactivas diferentes cuyas vidas medias son 2 hrs y 20 min, respectivamente. Inicialmente hay un mCi de la primera sustancia y 9 mCi de la segunda. (a) Usando papel semilogarítmico, hacer el gráfico de la actividad de cada sustancia y también de todo el material en función del tiempo. (b) ¿En qué instante la actividad total es de 1 mCi? (c) ¿En qué instante la actividad de la sustancia de vida más corta es el 1 % de la de vida más larga?

8.4 Se ha medido la actividad de un material cada 30 s y se ha encontrado los siguientes valores (en cuentas por minuto): 1167; 264; 111; 67,0; 48,3; 37,1; 30,0; 24,6; 20,9; 18,1; 15,7; 13,9; 12,3; 11,1; 9,84; 8,85; 7,83; 7,02; 6,26; 5,60; 5,00. (a) Hacer el gráfico del logarit-

mo de la actividad en función del tiempo. (b) Determinar cuántas sustancias radioactivas están presentes y calcular la vida media y constantes de desintegración de cada una. [Sugerencia: restar primero la actividad de la sustancia de vida máxima, extendiendo la cola de la curva en línea recta hasta el instante cero. Hacer el gráfico de la actividad restante y repetir el procedimiento hasta obtener una línea recta, que corresponde a la sustancia de vida más corta.]

8.5 Probar que la vida media de una sustancia radioactiva, \bar{T} , está dada por

$$\bar{T} = \frac{1}{N_0} \int_{N_0}^0 t dN = \frac{1}{\lambda}$$

8.6 Resolver el ejemplo 8.2, suponiendo que hay inicialmente N_0 núcleos de la sustancia radioactiva. Considerar particularmente los casos en los cuales $N_0 < g/\lambda$ y $N_0 > g/\lambda$.

8.7 Refiriéndose al ejemplo 8.3, probar que el número de núcleos de la sustancia C (que es un nucleido estable) en función del tiempo, está dado por

$$N_C = \frac{N_{A0}}{\lambda_B - \lambda_A} \times [\lambda_B(1 - e^{-\lambda_A t}) - \lambda_A(1 - e^{-\lambda_B t})]$$

8.8 Refiriéndose a la fig. 8.4, mostrar que el instante en el cual el número de núcleos de la sustancia B es máximo es igual a

$$\frac{\ln(\lambda_B/\lambda_A)}{\lambda_B - \lambda_A}$$

8.9 Un aro de pistón de acero con una masa de 25 g se irradia en un reac-

tor nuclear hasta que su actividad es de 9,0 mCi (debido a los nucleidos de ^{59}Fe que tienen una vida media de $3,90 \times 10^8$ s). Dos días más tarde el aro de pistón se instala en un motor de prueba. Después de una prueba de 10 días, se saca el aceite del cárter y se estudia su actividad debida al ^{59}Fe . La investigación muestra una actividad media de $9,8 \times 10^3$ desintegraciones por segundo en una muestra de 200 cm³ de aceite. Calcular la masa de hierro desgastado del aro de pistón suponiendo que el cárter tiene una capacidad de 7,6 litros.

8.10 La actividad del carbono encontrado en especímenes vivientes es de 0,007 μCi por kilogramo, debido a la presencia del ^{14}C . El carbón proveniente de un fogón situado en un campamento indio tiene una actividad de 0,0048 μCi kg⁻¹. La vida media del ^{14}C es de 5760 años. Calcular el año en que este campamento fue usado por última vez.

8.11 Hacer el gráfico del logaritmo de la constante de desintegración en función de la energía para las desintegraciones α que aparecen en la tabla 8-1. Mostrar que los puntos yacen aproximadamente sobre una línea recta, de modo que $\log \lambda = aE_\alpha + b$. Determinar las constantes a y b que dan el mejor ajuste.

8.12 Calcular la energía de la partícula α liberada cuando el ^{144}Nd se desintegra en ^{140}Ce . Calcular además la energía de retroceso del núcleo residual. Las masas en reposo son 143,9100 uma y 139,9054 uma, respectivamente.

8.13 En una cámara de niebla se observa una colisión elástica entre una partícula α y un núcleo de masa desconocida. La partícula α se desvía 55° de su dirección original, mientras que el núcleo deja una traza que forma un ángulo de 35° con la dirección de incidencia. ¿Cuál es la masa del núcleo?

8.14 El alcance R de las partículas α en el aire y la energía E de las mismas están relacionados por la expresión empírica $R = 0,318E^{3/2}$ m, donde E está en MeV. (a) Para las energías de las partículas α que se muestra en la fig. 8-8, determinar el alcance de las que son emitidas cuando se desintegra el

^{213}Bi . (b) En una cámara de niebla se observa la desintegración α del ^{213}Po y se mide cuatro alcances — 11,2, 11,0, 9,57 y 8,51 cm —. Calcular la energía de estas partículas. (Ver fig. 8-9.)

8.15 El espectro de desintegración α del ^{226}Ra tiene una estructura triple, siendo las energías de las partículas α : 4,777, 4,593 y 4,342 MeV. Suponiendo que el núcleo residual ^{222}Rn se produzca en el estado fundamental y dos estados excitados, dibujar el diagrama de niveles de energía y mostrar la emisión de rayos γ asociada con la transición.

8.16 Mostrar los modos posibles de desintegración del ^{40}K , que tiene una masa en reposo de 39,9640 uma. Calcular la energía disponible para cada proceso posible.

8.17 Probar a partir de medidas de masa que el ^{64}Cu puede desintegrarse por emisión β^+ y β^- , y captura electrónica. Experimentalmente sabemos que el ^{64}Cu tiene una vida media de 12,8 horas con 39% β^- , 19% β^+ y 42% CE. Calcular la energía disponible para cada uno de los tres procesos.

8.18 (a) Probar que el ^7Be se desintegra por captura electrónica. Su masa en reposo es 7,016929 uma. (b) Calcular la energía y el momentum del neutrino y del núcleo residual de ^7Li .

8.19 Calcular la energía máxima que corresponde al electrón en la desintegración β^- del ^3H .

8.20 Cuando el ^{14}O se desintegra por emisión β^+ , el nucleido ^{14}N residual está casi siempre en un estado excitado ($> 99\%$). Utilizando los datos experimentales dados en la fig. 8-10 (b) y el hecho de que el ^{14}N tiene una masa en reposo de 14,003074 uma, calcular la masa del ^{14}O .

8.21 Representar las masas de los isóbaros con $A = 40, 64$ y 134 en función de Z . Mostrar las posibles cadenas de desintegración β y los nucleidos más estables. Unir los valores superiores con los inferiores partiendo de los nucleidos estables, y observar que las líneas que los conectan son parábolas. Medir la separación entre las dos curvas y mos-

trar que es compatible con el término de corrección impar-par de la ec. (7.11),

$$\delta = \pm 34A^{-2.4} \text{ MeV.}$$

8.22 Hacer el gráfico de la distribución de energía de los electrones en la desintegración β , dada por la ec. (8.21), para $E_0 = 1.24$ MeV. Comparar con la figura 8-11(b).

8.23 Completar las siguientes ecuaciones de reacciones nucleares, colocando en lugar de X el nucleido o la partícula correctos:

- (a) ${}^{27}_{13}\text{Al}(n, \alpha)X$; (b) ${}^{31}_{15}\text{P}(\gamma, n)X$;
 (c) ${}^{23}_{11}\text{P}(d, p)X$; (d) ${}^{12}_{6}\text{C}(X, \alpha)X$;
 (e) ${}^{10}_{5}\text{B}(\gamma, X)X$; (f) ${}^{110}_{48}\text{In}(n, \gamma)X$;
 (g) ${}^{58}_{28}\text{Ni}(p, n)X$; (h) ${}^{59}_{27}\text{Co}(n, X)X$.

8.24 El defecto de masa de un núcleo se define como $\Delta = A - M$ donde A es el número másico y M la masa nuclear en una. Expresar el valor de Q para las desintegraciones β^- y β^+ y la reacción $M_i(m_i, m_f)M_f$, en función del valor del defecto de masa Δ para cada una de las partículas involucradas. [Sugerencia: ver los ejemplos 8.4 y 8.5.]

8.25 Se lanza una partícula de masa m_i con una energía cinética E_i (en el sistema de referencia L) contra un núcleo de masa M_i inicialmente en reposo en el laboratorio. Probar que (a) la energía cinética total en el sistema de referencia C es $E_i M_i / (M_i + m_i)$, (b) la energía total disponible para la reacción $M_i(m_i, m_f)M_f$ es $Q + E_i M_i / (M_i + m_i)$, y (c) el umbral de energía cinética de m_i en el sistema de referencia L (cuando Q es negativo) es $-Q(M_i + m_i) / M_i$. Suponer que las partículas se pueden tratar de modo no relativista.

8.26 Determinar el umbral de energía del fotón en la reacción fononuclear



Las masas en reposo de los nucleidos originario y residual son respectivamente 23,98504 y 22,99412 uma.

8.27 Un acelerador determinado puede acelerar partículas con una carga hasta una energía de 2 MeV y con carga doble, hasta 4 MeV. ¿Qué reacciones se puede observar cuando se bombardea el ${}^{12}\text{C}$

con protones, deuterones y partículas α provenientes de este acelerador?

8.28 Cuando el ${}^7\text{Li}$ se bombardea con protones de 0,70 MeV, se produce dos partículas α , ambas con una energía de 9,0 MeV. (a) Calcular el Q de la reacción. (b) Calcular la diferencia entre la energía cinética total de las partículas α y la energía cinética inicial del protón en el sistema de referencia L .

8.29 La masa en reposo del ${}^{27}_{13}\text{Al}$ es 26,98154 uma. Hallar la masa de los núcleos producto en las siguientes reacciones:

- (a) ${}^{27}_{13}\text{Al}(n, \gamma) {}^{27}_{13}\text{Al}$, $Q = 7,722$ MeV;
 (b) ${}^{27}_{13}\text{Al}(p, \alpha) {}^{24}_{11}\text{Mg}$, $Q = 1,594$ MeV;
 (c) ${}^{27}_{13}\text{Al}(d, p) {}^{27}_{13}\text{Al}$, $Q = 5,497$ MeV;
 (d) ${}^{27}_{13}\text{Al}(d, \alpha) {}^{24}_{11}\text{Mg}$, $Q = 6,693$ MeV.

8.30 Probar que el Q de una reacción nuclear $M_i(m_i, m_f)M_f$ está dado por

$$Q = E_i [1 + (m_f/M_f)] - E_f [1 - (m_i/M_i)],$$

donde E_i es la energía cinética de la partícula incidente y E_f es la energía cinética de las partículas m_f observadas a un ángulo de 90° con respecto a la dirección de la partícula incidente.

8.31 Para las siguientes reacciones, hallar el umbral de energía del proyectil en el sistema de referencia L , suponiendo que el núcleo que hace de blanco está en reposo: (a) ${}^{14}\text{N}(\alpha, p) {}^{17}\text{O}$; (b) ${}^{16}\text{O}(n, \alpha) {}^{13}\text{C}$.

8.32 Se bombardea una muestra de silicio natural con un haz de deuterones de 2,0 MeV. (a) Escribir todas las reacciones posibles en las cuales se produce un protón o una partícula α . (b) Hallar en cada caso la energía cinética de la partícula producida en el sistema de referencia C y su energía cinética máxima y mínima en el mismo sistema de referencia C .

8.33 A energías relativamente bajas (térmicas) la sección eficaz de captura neutrónica para muchas sustancias es inversamente proporcional a la velocidad del neutrón. Esto se denomina ley $1/v$. ¿Qué forma tendrá el gráfico del logaritmo de la sección eficaz de los neutrones térmicos en función de la

energía cinética del neutrón bombardeante?

8.34 Suponiendo que la sección eficaz de captura del ^{197}Au para neutrones sigue la ley $1/v$ (ver el problema 8.33) y que su sección eficaz de captura para neutrones térmicos (0,025 eV) es 99 b, hallar la sección eficaz de absorción del ^{197}Au para un neutrón de 1,0 eV. ¿Qué espesor debe tener una hoja de oro para que absorba el 20 % de un haz de neutrones de 1,0 eV?

8.35 Una hoja de tantalio de 0,02 cm de espesor cuya densidad es $1,66 \times 10^{24}$ kg m^{-3} es irradiada por dos horas en un haz de neutrones térmicos de flujo 10^6 N m^{-2} s^{-1} . Como resultado de la reacción $^{182}\text{Ta} (n, \gamma)^{183}\text{Ta}$, se forma el núcleo ^{182}Ta con una vida media de 114 días. Inmediatamente después de la irradiación, la hoja tiene una actividad de $1,23 \times 10^7$ desintegraciones por segundo por cm^2 . Hallar (a) el número de núcleos de ^{182}Ta formados, (b) la sección eficaz para la reacción (n, γ) que produce el ^{182}Ta .

8.36 Una lámina de acero borado de las que se usan en los reactores nucleares como barras de control, tiene 150 mm de espesor y contiene 2% de peso de boro. Las secciones eficaces del hierro y el boro para neutrones rápidos son 2,5 b y 755 b, respectivamente. (a) Hallar las secciones eficaces macroscópicas de absorción de cada uno de estos elementos en la lámina de acero borado. (b) ¿Qué fracción de un haz de neutrones se absorbe al atravesar esta lámina? (c) Calcular la sección eficaz macroscópica de la lámina si el contenido de boro aumenta al 3%. (La densidad del boro es $2,5 \times 10^3$ kg m^{-3} y la del acero es $7,9 \times 10^3$ kg m^{-3}).

8.37 Se dirige un haz de neutrones de 370 keV a una lámina de aluminio de 0,1 mm de espesor. Si la sección eficaz de captura de neutrones de esa energía para el aluminio es de 3 mb, ver figura 8-14(b), determinar la fracción de neutrones capturados. La densidad del aluminio es $2,70 \times 10^3$ kg m^{-3} .

8.38 Repetir el problema 8.37 para un haz de neutrones cuya energía es de aproximadamente 45 keV. La figura 8-14(b) muestra un pico de unos

18 mb en la sección eficaz de captura a 45 keV.

8.39 La sección eficaz de captura del ^{10}B para neutrones térmicos es de más o menos 4000 b. ¿Qué espesor debe tener una capa de ^{10}B para absorber el 99% de un haz incidente de neutrones térmicos? (Densidad del boro: $2,5 \times 10^3$ kg m^{-3} .)

8.40 Probar que el ^4Li es estable respecto a la fisión analizando todos los modos posibles en los cuales podría partirse (por ejemplo, $^4\text{Li} \rightarrow d + \alpha$, etc.). Análogamente, probar que el ^3Li y el ^3He son inestables respecto a la fisión.

8.41 En la fotofisión del ^{235}U en ^{92}Kr , ^{141}Ba y tres neutrones, calcular, a partir de las diferencias de masa, la energía total liberada. Comparar esta energía con la inicial de repulsión coulombiana de los dos fragmentos cargados, suponiendo que éstos están en contacto en el momento de la fisión.

8.42 Calcular la energía necesaria para dividir un núcleo de ^4He en: (a) ^2H y p ; (b) ^3He y n . Explicar la diferencia entre estas energías en función de las propiedades de las fuerzas nucleares.

8.43 Demostrar que la energía liberada en la fisión del uranio (185 MeV por átomo) es equivalente a $8,3 \times 10^{10}$ J kg^{-1} . ¿Con qué rapidez deberá fisionarse el uranio para que genere 1 MW de potencial? ¿Cuánto tiempo tardará 1 kg de uranio en consumirse suponiendo que genera continuamente 1 MW de potencia?

8.44 Se puede probar que la fisión espontánea ocurrirá si $a_2 A / a_1 Z^2 \approx 25 A / Z^2$ es menor que la unidad, donde a_2 y a_1 son coeficientes de la fórmula de Weizsäcker, ec. (7.11). Calcular este cociente para el ^{136}Xe , el ^{138}Ce , el ^{200}Hg , el ^{238}U y ^{238}Fm .

8.45 Calcular la energía de excitación del núcleo producido cuando un neutrón es capturado por cada uno de los siguientes núcleos: ^{232}Th ; ^{230}Th , ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu y ^{240}Pu . ¿Cuáles de estos núcleos esperaríamos que fuesen fisionables por neutrones térmicos?

8.46 (a) ¿Cuál deberá ser la temperatura media de un plasma de deuterio para que la fusión tenga lugar? [Sugerencia:

Podemos estimar esta temperatura calculando la energía de repulsión coulombiana entre deuterones cuando están dentro del alcance de la fuerza nuclear, $\sim 10^{-15}$ m.] (b) Calcular la energía liberada en la fusión de dos núcleos de deuterio en una partícula alfa.

8.47 ¿Qué energía se libera en el proceso de fusión $3\text{ }^4\text{He} \rightarrow \text{}^{12}\text{C}$? Este proceso ocurre en las estrellas en la segunda etapa de la síntesis nuclear. Determinar la potencia generada por este proceso en una estrella en la cual 5×10^9 kg de ^4He por segundo se fusionan en ^{12}C .

8.48 El ciclo del nitrógeno es un proceso de fusión similar al ciclo del carbono dado en la ec. (8.35). Comienza con la captura de un fotón por un núcleo de ^{14}N . Después de sucesivas reacciones, en las cuales están involucrados los nucleidos ^{15}O , ^{15}N , ^{16}O , ^{17}F y ^{17}O , el núcleo de ^{14}N se regenera, resultando la fusión de cuatro protones en una partícula α . (a) Escribir en detalle los dife-

rentes pasos del ciclo del nitrógeno. (b) ¿Cuál es la energía total liberada en este ciclo?

8.49 Probar que para dar cuenta de la energía producida por el sol, su masa debe disminuir a razón de $4,6 \times 10^9$ kg s^{-1} . ¿Cuánto tiempo debe transcurrir para que la masa del sol disminuya en 1 % (masa del sol = $1,98 \times 10^{30}$ kg)?

8.50 ¿Cuánto tiempo debe transcurrir para que la duración del año aumente en un segundo debido a la pérdida de masa del sol por radiación? (Ver el problema anterior.) Recordar que el período del movimiento de un planeta alrededor del sol es inversamente proporcional a la masa de este último.

8.51 Suponiendo que en el sol la razón a la cual el hidrógeno se fusiona en helio ha permanecido constante desde el principio, mostrar que la edad del sol debe ser del orden de 2×10^{10} años. La edad estimada del sol, basada en otros cálculos, es del orden de 10^{11} años.

PARTICULAS FUNDAMENTALES

9.1 *Introducción*

9.2 *Genealogía de las partículas*

9.3 *Partículas y antipartículas*

9.4 *Inestabilidad de las partículas*

9.5 *Leyes de conservación*

9.6 *Invariancia, simetría y leyes de conservación*

9.7 *Resonancias*

9.8 *¿Qué es una partícula fundamental?*

9.1 Introducción

Concluiremos nuestro estudio de la estructura de la materia considerando brevemente las unidades con que está construida toda la materia. Estas unidades son las *partículas fundamentales* o *elementales* a las que nos hemos referido en varias ocasiones. En este texto hemos encontrado hasta ahora las siguientes partículas: el protón, el neutrón, el electrón, el positrón y el neutrino. A esta lista debemos agregar el fotón, que también se considera una partícula fundamental. Las tres primeras partículas parecen ser las únicas necesarias para explicar la estructura de los átomos y de los núcleos. El positrón no es necesario para ese fin, pero su existencia confirma la validez de las ideas relativistas y cuánticas cuando se aplican al reino de las partículas fundamentales (esto requiere un análisis matemático que está por encima del nivel de este libro). Aparentemente el neutrino es necesario para satisfacer tres leyes básicas: las leyes de conservación de la energía, del momentum y del momentum angular. Finalmente, el fotón es el portador de la interacción electromagnética entre partículas cargadas. Esto es: se describe la interacción electromagnética de dos cargas como un intercambio de fotones (ver la sección 1.6).

¿Podemos esperar que existan más partículas fundamentales? Razonando por analogía podemos esperar que la interacción fuerte entre protones y neutrones también necesite que haya una partícula portadora, que podemos llamar *pion* (derivado del nombre mesón π que se le dio originalmente). También la interacción gravitacional entre dos masas requeriría que hubiera otra partícula portadora, que llamamos *gravitón*. Análogamente, la interacción débil estaría asociada con una partícula portadora que podemos llamar partícula W. Los piones han sido observados en los rayos cósmicos y se producen en grandes cantidades en los aceleradores de alta energía, pero todavía no se ha encontrado evidencia experimental de la existencia del gravitón o de la partícula W.

En los últimos 30 años se han observado muchas otras partículas (a veces predichas, otras insospechadas). Algunas se comportan de una manera bastante extraña no habiéndose encontrado todavía una razón para su existencia. Más de 30 partículas relativamente estables (vidas medias más largas que 10^{-10} s) han sido identificadas. También se ha identificado cerca de 50 partículas de vida extremadamente corta (vidas medias menores que 10^{-22} s) a las que se suele llamar *resonancias*. Estos descubrimientos han sido posibles por la construcción de aceleradores de energía muy alta que producen partículas de varios GeV de energía y por el perfeccionamiento de las técnicas de observación de partículas. Estas técnicas incluyen las cámaras de niebla, de burbujas y de chispas y las emulsiones fotográficas (en todas las cuales las partículas dejan trazas visibles), diferentes tipos de detectores — como los contadores de Geiger-Müller, de centelleo y de Cherenkov —, y circuitos electrónicos bastante elaborados. No entraremos aquí en la discusión de estas técnicas experimentales, aunque algunos de los dispositivos de detección de partículas están descritos en el apéndice VII.

Como la complejidad matemática de la teoría de partículas fundamentales va mucho más allá de la introducción elemental a la mecánica cuántica dada en el

capítulo 2, el tratamiento del tema que haremos en las páginas que siguen será fundamentalmente cualitativo y descriptivo.

TABLA 9-1 Partículas fundamentales

Partícula	Símbolo	Masa en reposo (en unidades de m_e)	Energía en reposo, MeV	Carga (en unidades de e)	Espín (en unidades de \hbar)	Anti-partícula
<i>Bosones de masa nula</i>						
Gravitón (?)	g	0	0	0	2	g
Fotón	γ	0	0	0	1	γ
<i>Leptones (fermiones)</i>						
Neutrino	ν	0	0	0	$\frac{1}{2}$	$\bar{\nu}$
Electrón	e^-	1	0,511	-1	$\frac{1}{2}$	e^+
Muon	μ^-	206,8	105,7	-1	$\frac{1}{2}$	μ^+
<i>Mesones (bosones)</i>						
Pion	π^+	273,9	140	+1	0	π^-
	π^0	264,2	135	0	0	π^0
Kaón	K^+	966,7	494	+1	0	\bar{K}^-
	K^0	974,6	498	0	0	\bar{K}^0
Mesón η	η^0	1074	549	0	0	η^0
<i>Bariones (fermiones)</i>						
<i>Nucleones</i>						
protón	p^+	1836,2	938,3	+1	$\frac{1}{2}$	\bar{p}^-
neutrón	n^0	1838,7	939,6	0	$\frac{1}{2}$	\bar{n}^0
<i>Hiperones</i>						
lambda	Λ^0	2184	1116	0	$\frac{1}{2}$	$\bar{\Lambda}^0$
sigma	Σ^+	2327	1189	+1	$\frac{1}{2}$	Σ^-
	Σ^0	2333	1192	0	$\frac{1}{2}$	Σ^0
	Σ^-	2342	1197	-1	$\frac{1}{2}$	Σ^+
	xi	Ξ^0	2573	1315	0	$\frac{1}{2}$
omega	Ξ^-	2585	1321	-1	$\frac{1}{2}$	Ξ^+
	Ω^-	3276	1674	-1	$\frac{1}{2}$	$\bar{\Omega}^+$

9.2 Genealogía de las partículas

La tabla 9-1 presenta una lista de partículas conocidas (circa 1967) (excluyendo las resonancias) y de algunas de sus propiedades. La fig. 9-1 muestra la cronología del descubrimiento de estas partículas. Las tres cantidades básicas que se usan para identificar las partículas son la masa, la carga y el espín; más adelante daremos otras propiedades identificatorias. Las partículas fundamentales se agrupan en cuatro familias conforme a su masa y a la interacción dominante:

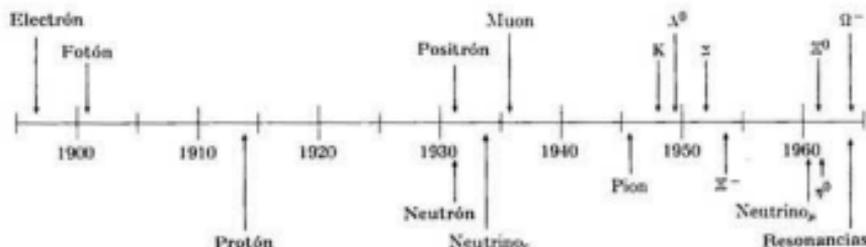


Fig. 9-1. Cronología del descubrimiento experimental de las partículas fundamentales. Algunas partículas fueron previstas teóricamente antes de su observación experimental y otras fueron observadas inesperadamente. (Adaptada de C. Swartz, *The Fundamental Particles*, Addison-Wesley, 1965.)

(a) *bosones de masa nula*, (b) *leptones* o partículas livianas, (c) *mesones* o partículas de masa intermedia, y (d) *bariones* o partículas pesadas. (En el capítulo 13 se explicará el porqué de los nombres bosón y fermión agregados a esas partículas en la tabla 9-1, pero podemos adelantar que los fermiones obedecen el principio de exclusión y los bosones no). Los bariones y los mesones están sujetos a las cuatro interacciones, es decir: la fuerte, la electromagnética, la débil y la gravitacional. Los leptones *no* son sensibles a las interacciones fuertes, los fotones están vinculados con la interacción electromagnética y los gravitones con la gravitacional.

Una de las cuestiones más intrigantes y que aún queda por resolver con respecto a las partículas fundamentales es que sus masas no parecen tener regularidad alguna. Por otro lado, las partículas son neutras o tienen carga $\pm e$, lo cual debe estar estrechamente relacionado con la ley de conservación de la carga. Además todos los fermiones tienen espín $\frac{1}{2}$ excepto el Ω^- que parece tener un espín $\frac{3}{2}$, y los bosones tienen espín cero (mesones) o entero (fotón). La mayoría de las partículas tienen también un momento dipolar magnético.

El espín del fotón se infiere de que todas las transiciones radiativas en las que una partícula, un núcleo, un átomo o una molécula emite o absorbe fotones están rigurosamente prohibidas si los estados inicial y final tienen momentum angular total nulo. Esto demuestra que el fotón tiene un momentum angular intrínseco o espín. Un análisis más detallado que omitiremos indica que el espín del fotón es 1 porque el fotón está asociado con un campo vectorial: el campo electromagnético. Como la masa en reposo del fotón es cero, se puede demostrar que su espín puede ser paralelo ($m_s = +1$) o antiparalelo ($m_s = -1$), pero nunca perpendicular ($m_s = 0$) a su momentum. El primer caso corresponde a la radiación polarizada en sentido levógiro y el segundo a la polarizada en sentido dextrógiro. Este resultado es equivalente a decir que el campo electromagnético de una onda plana es perpendicular a la dirección de propagación.

9.3 Partículas y antipartículas

Con cada partícula hay asociada una antipartícula. La última columna de la tabla 9-1 da la lista de antipartículas. Una antipartícula se designa con el mismo símbolo que la partícula agregándole una barra encima. (A veces se omite la barra para simplificar.) Las antipartículas tienen la misma masa y el mismo espín que las partículas pero propiedades electromagnéticas, como la carga y el momento magnético, opuestas (otras propiedades que mencionaremos más adelante también son opuestas). Cuatro partículas — el fotón, el gravitón y los mesones π^0 y η^0 — son sus propias antipartículas. La existencia de antipartículas es una exigencia de la relatividad y de la mecánica cuántica. Dirac predijo antipartículas antes de que fueran observadas experimentalmente. En algunos casos todavía no se ha identificado experimentalmente la antipartícula, pero se supone teóricamente que existe. En la fig. 9-2 las partículas y antipartículas están dispuestas de un modo más simétrico. El positrón fue la primera antipartícula que se observó; el físico norteamericano Carl Anderson, en 1933, analizando los rayos cósmicos con una cámara de niebla, la observó. Un grupo de la Universidad de Cali-

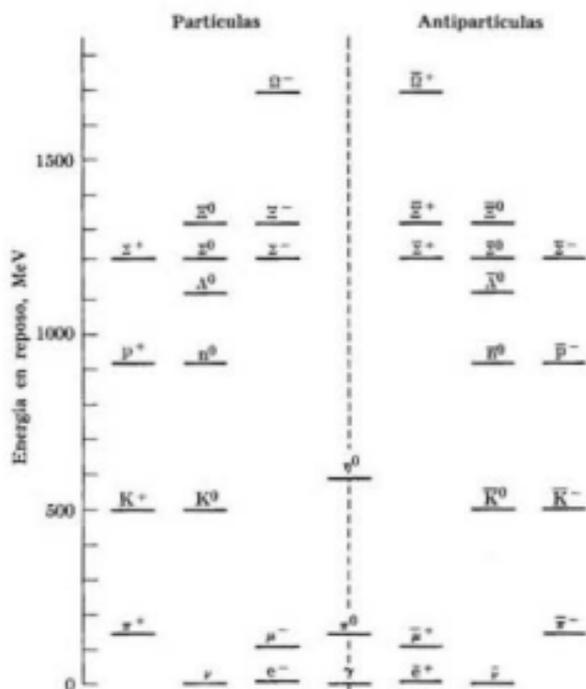


Fig. 9-2. Partículas y antipartículas ordenadas conforme a su energía en reposo y a su carga.

fornia observó por primera vez los antiprotones en 1955; los antineutrones fueron observados poco después.

En el caso del neutrino hay una propiedad importante que distingue la partícula de la antipartícula y que es consecuencia de que su masa en reposo sea nula (y de que la paridad no se conserve; ver la sección 9.6). Un neutrino siempre tiene su espín en dirección opuesta a la de su momentum (que está en la dirección del movimiento), mientras que un antineutrino tiene el momentum y el espín en la misma dirección (fig. 9-3). Se dice entonces que un neutrino tiene *helicidad negativa* (designada con \hat{h}) igual a -1 y que un antineutrino tiene *helicidad positiva*, igual a $+1$. Se encontró esta propiedad analizando la desintegración de piones y de muones y la desintegración β (ver la sección 9.4). Otras partículas de espín $\frac{1}{2}$ que tienen masa en reposo no nula (como los electrones) pueden tener helicidad positiva o negativa indistintamente lo mismo que sus antipartículas; esto es, $\hat{h} = \pm 1$.

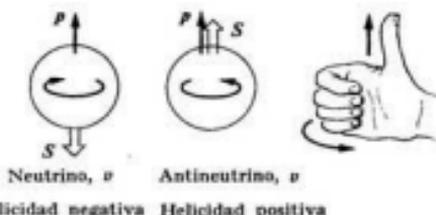


Fig. 9-3. El neutrino y el antineutrino tienen helicidad opuesta.

Neutrino, ν Antineutrino, $\bar{\nu}$
Helicidad negativa Helicidad positiva

Una partícula y su antipartícula se pueden combinar desapareciendo o *aniquilándose*. Su energía total, incluyendo la energía en reposo, reaparece en forma de otras partículas. En este proceso es necesario satisfacer varias leyes de conservación. Por ejemplo, el electrón e^- y su antipartícula el positrón e^+ se pueden aniquilar emitiendo fotones; este proceso se denomina *aniquilación de pares de electrones*. Si sus espines son opuestos y su momentum angular relativo es cero, el proceso es



Se emite dos fotones por la conservación de la energía y del momentum. Si el electrón y el positrón están en reposo en el laboratorio (que coincide entonces con el sistema C de referencia), la energía total disponible es $2m_0c^2 = 1,022$ MeV y el momentum total es cero. Si se emitiera un fotón de energía $E_\gamma = 2m_0c^2$ tendría un momentum $p_\gamma = E_\gamma/c = 2m_0c$ y se violaría el principio de conservación del momentum, ya que el momentum inicial es cero. Para conservar la energía y el momentum deben ser emitidos dos fotones iguales en direcciones opuestas. Cada fotón debe tener entonces una energía igual a $m_0c^2 = 0,511$ MeV. Se observa fotones de esta energía cuando los positrones emitidos por una sustancia con radioactividad β^+ atraviesan la materia. También se debe conservar el momentum angular y si el electrón y el positrón tienen sus espines en direcciones opuestas, los fotones también deben tener sus espines opuestos, lo cual

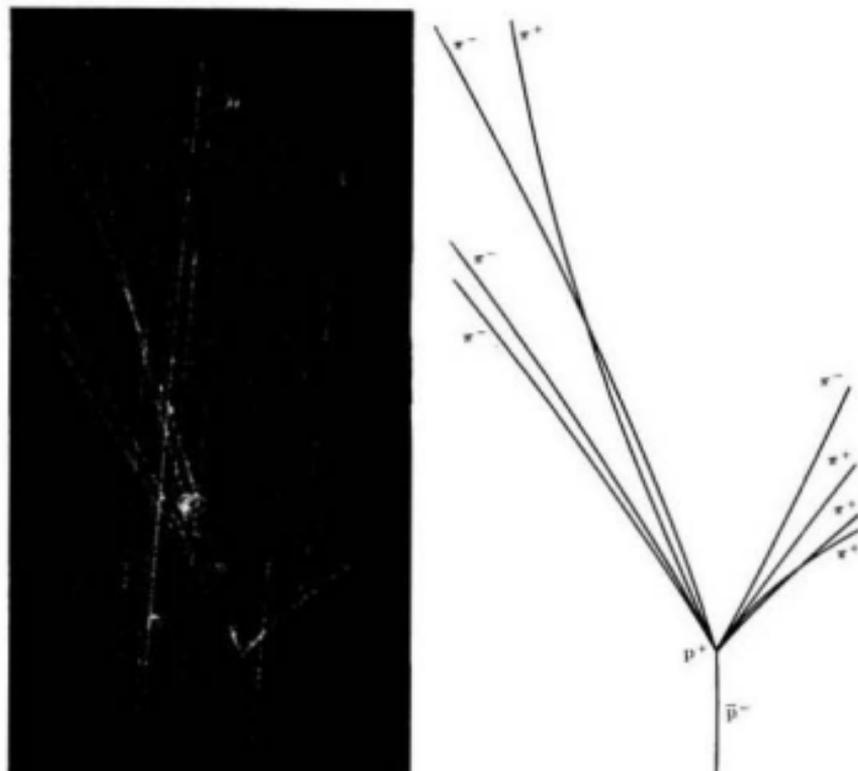


Fig. 9-1. Aniquilación protón-antiprotón. (Fotografía cortesía del laboratorio Nacional de Brookhaven.)

requiere que tengan la misma polarización circular (o que estén polarizados en direcciones perpendiculares). Cuando el electrón o el positrón (o ambos) no están en reposo en el laboratorio, se puede, usando las leyes de conservación de la energía y del momentum, realizar el cálculo de la energía y el momentum de los fotones en el laboratorio. Notar que en la ec. (9.1) también se conserva la carga.

La aniquilación protón-antiprotón es un proceso más complejo que involucra la producción de varias partículas, la mayoría piones. En la fig. 9-4 se muestra una aniquilación de este tipo (que tuvo lugar en una cámara de burbujas), correspondiente al proceso



El antiprotón incidente se aniquila con uno de los protones del gas de la cámara. Si la carga se conserva, el número de piones positivos debe ser igual al de negati-

vos. Es difícil decir cuál es el número de mesones π^0 producidos, ya que no dejan trazas en la cámara. El número total de partículas producido depende de la energía disponible.

Inversamente, se puede producir simultáneamente una partícula y su antipartícula. La fig. 9-5 ilustra la producción de un par electrón-positrón por un fotón que entra en la cámara de niebla por la izquierda; el proceso es

$$\gamma \rightarrow e^- + e^+ \quad (9.3)$$

La traza del fotón no es visible. Evidentemente, para que se produzca un par de electrones, el fotón debe tener una energía por lo menos igual a $2m_e c^2 = 1,022$ MeV. Para que en la ec. (9.3) se conserve la energía y el momentum, el proceso debe ocurrir cerca de un núcleo que, por su acoplamiento electromagnético con el sistema, tomará la energía y el momentum necesarios para la conservación de ambas cantidades. Es por esta razón que la producción de pares de electrones es más intensa en los materiales que tienen número atómico alto (como el plomo), ya que los mismos proveen un acoplamiento electromagnético más intenso con el par electrón-positrón. La producción de pares electrónicos es uno de los principales procesos que dan cuenta de la absorción de fotones de alta energía en

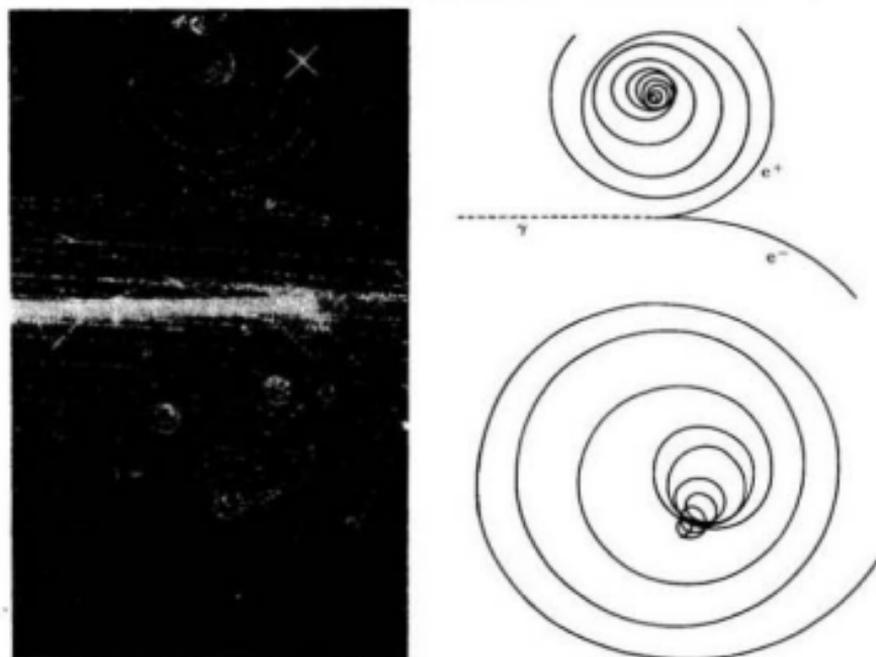


Fig. 9-5. Producción de un par electrón-positrón. (Fotografía cortesía del Laboratorio Nacional de Brookhaven.)

diversos materiales; (a baja energía el proceso más importante es el efecto fotoeléctrico y a energías entre 0,1 MeV y 1 MeV lo es el efecto Compton. Ver la sección 1.9 y la fig. 1-19).

Análogamente, se puede producir un par protón-antiprotón en una colisión protón-protón de alta energía conforme al esquema



(Este proceso no es el único que puede ocurrir en una colisión protón-protón.) El grupo de la Universidad de California usó este proceso en los experimentos que condujeron al descubrimiento del antiprotón (ver el ejemplo 9.2). Para que el proceso (9.4) ocurra, el umbral de energía cinética del protón incidente (si el protón blanco está en reposo) tiene que ser de por lo menos 5,64 GeV (para el cálculo de este valor ver el ejemplo 9.3).

Nuestra galaxia parece estar compuesta principalmente de partículas (y no de una mezcla uniforme de partículas y antipartículas) y esto la hace estable respecto a aniquilación. Empero, nada impide la posibilidad de que otras galaxias estén compuestas fundamentalmente de antipartículas, aunque no hay evidencia alguna en apoyo de esta hipótesis. De todos modos es interesante especular sobre lo que ocurriría si una galaxia y una antigalaxia chocaran. Los astrofísicos han sugerido que aniquilaciones materia-antimateria con proporciones de cataclismo podrían ser la causa de algunas explosiones observadas en galaxias distantes.

EJEMPLO 9.1. Discusión del *positronio*, que es un sistema compuesto de un electrón y un positrón girando alrededor de su centro de masa, similar al sistema electrón-protón del hidrógeno.

Solución: Cuando un positrón y un electrón se acercan, pueden formar un sistema estable cuyos estados estacionarios se calculan del mismo modo que los estados estacionarios del hidrógeno tratados en la sección 3.2. Recordando la ec. (3.7) vemos que en el caso del positronio las dos partículas tienen la misma masa, es decir, que $m_e = M$, por lo que la constante de Rydberg correspondiente es $R' = \frac{1}{2}R$. Introduciendo este valor en la ec. (3.5) con $Z = 1$, se encuentra para los niveles de energía estacionarios del positronio:

$$E_n = -\frac{Rh}{2n^2} = -\frac{6,8}{n^2} \text{ eV.}$$

Los verdaderos niveles de energía están dados por una expresión más compleja porque hay que introducir correcciones relativistas. El positronio tiene una vida transitoria a causa de la posibilidad de aniquilación del par conforme a la ec. (9.1). Si el par electrón-positrón se mueve con momentum angular orbital nulo (como en el estado fundamental 1s) y los espines son antiparalelos (estado singlete 1S), las dos partículas se aniquilan eventualmente produciendo dos fotones, polarizados circularmente en el mismo sentido o polarizados linealmente en planos perpendiculares, como se explicó anteriormente. La vida media del estado singlete es $1,2 \times 10^{-10}$ s. Si sus espines son paralelos (estado triplete 3S), la conservación del momentum angular y otras reglas de selección relacionadas con la simetría del sistema prohíben la desintegración en dos fotones. En este caso el par positrón-electrón se aniquila produciendo tres fotones. En ambos casos las energías de los fotones deben sumar 1,022 MeV, que es la energía total en reposo de las dos partículas que se aniquilan. La vida media del estado triplete es $1,4 \times 10^{-7}$ s. Martin Deutsch confirmó la exis-

tencia del positronio en 1951. Cuando un haz de positrones se mueve a través de un gas, parte de los positrones forman átomos de positronio antes de aniquilarse. Las posibilidades de formación de positronio en los estados singlete y triplete están en la proporción 1 a 3. Como en el estado triplete el positronio tiene una vida mucho más larga, puede intervenir en reacciones químicas con los átomos o moléculas del gas. Es así que se ha observado halogenuros de positronio. Estos "compuestos" acortan la vida del positronio porque el positrón se puede aniquilar con otro electrón del átomo o molécula que tenga espín opuesto. Actualmente se está realizando una investigación intensa sobre la "química" del positronio.

EJEMPLO 9.2. El experimento del antiprotón.

Solución: El experimento que llevó al descubrimiento del antiprotón es posiblemente uno de los más interesantes en la física de las partículas fundamentales. El objeto del experimento era detectar partículas que tuvieran carga $-e$ y masa m_p . Se hizo incidir un haz de protones, acelerados hasta 6,2 GeV en el bevatrón de la Universidad de California, sobre un blanco apropiado dando lugar a varias reacciones, produciéndose partículas K , π , μ y algunas p^- . Mediante un imán de deflexión M_1 se seleccionaron sólo partículas negativas, las cuales pasaban a través de una abertura en el blindaje (fig. 9-6). En la fig. 9-6 las S son detectores de centelleo y las C detectores de Cerenkov. Estos detectores están contruidos de modo tal que son sensibles sólo a partículas con energía en un cierto intervalo (ver el apéndice VII). Entre S_1 y S_2 se colocó un segundo imán M_2 deflector, que hacía de selector de momentum, ya que el radio de la trayectoria estaba fijado por la posición de los detectores, deflectándose hacia S_2 sólo las partículas con momentum $p = -eB\rho$. A causa de algunas ventajas experimentales que ofrecía, se eligió el campo magnético para que correspondiera a un momentum $p = 1,19$ GeV/c, que es ligeramente menor que el que tendrían la mayoría de los antiprotones al producirse (1,75 GeV/c).

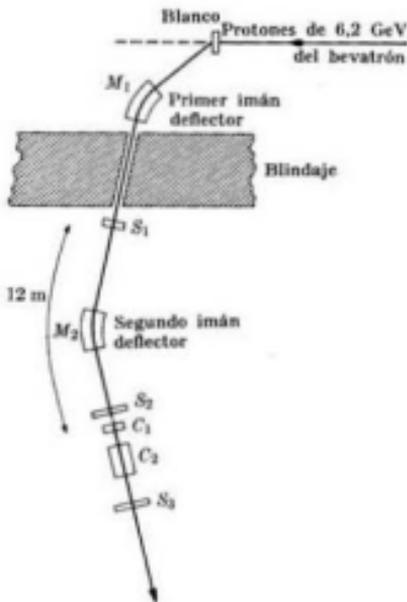


Fig. 9-6. Arreglo experimental para observar el antiprotón.

A través del imán M_2 pasaban muchas partículas de carga negativa (K^- , π^- , μ^-) y unos pocos antiprotones (se estimó que la proporción era de un antiprotón por cada 40 000 partículas). Era necesario determinar la velocidad de las partículas para identificar los antiprotones. La velocidad de un antiprotón de 1,19 GeV/c es 0,78c, mientras que la velocidad de un pión del mismo momentum es 0,99c. Los detectores de centelleo S_1 y S_2 estaban a 12 m uno de otro. El tiempo necesario para que un antiprotón y un pión con estas velocidades fueran de S_1 a S_2 era $5,1 \times 10^{-8}$ s y $4,0 \times 10^{-8}$ s, respectivamente. Por lo tanto, se puso S_1 y S_2 en coincidencia retardada de modo que dieran una señal sólo si los pulsos de S_1 y S_2 estaban separados

por un intervalo de $5,1 \times 10^{-8}$ s. Luego, se podía considerar la observación de estas coincidencias retardadas como una indicación del pasaje de antiprotones. Sin embargo, el fondo de mesones era tan intenso que fue necesario tomar otras precauciones para eliminar las coincidencias accidentales debidas al pasaje de dos piones diferentes por S_1 y S_2 con un retardo de $5,1 \times 10^{-8}$ s. El detector de Cerenkov C_1 era sensible sólo a partículas con velocidad mayor que $0,80c$ y C_2 sólo a partículas con velocidad entre $0,75c$ y $0,78c$. Cuando los antiprotones llegaban a los detectores de Cerenkov su velocidad había disminuido a $0,76c$ aproximadamente. Por lo tanto, C_1 no era sensible a los antiprotones, pero sí a los mesones; en C_2 se daba la situación inversa. Entonces, para impedir cuentas espúreas, se conectaba el detector C_1 en anticoincidencia y el C_2 en coincidencia con las señales de S_1 y S_2 . Es decir, los experimentadores sabían que un antiprotón había atravesado el sistema cuando: (a) S_1 y S_2 registraban pulsos retardados en $5,1 \times 10^{-8}$ s, (b) C_1 no registraba un pulso y (c) C_2 registraba un pulso. A modo de comprobación adicional, se variaba el campo magnético de M_1 y sólo se recibía pulsos cuando el valor del campo correspondía al tiempo de vuelo preescogido para los antiprotones. El experimento — realizado por Chamberlain, Segré, Wiegand e Ypsilantis en 1955 — tuvo gran éxito y confirmó la existencia del antiprotón.

9.4 Inestabilidad de las partículas

Los procesos de creación y aniquilación tratados en la sección precedente y los procesos de desintegración β tratados en la sección 8.4 son manifestaciones de una propiedad más general de las partículas fundamentales: su inestabilidad. En otras palabras: *dadas las condiciones apropiadas, las partículas fundamentales pueden transformarse en otras partículas como resultado de su interacción*. Pronto aclararemos qué queremos decir con las condiciones apropiadas. Las partículas inestables sufren *desintegración espontánea* con una vida media bien definida. La tabla 9-2 muestra los modos de desintegración y las vidas medias de las partículas inestables. En los casos en que es posible más de un modo de desintegración se da también la probabilidad relativa de cada modo. En algunas desintegraciones aparecen antineutrinos; esto se debe a una ley de conservación (la de los leptones) que se tratará en la sección 9.5. Notar que sólo cuatro partículas (y sus antipartículas) son estables respecto a la desintegración espontánea: el fotón, el neutrino, el electrón y el protón. De todas las partículas inestables, la que tiene vida media más larga es el neutrón. Esto puede explicar por qué la materia está compuesta de electrones, protones y neutrones. Notar que los mesones tienen una vida media del orden de 10^{-8} s (con la excepción del π^0 y el η^0) mientras que las vidas medias de los bariones son del orden de 10^{-10} s.

Una condición necesaria — impuesta por la conservación de la energía — para que haya desintegración espontánea es que la masa en reposo de la partícula madre sea mayor que la suma de las masas en reposo de las partículas hijas. Además de la energía, se supone que se conservan el momentum y el momentum angular. Usamos esta hipótesis como guía al analizar las desintegraciones de las partículas fundamentales.

El muon negativo fue la primera partícula inestable que se observó (ver la fig. 9-1). Fue descubierto en los rayos cósmicos en 1937. La desintegración de un muon siempre da lugar a la aparición de un electrón. Estos electrones

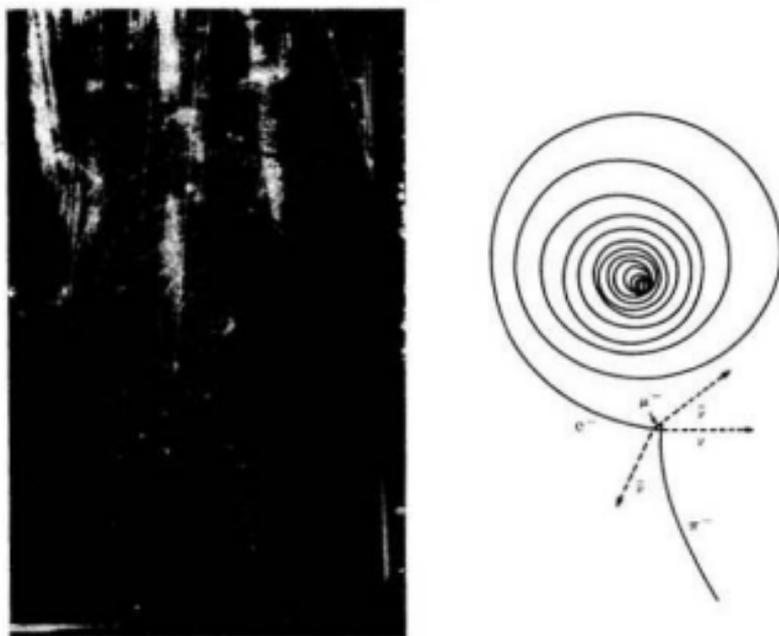


Fig. 9-7. Desintegración de un mesón π^- seguida por la desintegración del muon. (Fotografía cortesía del Laboratorio Nacional de Brookhaven.)

tienen un espectro continuo de energía similar al encontrado en la desintegración β (fig. 8-11), con una energía cinética máxima de 53 MeV. Deducimos de estos dos hechos que la desintegración del muon no puede ser un proceso de dos cuerpos y que se debe producir por lo menos dos partículas neutras además del electrón. Como la energía máxima del electrón es mucho mayor que su energía en reposo (0,5 MeV), su momentum máximo es

$$p_{\max} \approx E_{\max}/c = 53 \text{ MeV}/c.$$

Este momentum máximo corresponde a la emisión de las otras dos partículas en dirección opuesta a la del electrón, debiendo ambas partículas llevarse un momentum total de 53 MeV/c. Si las partículas son neutrinos, su energía total es 53 MeV. Luego, la energía total liberada en la desintegración de un muon es aproximadamente 106 MeV, que es prácticamente la energía en reposo del muon (tabla 9-1). Se ha medido independientemente el espín del muon habiéndose encontrado que es $\frac{1}{2}$; la ley de conservación del momentum angular es entonces otro factor que prohibiría la desintegración de un muon en un electrón y un neutrino, ambos con espín $\frac{1}{2}$. Esta ley permite, sin embargo, que un muon se desintegre en un electrón y dos neutrinos. En consecuencia, podemos suponer

TABLA 9-2 Modos de desintegración de las partículas*

Partícula		Modo de desintegración	Probabilidad relativa, %	Vida media, s
	Fotón	Estable		
Leptones	Neutrino	Estable		
	Electrón Muon	Estable $\mu^- \rightarrow e^- + \nu + \bar{\nu}$		$1,52 \times 10^{-6}$
	Pion	$\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu$ $\rightarrow e^+ + \nu$	100 $\sim 10^{-4}$	$1,80 \times 10^{-8}$
		$\pi^0 \rightarrow \gamma + \gamma$ $\rightarrow \gamma + e^+ + e^-$	99 1	6×10^{-17}
Mesones	Kaón	$K^+ \rightarrow \mu^+ + \nu$ $\rightarrow \pi^+ + \pi^0$ $\rightarrow 2\pi^+ + \pi^-$ $\rightarrow \pi^0 + e^+ + \nu$ $\rightarrow \pi^0 + \mu^+ + \nu$ $\rightarrow \pi^+ + 2\pi^0$	63 21 5,6 4,8 3,4 1,7	$8,56 \times 10^{-8}$
		$K^0 \rightarrow \pi^\pm + e^\mp + \nu$ $\rightarrow \pi^\pm + \mu^\mp + \nu$ $\rightarrow \pi^+ + \pi^- + \pi^0$ $\rightarrow 3\pi^0$	18 14 6,3 11,3	4×10^{-8}
		$K^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^-$ $\rightarrow 2\pi^0$	35 15	$6,0 \times 10^{-11}$
	Eta	$\eta^0 \rightarrow \gamma + \gamma$ $\rightarrow \pi^0 + \gamma + \gamma$ $\rightarrow 3\pi^0$ $\rightarrow \pi^+ + \pi^- + \pi^0$ $\rightarrow \pi^+ + \pi^- + \gamma$	33 20 20 22 5	$< 10^{-16}$
	Protón	Estable		
	Neutrón	$n^0 \rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu}$		$7,0 \times 10^9$
	Lambda	$\Lambda^0 \rightarrow p^+ + \pi^-$ $\rightarrow n^0 + \pi^0$	66 34	$1,76 \times 10^{-10}$
Bariones	Sigma	$\Sigma^+ \rightarrow p^+ + \pi^0$ $\rightarrow n^0 + \pi^+$	53 47	$5,6 \times 10^{-11}$
		$\Sigma^0 \rightarrow \Lambda^0 + \gamma$		$< 7 \times 10^{-16}$
		$\Sigma^- \rightarrow n^0 + \pi^-$		$1,1 \times 10^{-10}$
	Xi	$\Xi^0 \rightarrow \Lambda^0 + \pi^0$		$2,0 \times 10^{-10}$
		$\Xi^- \rightarrow \Lambda^0 + \pi^-$		$1,2 \times 10^{-10}$
	Omega	$\Omega^- \rightarrow \Lambda^0 + K^-$	50	10^{-10}
		$\rightarrow \Xi^0 + \pi^-$	50	

* Para obtener la desintegración de las antipartículas, reemplazar todas las partículas por antipartículas en ambos miembros de las ecuaciones.

con fundamento que se puede representar la desintegración de un muon negativo mediante el modo de desintegración dado en la tabla 9-2.

El pion fue la partícula que se observó a continuación. Fue descubierto en 1946 en emulsiones fotográficas especiales (ver el apéndice VII) expuestas a los rayos cósmicos y producido artificialmente poco después (por medio de protones acelerados en el sincrotrón de Berkeley). El físico japonés Hideki Yukawa había predicho en 1935 la existencia de esta partícula para explicar el corto alcance de las fuerzas nucleares (ver la sección 9.8). Los muones que resultan de la desintegración piónica tienen sistemáticamente una energía cinética fija de alrededor de 4,1 MeV, lo cual indica que dicha desintegración es un proceso de dos cuerpos. En consecuencia podemos suponer que en la desintegración piónica se emite, además del muon, un neutrino en dirección opuesta. El momentum de un muon con la energía cinética mencionada es 29,5 MeV/c, y éste debe ser también el momentum del neutrino. La energía del neutrino es entonces 29,5 MeV. Por lo tanto la energía total liberada en la desintegración de un pion es $105,7 \text{ MeV} + 4,1 \text{ MeV} + 29,5 \text{ MeV} = 139,3 \text{ MeV}$, que concuerda aproximadamente con la energía en reposo del pion: 140 MeV. Podemos suponer entonces que el esquema de desintegración del pion es el que se indica en la tabla 9-2. Concluimos de la des-

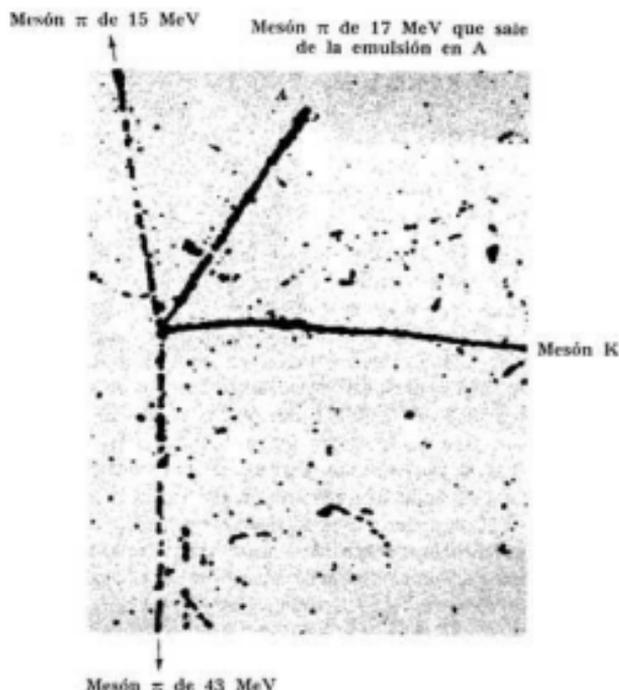


Fig. 9-8. Desintegración del mesón K en tres piones (modo π). (Fotografía cortesia del Laboratorio Nacional de Brookhaven.)

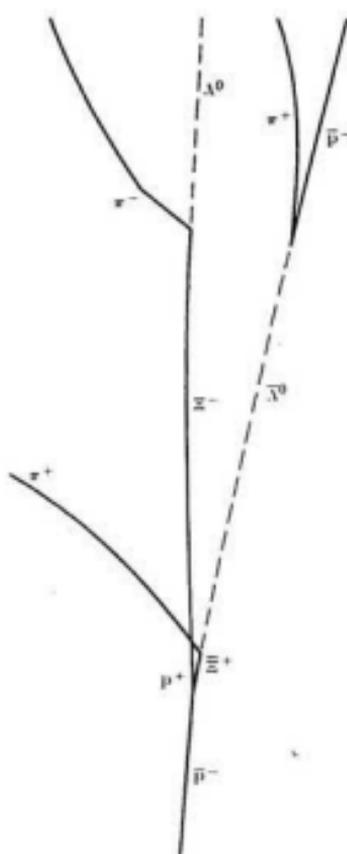


Fig. 9-10. Eventos iniciados por una aniquilación protón-antiprotón. (Fotografía cortesía del Laboratorio Nacional de Brookhaven.)

Cada proceso ha sido verificado cuidadosamente por medio de las leyes de conservación de la energía y del momentum. Esta verificación permite identificar las partículas neutras, que no dejan trazas.

La producción de varias partículas nuevas en una colisión de dos partículas de alta energía es otra manera en que se manifiesta la inestabilidad de una partícula. Por ejemplo, en una colisión protón-protón pueden ocurrir los siguientes procesos:



EJEMPLO 9.3. Cálculo del umbral de energía para un proceso en el que un proyectil choca con un blanco en reposo en el laboratorio dando lugar a varias partículas nuevas.

Solución: Llamando P_1 y P_2 al proyectil y al blanco, y P_i a las partículas resultantes, podemos escribir

$$P_1 + P_2 \rightarrow \sum_i P_i.$$

Si el momentum de P_1 es p en el sistema de referencia L , su energía total es $c\sqrt{m_1^2 c^2 + p^2}$. Como P_2 está en reposo en el sistema L , su energía total es $m_2 c^2$. La energía total en el sistema L es entonces

$$E = c\sqrt{m_1^2 c^2 + p^2} + m_2 c^2$$

y el momentum total es p . En el sistema de referencia C el momentum de las dos partículas es cero, esto es, $p' = 0$ (ver el apéndice I). Llamemos E' a la energía total del sistema en el marco de referencia C . Debido a la relación energía-momentum, la cantidad $E^2 - c^2 p^2$ es invariante frente a una transformación de Lorentz de un sistema inercial de referencia a otro. Luego, recordando que $p' = 0$, tenemos

$$E^2 - c^2 p^2 = E'^2.$$

Las leyes de conservación de la energía y del momentum requieren que después que el proceso haya tenido lugar, la energía total de los productos en el sistema C sean aún E' y que el momentum total sea cero. Evidentemente, la energía mínima necesaria para el proceso corresponde al caso en que todas las partículas están en reposo en el sistema de referencia C , de modo que la energía total en ese sistema es $E' = \sum_i m_i c^2$. Sustituyendo valores en la ecuación precedente obtenemos

$$m_1^2 c^4 + m_2^2 c^4 + 2m_2 c^2 \sqrt{m_1^2 c^2 + p^2} = (\sum_i m_i)^2 c^4.$$

Pero si E_k es la energía cinética del proyectil en el sistema de referencia L , se tiene

$$c\sqrt{m_1^2 c^2 + p^2} = E_k + m_1 c^2.$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación precedente y cancelando el factor común c^2 resulta

$$(m_1 + m_2)^2 c^2 + 2m_2 E_k = (\sum_i m_i)^2 c^2.$$

Luego,

$$E_k = -QM/2m_2 \quad (9.8)$$

donde $Q = (m_1 + m_2 - \sum_i m_i)c^2$ y $M = m_1 + m_2 + \sum_i m_i$. La ec. (9.8) da la energía cinética mínima que debe tener el proyectil para que ocurra un proceso dado. Si Q es positivo no hay umbral de energía cinética y la energía en reposo de las partículas iniciales es suficiente para producir las partículas finales. Sólo hay umbral de energía si Q es negativo. Ilustraremos el empleo de la ec. (9.8) aplicándola a dos casos especiales.

a) *Umbral para la producción de un pión en una colisión protón-protón.* Considerando un pión neutro tenemos que $p^+ + p^+ \rightarrow p^+ + p^+ + \pi^0$. Luego

$$Q = -m_\pi c^2, \quad M = 4m_p + m_\pi, \quad \text{y} \quad m_2 = m_p,$$

resultando

$$E_k = \frac{m_\pi c^2 (4m_p + m_\pi)}{2m_p} = \left(2 + \frac{m_\pi}{2m_p}\right) m_\pi c^2 \approx 290 \text{ MeV}.$$

Para un pión cargado se obtiene un resultado análogo.

b) Umbral para la producción de un antiprotón en una colisión protón-protón. El proceso es ahora $p^+ + p^+ \rightarrow p^+ + p^+ + p^+ + \bar{p}^-$. Todas las partículas tienen la misma masa m_p . Luego

$$m_2 = m_p, \quad Q = -2m_p c^2, \quad \text{y} \quad M = 6m_p,$$

lo cual da para el umbral de energía,

$$E_k = (2m_p c^2)(6m_p)/2m_p = 6m_p c^2 = 5,64 \times 10^9 \text{ MeV} = 5,64 \text{ GeV}.$$

EJEMPLO 9.4. Determinación del momento magnético del hiperón Λ^0 .

Solución: Describiremos ahora un experimento interesante que ilustra las técnicas que se emplean para determinar las propiedades de las partículas fundamentales. Nos referimos a la medición del momento magnético del hiperón Λ^0 . El método, que es similar al utilizado para determinar el momento magnético de cualquier hiperón, consta de tres etapas: (a) producción de un haz polarizado de Λ^0 , (b) paso del haz polarizado a través de un campo magnético intenso que produce un cambio en la dirección del momento magnético, (c) medición del ángulo de rotación del momento magnético.

Se han realizado varios experimentos para analizar la desintegración en un campo magnético de los Λ^0 polarizados. Describiremos el que se realizó en 1964 en el CERN (Centro Europeo para la Investigación Nuclear). Un haz de piones negativos del sincrotrón protónico del CERN, que tienen un momentum de 1,05 GeV, incide sobre un blanco de polietileno (fig. 9-13), donde tiene lugar la reacción $\pi^- + p^+ \rightarrow \Lambda^0 + K^0$.

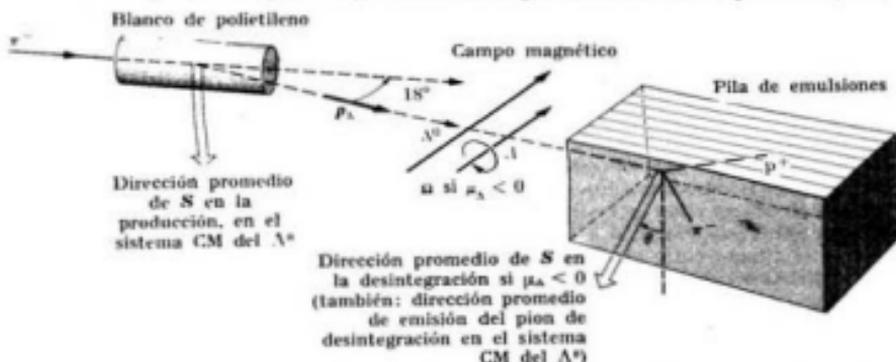


Fig. 9-13. Diagrama esquemático del experimento para determinar el momento magnético del Λ^0 .

Se elige el momentum de modo que corresponda a la energía para la cual la sección eficaz de la reacción es máxima. Como la energía de la partícula π^- está cerca del umbral de energía, 0,78 GeV (ver la ec. 9.8), el Λ^0 y el K^0 se producen principalmente hacia delante respecto al laboratorio porque están prácticamente en reposo en el sistema de referencia C del proceso.

Los Λ^0 están fuertemente polarizados, siendo su espín S normal al plano de producción (el plano determinado por las direcciones de movimiento del π^- incidente y el Λ^0 resultante). Se hace que los Λ^0 producidos en un ángulo entre 13° y 23° respecto a la dirección de incidencia pasen a través de un campo magnético intenso de 15 T, perpendicular a p_Λ y S .

Según la ec. (7.5), el momento magnético del Λ^0 se debe escribir en la forma

$$\mathbf{M}_\Lambda = g_\Lambda(e/2m_\Lambda)\mathbf{S},$$

donde g_Λ es la razón giromagnética del Λ^0 . Empero, es costumbre escribir el momento magnético del siguiente modo

$$\mathbf{M}_\Lambda = g_\Lambda(m_p/m_\Lambda)(e/2m_p)\mathbf{S} = \mu_\Lambda(e/m_p)\mathbf{S},$$

y la cantidad que se busca experimentalmente es $\mu_\Lambda = \frac{1}{2}g_\Lambda(m_p/m_\Lambda)$, que da el momento magnético del Λ^0 en magnetones nucleares. En presencia de un campo magnético hay un torque $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{M}_\Lambda \times \mathbf{B}$, por lo que la ecuación de movimiento del espín es $d\mathbf{S}/dt = \boldsymbol{\tau}$, o sea

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \mu_\Lambda(e/m_p)\mathbf{S} \times \mathbf{B} = -\mu_\Lambda(e/m_p)\mathbf{B} \times \mathbf{S},$$

y \mathbf{S} efectúa un movimiento de precesión alrededor de \mathbf{B} con velocidad angular*

$$\boldsymbol{\Omega} = -\mu_\Lambda(e/m_p)\mathbf{B}.$$

Si μ_Λ es negativo, la precesión de \mathbf{S} alrededor de \mathbf{B} es en el sentido indicado por la flecha A en la fig. 9-13 y en sentido opuesto si μ_Λ es positivo. Después de un tiempo t el espín \mathbf{S} ha rotado un ángulo $\theta = \Omega t$. Si v es la velocidad del Λ^0 y l la distancia que se mueve en el campo magnético, tenemos $t = l/v$ y por lo tanto

$$\theta = \mu_\Lambda \left(\frac{e}{m_p} \right) \frac{Bl}{v}. \quad (9.9)$$

Luego, si se puede medir θ , es posible determinar μ_Λ en función de cantidades conocidas.

En la práctica, la parte más interesante (y difícil) del experimento es la medición de θ , que requiere la determinación de la dirección de \mathbf{S} después que el Λ^0 atraviesa el campo magnético. Se puede medir el ángulo θ observando la distribución angular de los productos de la desintegración del Λ^0 . Se coloca una pila de emulsiones fotográficas en la dirección del haz de Λ^0 , como se muestra en la figura. Muchos Λ^0 se desintegran en las emulsiones conforme al proceso $\Lambda^0 \rightarrow \pi^- + p^+$. Como ambos productos de la desintegración tienen carga, dejan trazas en las emulsiones.

En la desintegración $\Lambda^0 \rightarrow \pi^- + p^+$ los piones tienen una distribución anisótropa (aunque simétrica) respecto a la dirección de \mathbf{S} en el sistema de referencia C del Λ^0 . Si ϕ es el ángulo entre el momentum del π^- y \mathbf{S} , se encuentra experimentalmente que la distribución angular de π^- en el sistema C del Λ^0 es proporcional a $1 + k \cos \phi$ que tiene un máximo pronunciado en la dirección de \mathbf{S} . Luego, analizando la distribución angular de los piones de desintegración en un haz de hiperones Λ^0 polarizados, se puede determinar la dirección de polarización de los Λ^0 , que es la dirección de \mathbf{S} , y obtener de esta forma el ángulo θ . Luego, aplicando la ec. (9.9) se puede hallar μ_Λ . Para realizar los cálculos es preciso considerar cuidadosamente cantidades referidas a los sistemas de referencia del laboratorio y del centro de masa del Λ^0 . El valor obtenido en el CERN fue $\mu_\Lambda = -0,5 \pm 0,28$ magnetones nucleares. El valor predicho teóricamente sobre la base de la teoría de Gell-Mann llamada "camino óctuple" (sección 9.8) es $-0,95$ magnetones nucleares. El momento magnético del Λ^0 fue medido anteriormente en Brookhaven, en Argonne y en la Universidad de California empleando métodos bastante parecidos. Los resultados fueron, respectivamente, $-1,5 \pm 0,5$ mn, $0 \pm 0,6$ mn y $-1,39 \pm 0,7$ mn. La medida más reciente (1966) realizada por Hill y colaboradores en el Laboratorio de Brookhaven es $-0,73 \pm 0,16$ mn.

* Deberíamos efectuar el cálculo empleando la mecánica relativista a causa de las energías involucradas. Sin embargo, usamos para simplificar un cálculo no relativista que da el resultado correcto (en lo que concierne al valor de Ω) cuando el Λ^0 se mueve perpendicularmente a \mathbf{B} .

9.5 Leyes de conservación

En todos los procesos tratados en la sección precedente, se ha encontrado que las siguientes leyes de conservación son válidas sin excepción:

- (1) conservación del momentum
- (2) conservación del momentum angular
- (3) conservación de la energía
- (4) conservación de la carga

Dentro de las limitaciones impuestas por estas cuatro leyes de conservación, las partículas fundamentales se presentan a primera vista como un grupo desordenado de entes físicos que tienden a transformarse unos en otros sin orden aparente alguno. Podemos comprender, por ejemplo, que el electrón y el positrón sean estables porque no hay otras partículas cargadas más livianas en las cuales puedan desintegrarse sin violar la conservación de la carga. Pero, ¿por qué el protón es estable y por qué no se desintegra, por ejemplo, conforme al esquema $p^+ \rightarrow \pi^+ + \nu$? ¿Por qué ciertos procesos — tales como $\gamma \rightarrow e^- + p^+$, $\Lambda^0 \rightarrow \bar{p}^- + \pi^+$ ó $\pi^+ + p^+ \rightarrow \Sigma^+ + \pi^+$, que cumplen aquellas leyes de conservación — no ocurren en la naturaleza? ¿Por qué tienen las partículas un espectro de masas un tanto arbitrario?

La situación es análoga a la de un alquimista de la Edad Media tratando de comprender las reacciones químicas sin conocer la estructura atómica o molecular. Los físicos de hoy están tratando activamente de encontrar algún orden en este caos aparente. Afortunadamente, se ha introducido un cierto orden con el descubrimiento de nuevas leyes de conservación que se parecen más a la ley de conservación de la carga que a las otras tres. Estas leyes son:

- (5) conservación de los leptones
- (6) conservación de los bariones
- (7) conservación del isospin
- (8) conservación de la extrañeza

A continuación discutiremos brevemente cada una de estas leyes.

Los datos experimentales llevaron a la conclusión de que los mesones y los fotones (y, en general, todas las partículas de espín 0 ó 1) se pueden producir o aniquilar en cualquier número (esta es una de las razones para llamarlos bosones). Por el contrario, los leptones y los bariones están restringidos en cuanto al número que se puede producir o aniquilar en un proceso individual. Por ejemplo, el proceso de producción de pares electrónicos $\gamma \rightarrow e^- + e^+$, en el que dos leptones — un electrón y su antipartícula, un positrón — se crean a partir de un fotón, es posible. Pero no ocurre el proceso de producción electrón-protón $\gamma \rightarrow e^- + p^+$, que cumpliría las cuatro primeras leyes de conservación. En este proceso (que no se observa) sólo se produce un leptón y un barión. Son los hechos experimentales de este tipo los que dan fundamento a la cuarta y quinta leyes de conservación.

Conservación de los leptones. Introduzcamos el número cuántico leptónico definido como sigue: $\mathcal{L} = +1$ para las partículas leptónicas y $\mathcal{L} = -1$ para las antipartículas leptónicas. El número leptónico de las partículas que no son leptones es cero. Luego:

el número leptónico total permanece constante en cualquier proceso.

Consideremos algunos ejemplos: en el proceso $\gamma \rightarrow e^- + e^+$ el número leptónico del primer miembro es $\mathcal{L} = 0$ y el del segundo es $\mathcal{L} = 1 - 1 = 0$. Por el contrario, en el proceso $\gamma \rightarrow e^- + p^+$, que no se observa, tenemos $\mathcal{L} = 0$ en el primer miembro y $\mathcal{L} = +1$ en el segundo por lo que se viola la conservación de los leptones. La ley de conservación de los leptones requiere que la ec. (8.14) se escriba en la forma

$$\begin{array}{ccccccc} n & \rightarrow & p^+ & + & e^- & + & \bar{\nu} \\ \mathcal{L} = 0 & & 0 & & +1 & & -1 \end{array} \quad (9.10)$$

para asegurar que el número leptónico total sea cero en ambos miembros. Así también, la conservación de los leptones requiere que en la desintegración β^- se emita un antineutrino y *no* un neutrino. También debemos escribir la ec. (8.17) en la forma $p^+ + \bar{\nu} \rightarrow n + e^+$, con un número leptónico total $\mathcal{L} = -1$ en ambos miembros. Es por esto que en el experimento de Cowan-Reines (ejemplo 8.6) fue un antineutrino lo que se detectó. Notar que en las ecs. (8.15) y (8.16) para la desintegración β^+ y la captura electrónica es necesario un neutrino para satisfacer la conservación de los leptones. Examinando los esquemas de desintegración de la tabla 9-2, el estudiante debería verificar en cada caso la ley de conservación de los leptones y justificar que se indique un antineutrino en algunos casos.

Mencionemos al pasar que datos experimentales recientes (1962) parecen sugerir que los neutrinos que resultan de la desintegración de piones no son idénticos a los producidos en la desintegración de muones o en la desintegración β . La fig. 9-14 muestra esquemáticamente el experimento realizado por un grupo de la Universidad de Columbia utilizando el acelerador de gradiente alternado del Laboratorio de Brookhaven. Se expuso una cámara de chispas fuertemente blindada a los antineutrinos resultantes de la desintegración piónica $\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \bar{\nu}$.

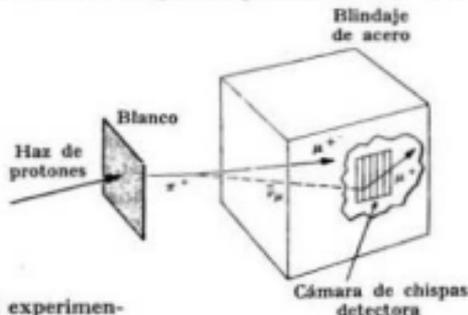
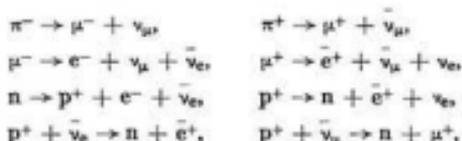


Fig. 9-14. Diagrama esquemático del experimento ν_{μ} .

Los piones habían sido producidos haciendo incidir protones de alta energía sobre un blanco conveniente. Si los antineutrinos que chocaban con los núcleos en la cámara de chispas fueran idénticos a los producidos en la desintegración β , podrían producir una de las siguientes reacciones: $p^+ + \bar{\nu} \rightarrow n + e^+$ ó $p^+ + \bar{\nu} \rightarrow n + \mu^+$. Por el contrario, si hubiera dos clases de neutrinos sólo la segunda reacción estaría permitida. Después de varios días, durante los cuales se estimó que 10^{14} antineutrinos habían atravesado la cámara de chispas, se observó cerca de 50 procesos en los que se producían muones mientras que no se observó la presencia de positrones. Esto sugiere que la primera reacción está prohibida y que los neutrinos producidos en la desintegración piónica no son los mismos que los producidos en la desintegración β . En consecuencia, actualmente se acostumbra escribir



donde ν_{μ} designa el neutrino asociado con el muon de la desintegración del pion y ν_e el asociado con el electrón en la desintegración del muon o el nucleón.

Conservación de los bariones. Definiendo un número cuántico bariónico b tal que $b = +1$ para todas las partículas bariónicas, $b = -1$ para todas las antipartículas bariónicas y cero para todas las partículas que no son bariones, podemos decir que

el número bariónico total permanece constante en cualquier proceso.

El estudiante puede verificar que se cumple esta ley en todos los procesos mencionados en que intervienen bariones, tales como las ecs. (9.2), (9.4), (9.5), (9.6) y (9.7), y los esquemas de desintegración de la tabla 9-2. Como el protón es el más liviano de todos los bariones, su desintegración en partículas más livianas (que no pueden ser bariones) violaría la ley de conservación de los bariones; esto explica por qué el protón es una partícula estable. Entonces, el mundo en que vivimos es en cierta medida el resultado de las leyes de conservación de los leptones y de los bariones.

Conservación del isospín. En la fig. 9-2 las partículas y antipartículas están agrupadas conforme a sus masas o energías en reposo. Si consideramos sólo las partículas afectadas por las interacciones fuertes (mesones y bariones) notamos que forman *multipletes*, esto es: singlete (η^0 , Ω^- , Λ^0), doblete (K^+ y K^0 , p^+ y n^0 , Ξ^0 y Ξ^-) y tripletes (Σ^+ , Σ^0 y Σ^- , π^+ , π^0 y π^-).^{*} Esto sugiere que caractericemos cada multiplete con una cantidad τ llamada *isospín*, tal que $2\tau + 1$ da el número

^{*} Como el π^0 es idéntico a su antipartícula, ha sido colocado en el centro del diagrama y se debe considerar el conjunto π^+ , π^0 , π^- de un modo especial.

TABLA 9-3 Isospín (τ, τ_z), extrañeza (s) e hipercarga (y) de los mesones y los bariones*

Partículas	τ	τ_z	s	y
<i>Mesones</i>				
π^+, π^0, π^-	1	(1, 0, -1)	0	0
K^+, K^0	$\frac{1}{2}$	($\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$)	1	1
η^0	0	0	0	0
<i>Bariones</i>				
p^+, n	$\frac{1}{2}$	($\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$)	0	1
Λ^0	0	0	-1	0
$\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-$	1	(1, 0, -1)	-1	0
Ξ^0, Ξ^-	$\frac{1}{2}$	($\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$)	-2	-1
Ω^-	0	0	-3	-2

* La extrañeza y la hipercarga de las partículas tienen signos opuestos a los de las correspondientes partículas. Se designa frecuentemente a los mesones y los bariones con el nombre genérico de *hadrones*.

de partículas en cada multiplete. Es decir, que $\tau = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$ para los tripletes, los dobletes, etc. Usamos la palabra "isospín" porque se refiere a partículas que tienen prácticamente la misma masa y espín y ocupan por lo tanto el mismo lugar en una escala de masas.* Podemos notar que tiene cierto parecido con un momentum angular J , que puede tener $2J + 1$ orientaciones en el espacio caracterizadas por un valor de su componente Z , J_z , y ésta es la razón de la raíz "espín" en el nombre de τ . Podemos entonces considerar que el isospín es un vector en un cierto espacio representativo llamado espacio del isospín. El vector tiene una longitud $\sqrt{\tau(\tau + 1)}$ y tiene $2\tau + 1$ orientaciones posibles respecto al eje Z , las cuales corresponden a los valores posibles de su componente Z dados por $\tau_z = \pm\tau, \pm(\tau-1), \pm(\tau-2), \dots$ Cada partícula de un multiplete corresponde a un valor de τ_z asignado en orden de carga decreciente. Por ejemplo, tenemos $\tau_z = +\frac{1}{2}$ para los protones y $\tau_z = -\frac{1}{2}$ para los neutrones. Los multipletes de partículas y los de antipartículas tienen el mismo isospín τ pero valores opuestos de τ_z . La tabla 9-3 da el isospín de los mesones y los bariones.

El isospín total \mathcal{T} de un sistema de partículas se obtiene sumando vectorialmente los isospines de cada partícula, empleando las mismas reglas de adición que para el momentum angular (sección 3.8). Consideremos por ejemplo el sistema $p^+ + p^+$. Las dos partículas tienen $\tau = \frac{1}{2}$ que se puede sumar para dar un isospín resultante $\mathcal{T} = 1$ ó 0 . Pero como $\mathcal{T}_z = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$, el sistema de dos protones correspondiente necesariamente a $\mathcal{T} = 1$. En cambio, el sistema $p^+ + n$ tiene $\mathcal{T}_z = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$ por lo que el isospín total puede ser $\mathcal{T} = 1$ ó 0 . Análogamente, $\pi^+ + p^+$ puede tener un isospín total $\frac{3}{2}$ ó $\frac{1}{2}$, pero como $\mathcal{T}_z = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$,

* También se utiliza los nombres de *espín isobárico* y *espín isotópico* para describir esta propiedad.

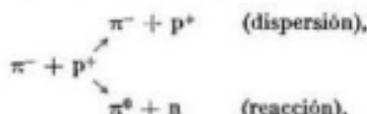
es necesariamente $T = \frac{1}{2}$. En cambio $\pi^0 + p^+$ y $\pi^- + p^+$, que tienen $T_z = \frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$ respectivamente, pueden corresponder a $T = \frac{1}{2}$ ó $\frac{3}{2}$.

Parece que la interacción fuerte o nuclear es independiente de la carga. Por ejemplo, hay una evidencia experimental amplia de que la interacción nuclear en los pares $p^+ p^+$ ($T_z = +1$), $n p^+$ ($T_z = 0$) y $n n$ ($T_z = -1$) es la misma. Por lo tanto, la interacción fuerte es independiente del valor total de T_z para las partículas interactuantes. Luego, *la interacción fuerte entre dos partículas depende sólo de su isospín total T* .

Por ejemplo, en el proceso de dispersión



tenemos $T_z = \frac{1}{2}$, que corresponde necesariamente a $T = \frac{1}{2}$, en ambos miembros de la ecuación y la sección eficaz medida varía con la energía del proyectil π^+ como se muestra en la fig. 9-15, curva (a), teniendo un máximo pronunciado a una energía cercana a los 300 MeV. Sin embargo, en el caso de



tenemos $T_z = -\frac{1}{2}$, que puede corresponder a $T = \frac{1}{2}$ ó $\frac{3}{2}$. La sección eficaz total observada está representada por la curva (b) de la fig. 9-15. El pico correspondiente a $T = \frac{1}{2}$ aparece prácticamente a la misma energía que en el caso anterior $\pi^+ + p^+$ con igual isospín, pero se observa un segundo pico cerca de los 1000 MeV que se atribuye al estado con $T = \frac{3}{2}$.

Como resultado del análisis de los procesos en que intervienen partículas con interacción fuerte, podemos decir que

el isospín total se conserva en las interacciones fuertes.

La conservación del isospín total es una ley rigurosa solamente para interacciones fuertes, pero puede ser violada en procesos con interacción electromagnética o débil. Por ejemplo, en el proceso observado $K \rightarrow \pi^+ + \pi^-$, tenemos $T = \frac{1}{2}$ en el primer miembro y $T = 1$ ó 0 en el segundo, de modo que T no se conserva.

Además de la ley de conservación del isospín total, tenemos que

tanto la interacción fuerte como la electromagnética conservan la componente T_z del isospín total.

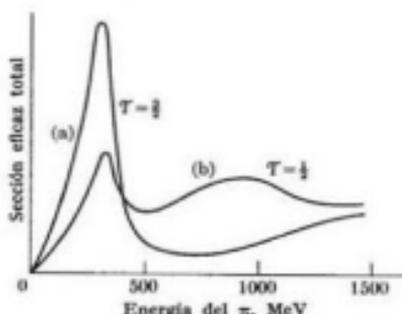


Fig. 9-15. Sección eficaz en función de la energía para las colisiones: (a) $\pi^+ + p^+$ y (b) $\pi^- + p^+$.

Esta es una ley rigurosa que se sigue en todos los casos y es completamente equivalente a la ley de conservación de la carga.

Conservación de la extrañeza. Otro atributo inventado para caracterizar partículas sujetas a interacciones fuertes es la *extrañeza* s , definida de modo que la carga de una partícula de un multiplete esté dada por

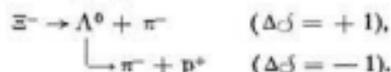
$$q = e(\tau_3 + \frac{1}{2}b + \frac{1}{2}s). \quad (9.11)$$

Los valores de s están dados en la tabla 9-3. Las partículas y las antipartículas tienen extrañeza opuesta. La ley de conservación de la extrañeza requiere que

la extrañeza total s debe permanecer constante en los procesos debidos a las interacciones fuerte y electromagnética.

Por ejemplo, el proceso $\pi^- + p^+ \rightarrow n^0 + \Lambda^0$, que satisface todas las otras leyes de conservación, no se observa porque la extrañeza total del primer miembro es cero mientras que la del segundo es -1 . En cambio, los procesos tales como $\pi^+ + p^+ \rightarrow \Sigma^+ + K^+$ y $\pi^- + p^+ \rightarrow \Lambda^0 + K^0$ sí ocurren. En ambos casos la extrañeza total permanece igual a cero. Es decir, que en todas las colisiones pión-nucleón (sistema que tiene extrañeza cero) los hiperones se deben producir en pares con extrañeza opuesta; este fenómeno se denomina *producción asociada*. Fue precisamente la observación sistemática de la producción asociada de ciertos hiperones lo que dio la clave de la ley de conservación de la extrañeza.

La conservación de la extrañeza no es una ley rigurosa; las interacciones débiles pueden violarla permitiendo un cambio de extrañeza de ± 1 . En la mayoría de las desintegraciones bariónicas (tabla 9-2) se viola la conservación de la extrañeza, lo cual indica que las desintegraciones tienen lugar por medio de interacciones débiles. Por ejemplo



Los hiperones no pueden desintegrarse en bariones por medio de la interacción fuerte con conservación de la extrañeza porque el Q de esos procesos es negativo. Esto explica por qué los hiperones se desintegran tan lentamente (alrededor de 10^{-10} s) en comparación con el tiempo involucrado en su producción o aniquilación en colisiones por medio de interacciones fuertes, que es de cerca de 10^{-23} s. De la comparación de estos dos tiempos podemos concluir que la intensidad de la interacción débil es alrededor de 10^{-13} veces menor que la de la interacción fuerte.

Podríamos mencionar a esta altura que la *hipercarga* es otro parámetro que se puede usar en vez de la extrañeza para clasificar partículas; se define por $y = b + s$. La tabla 9-3 da los valores de la hipercarga. Se puede reemplazar la ley de conservación de la extrañeza por una ley de conservación de la hipercarga, debido a la ley de conservación de los bariones y a la definición de y .

Las nuevas leyes de conservación que hemos introducido en esta sección pueden parecer convenciones más o menos *ad hoc* para explicar los hechos experimentales.

Sin embargo, el que sean sistemáticamente aplicables a un gran número de situaciones sugiere que tienen un significado físico más profundo. Actualmente la conexión de esas leyes con las propiedades físicas de las partículas no se conoce bien en todos los casos y constituye un tema abierto de investigación.

9.6 Invariancia, simetría y leyes de conservación

El origen de algunas de las leyes de conservación que acabamos de discutir se remonta a ciertas propiedades de invariancia y de simetría de los sistemas físicos, las cuales consideraremos brevemente a continuación.

Traslación espacial. Supongamos que el espacio es homogéneo y uniforme, es decir, que tiene simetría traslacional en todos sus puntos. Debemos concluir entonces que un sistema físico se comportará del mismo modo cualquiera sea su posición en el espacio vacío. Utilizando una terminología más matemática, la descripción de las propiedades de un sistema físico aislado es invariante frente a la traslación del sistema respecto a un sistema de referencia. Por ejemplo, se debe describir una molécula aislada compuesta de varios electrones y núcleos exactamente en la misma forma cualquiera sea su ubicación respecto a un observador. Por otra parte, sabemos que el momentum total de un sistema aislado es constante. Se puede demostrar entonces que

la conservación del momentum de un sistema aislado resulta de la invariancia traslacional de las leyes que describen el sistema.

El sistema puede no estar aislado en algunos casos, pero el medio físico puede tener alguna simetría traslacional. Consideremos un electrón colocado entre dos planos infinitos paralelos que tienen cargas iguales y opuestas. Evidentemente las condiciones físicas no cambian si el electrón se desplaza paralelamente a los planos. Sabemos entonces que cuando el electrón se pone en movimiento, su momentum paralelo a los planos es constante, (esto se enuncia comúnmente diciendo que el campo eléctrico producido por los planos cargados es perpendicular a los mismos). Encontramos así nuevamente que *la conservación del momentum en una dirección dada es consecuencia de la invariancia traslacional de las condiciones físicas en esa dirección.*

Rotación espacial. Si suponemos que el espacio es isótropo (es decir, que tiene simetría rotacional en cualquier punto), la descripción de las propiedades de un sistema aislado debe ser independiente de su orientación espacial respecto a un sistema de referencia dado. Consideremos nuevamente una molécula aislada: la descripción de sus propiedades es independiente de su orientación respecto al observador. Por otra parte, sabemos que el momentum angular total de un sistema aislado es constante. Se puede demostrar entonces que

la conservación del momentum angular de un sistema aislado resulta de la invariancia rotacional de las leyes que describen el sistema.

En algunos casos el sistema físico puede tener cierta simetría rotacional aunque no esté aislado. Por ejemplo, un campo central de fuerzas tiene simetría esférica. Sabemos entonces que como consecuencia de la simetría el momentum angular (respecto al centro de fuerzas) de una partícula que se mueve bajo la acción de fuerzas centrales es constante. Si el campo tiene simetría cilíndrica, como en el caso de la fuerza que se ejerce sobre un electrón en una molécula diatómica o en el de una partícula cargada en un campo magnético uniforme, la componente del momentum angular respecto al eje de simetría es constante. Luego, encontramos también que *la conservación del momentum angular en una dirección dada es consecuencia de la simetría rotacional de las condiciones físicas respecto a esa dirección.*

Tanto la simetría traslacional como la rotacional imponen ciertas limitaciones en la forma matemática de las leyes físicas; empero, este es un tema que no podemos seguir explorando aquí.

Traslación temporal. Invariancia frente a traslaciones temporales significa que si preparamos un sistema físico y lo dejamos evolucionar sin interferencias externas, la evolución será la misma cualquiera sea el instante en el cual se lo preparó, o en otras palabras, cualquiera sea el origen del tiempo que se elija. Empleando un razonamiento más elaborado, podemos demostrar que

la conservación de la energía de un sistema aislado es consecuencia de la invariancia de las leyes que describen el sistema respecto a la elección del origen del tiempo,

esto es, respecto a las traslaciones temporales. Tanto las leyes de la mecánica clásica como de la cuántica son invariantes frente a traslaciones temporales.

Transformación de aforo. La cuarta ley de conservación, la de la carga, es algo difícil de asociar en forma elemental con una transformación de simetría y una propiedad de invariancia. Podemos demostrar que

la conservación de la carga resulta de la invariancia de las leyes del campo electromagnético (o sea las ecuaciones de Maxwell) frente a una transformación "de aforo".

En este texto no podemos explicar en detalle qué se entiende por transformación de aforo;* un caso simple de transformación de aforo es un cambio en el cero del potencial eléctrico (o escalar), lo cual no afecta el campo eléctrico o la forma de las ecuaciones de Maxwell. Otro tipo de transformación de aforo es un cambio en la fase de la función de onda, o sea el reemplazo de ψ por $e^{i\theta}\psi$. Evidentemente esto no cambia la densidad de probabilidad $|\psi|^2$ que es la cantidad observable.

Rotación del isospín. ¿Hay otras operaciones de simetría que es posible relacionar con leyes de conservación? Hemos indicado que el isospín se con-

* Ver, por ejemplo, Panofsky y Phillips, *Classical Electricity and Magnetism*, segunda edición (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1962), sección 14.1.

serva porque la interacción fuerte es independiente de la carga. Podemos poner esto en la misma forma que las cuatro leyes de conservación anteriores diciendo que

el isospín se conserva porque las interacciones fuertes son invariantes frente a rotaciones en el espacio del isospín.

Esta invariancia significa que la interacción debe contener los isospines τ_1 y τ_2 de las partículas interactuantes sólo en formas tales como $\tau_1 \cdot \tau_2$ que es invariante rotacional, pero no en la forma $\tau_{11}\tau_{22}$ que no lo es. Desafortunadamente no podemos extendernos más acerca del significado matemático de los enunciados anteriores, pero es evidente la analogía con la conservación del momentum angular en un campo de fuerzas centrales.

Reflexión de la carga. Las interacciones electromagnética y fuerte son invariantes frente al reemplazo de todas las cargas por las de signo opuesto (esto es, $q \rightarrow -q$); esta operación se denomina *reflexión de la carga*. Se puede demostrar que esto conduce a la conservación de la componente Z, T_z , del isospín total en dichas interacciones.

Todavía no se ha asociado una propiedad de simetría o una invariancia simple con la conservación de los leptones y de los bariones. Hay, empero, tres operaciones más de simetría que son de gran importancia en el comportamiento fundamental de la materia. Ellas son: la paridad P, la conjugación de carga C y la inversión del tiempo T.

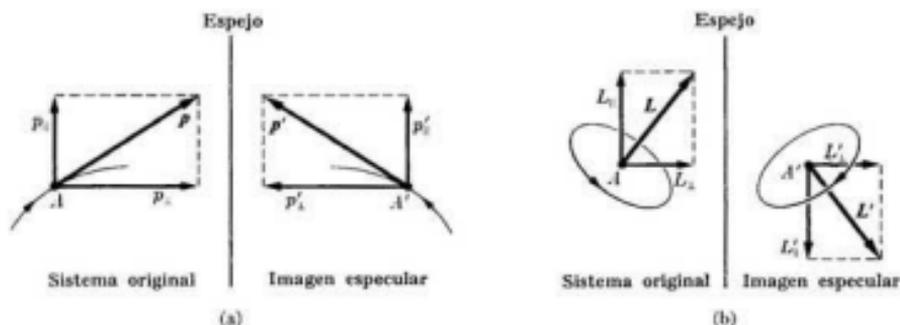


Fig. 9-16. Reflexión en un plano (a) del momentum, (b) del momentum angular.

Paridad. Este concepto, que ya consideramos en la sección 2.9, se refiere a la operación de reflexión espacial respecto a un plano o a un punto, tal como el origen de coordenadas. Veamos primero cuál es el comportamiento de algunas cantidades dinámicas en la reflexión en un plano. Consideremos la partícula A (fig. 9-16a) que se mueve con momentum \mathbf{p} . La imagen especular de A es otra partícula A' que se mueve con momentum \mathbf{p}' tal que $p_{\parallel} = p'_{\parallel}$, $p_{\perp} = -p'_{\perp}$, donde \parallel y \perp indican respectivamente las direcciones paralela y perpendicular al plano. Consideremos ahora una partícula moviéndose como se muestra en la

fig. 9-16(b) con momentum angular \mathbf{L} . La imagen especular de A es otra partícula A' girando como se muestra en la figura y que tiene, por lo tanto, un momentum angular \mathbf{L}' tal que $L_{\parallel} = -L'_{\parallel}$, $L_{\perp} = L'_{\perp}$. Vemos entonces que en la reflexión en un plano, \mathbf{p} y \mathbf{L} se comportan de modo diferente. Por esta razón se dice que \mathbf{p} es un vector polar y \mathbf{L} un vector axial. Todos los vectores que aparecen en las leyes físicas son polares o axiales. El estudiante puede verificar, examinando la fig. 9-17, que el campo eléctrico es polar y que el campo magnético es axial. El vector fuerza también es polar.

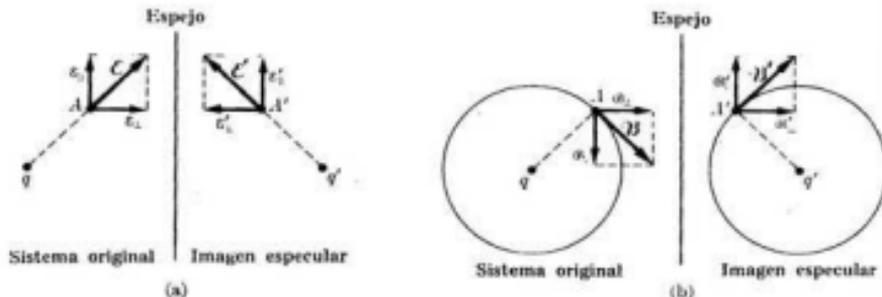


Fig. 9-17. Reflexión en un plano (a) del campo eléctrico, (b) del campo magnético.

Las leyes de la mecánica clásica son invariantes frente a reflexiones, es decir, frente a la operación de paridad P . En otras palabras: si un sistema físico dado satisface las leyes clásicas de movimiento, su imagen especular también satisface las leyes de movimiento y puede existir en la naturaleza. Esto significa que en el enunciado matemático de las leyes de la física clásica las cantidades polares y axiales deben aparecer de modo tal que la reflexión espacial no cambie las relaciones entre ellas. Podemos decir, entonces, que la mecánica clásica es invariante frente a reflexiones espaciales.

La ley de conservación de la paridad establece que

la paridad se conserva en un proceso si su imagen especular es un proceso que también puede existir en la naturaleza.

Se puede demostrar que las ecuaciones de Maxwell para el campo electromagnético son invariantes frente a reflexiones espaciales, por lo que la paridad se conserva en las interacciones electromagnéticas. Los físicos acostumbraban a aceptar sin reservas que todas las interacciones debían conservar la paridad, aun en los casos en que no había evidencia experimental en apoyo de esta hipótesis. Tan convencidos estaban los físicos acerca de esta propiedad de la naturaleza, que sufrieron una conmoción cuando en 1956 T. D. Lee y C. N. Yang pusieron en duda la validez de la invariancia frente a reflexiones espaciales en los procesos debidos a la interacción débil. La propuesta de Lee y Yang fue motivada por lo que en aquel entonces se denominaba el enigma $\pi^0 \rightarrow \pi^0 \gamma$: se supone

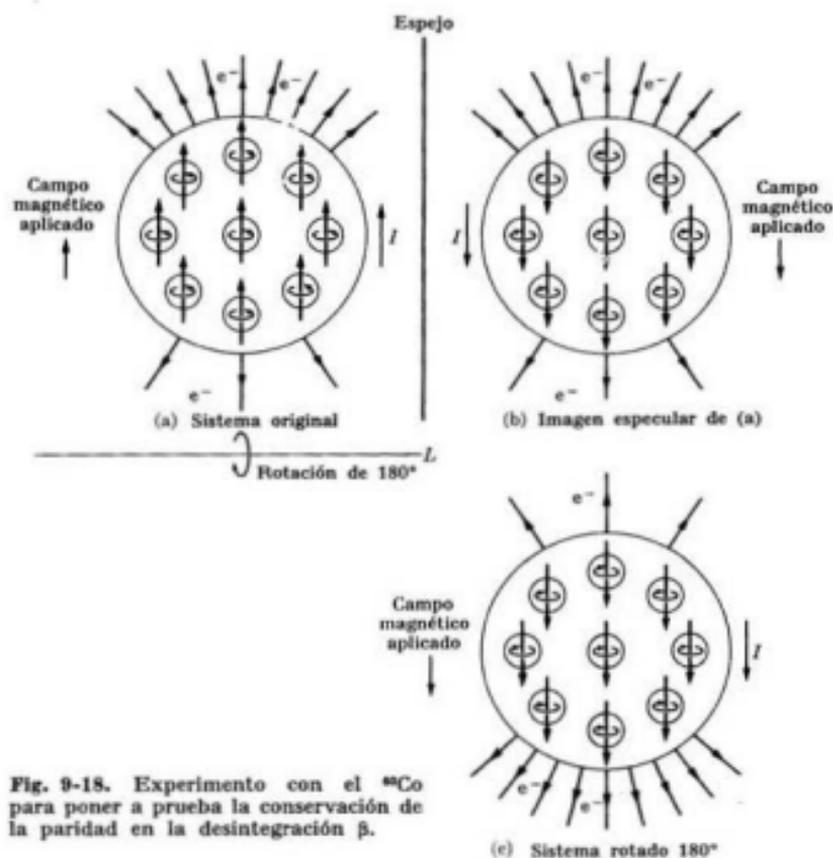


Fig. 9-18. Experimento con el ^{60}Co para poner a prueba la conservación de la paridad en la desintegración β .

que cada partícula, descrita por su correspondiente campo o función de onda, tiene una paridad intrínseca determinada. Hay buenas razones para suponer que los mesones tienen paridad negativa (ver el ejemplo 9.5). Examinando la tabla 9-2 vemos que el kaón (positivo o negativo) tiene, entre otras posibilidades, los modos de desintegración $K^\pm \rightarrow 2\pi^\pm + \pi^\mp$ y $K^\pm \rightarrow \pi^\pm + \pi^0$. Suponiendo que cada partícula tiene paridad definida, podemos demostrar (ver el ejemplo 9.6) que si la paridad se conserva en el primer modo de desintegración del kaón, no se conserva en el segundo, e inversamente. El primer modo de desintegración se denomina modo τ y el segundo modo θ (recordar las figs. 9-8 y 9-9). Cuando el dilema apareció por primera vez los físicos consideraron (para salvar la ley de conservación de la paridad) que los dos mesones podrían ser diferentes, cada uno con su propia paridad, a pesar de que eran idénticos en todo excepto en el

modo de desintegración. Yang y Lee propusieron que se debería aceptar la idea de que los dos mesones eran idénticos, con paridad definida, a costa de deshacerse de la conservación de la paridad en la desintegración por interacción débil. También propusieron varios experimentos para comprobar si la paridad se conservaba en los procesos debidos a interacciones débiles.

Uno de los experimentos más famosos fue realizado por C. S. Wu y sus colaboradores en 1957 en la Oficina Nacional de Patrones y Medidas de los Estados Unidos. Se polarizó una muestra de ^{60}Co de modo que los núcleos tuvieran sus espines alineados (para lo cual fue necesario colocar la muestra en un campo intenso y mantenerla a una temperatura cercana al cero absoluto). Encontraron entonces (como se muestra en la fig. 9-18a) que los electrones resultantes de la desintegración β^- de los núcleos de ^{60}Co eran emitidos en la dirección del espín del ^{60}Co (o sea la dirección de polarización) en cantidades mayores que en la dirección opuesta. Esto demostró que la probabilidad de que un núcleo de ^{60}Co emita un electrón en la dirección de su espín es mayor que la de que lo haga en la dirección opuesta. Cuando invirtieron el sistema rotándolo 180° alrededor de la línea L , la polarización, los espines y el campo magnético se invirtieron: la nueva situación experimental fue como se muestra en la fig. 9-18(c), estando rotada en 180° la dirección de máxima intensidad de la emisión de electrones. Por otro lado, la imagen especular de (a) está representada en (b), donde se ha invertido espines y campo magnético porque son vectores axiales, pero la dirección de máxima intensidad de emisión de electrones es la misma. La comparación de (b) y (c) indica claramente que (b) no corresponde a una situación encontrada en la naturaleza, obteniéndose así una evidencia experimental directa de que la paridad no se conserva en las interacciones débiles, que son las responsables de la desintegración β . Después del experimento con el ^{60}Co , se obtuvo muchas otras pruebas experimentales de la no conservación de la paridad en las interacciones débiles. Por el contrario, parece que en los procesos debidos a las interacciones fuertes (y a las electromagnéticas) la paridad se conserva.

Como segundo ejemplo de la no conservación de la paridad, consideremos la desintegración $\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu$ del pión, mostrada en la fig. 9-19(a). El pión tiene

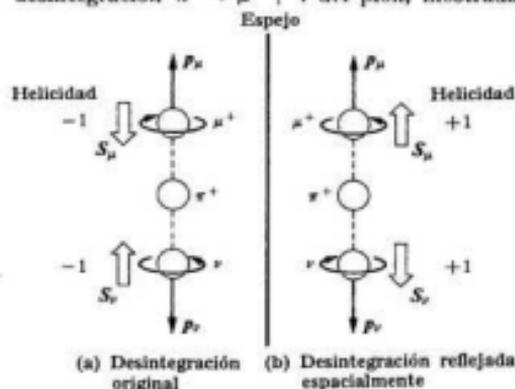


Fig. 9.19. No conservación de la paridad en la desintegración π .

espín nulo y para que se conserve el momentum angular los espines del muon y del neutrino deben estar en direcciones opuestas. Además, conforme a la helicidad del neutrino, los espines deben estar como se indica en la figura (recordar también la fig. 9-3). La imagen especular del sistema, mostrada en la fig. 9-19(b) no existe en la naturaleza porque el neutrino tendría una helicidad incorrecta. Es precisamente porque los μ^+ de la desintegración del π^+ tienen sistemáticamente helicidad negativa, que los físicos concluyeron que el neutrino tiene helicidad negativa. Si el neutrino pudiera tener helicidad positiva o negativa, el μ^+ aparecería con helicidad positiva o negativa en la misma proporción aproximadamente. En tal caso, la imagen especular mostrada en la fig. 9-19 correspondería a un proceso observado y la paridad se conservaría en la desintegración del pion. La fig. 9-20 muestra un experimento típico para determinar la helicidad del μ^+ . Los positrones emitidos en la desintegración del μ^+ siempre se mueven en una dirección a casi 180° respecto a la inicial del movimiento del μ^+ y tienen helicidad positiva ($h = +1$). Por consiguiente, la helicidad de las otras partículas debe ser como se muestra para que se conserve el momentum angular.

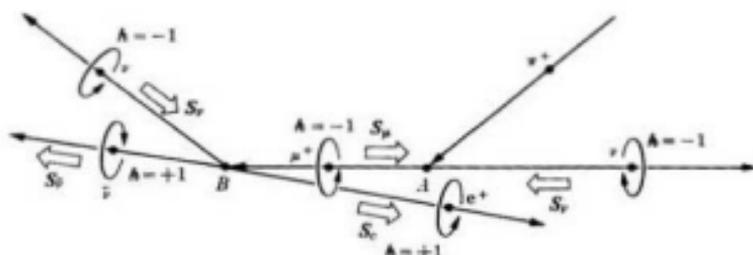


Fig. 9-20. Determinación de la helicidad del μ^+ .

Conjugación de carga. Esta operación consiste en reemplazar todas las partículas por sus antipartículas sin cambiar ninguna otra propiedad física, tal como el momentum o el espín.

Un sistema es invariante frente a la conjugación de carga si cuando un proceso es posible en el sistema original, el correspondiente proceso también es posible en el sistema con conjugación de carga.

Parece que los procesos debidos a las interacciones fuertes y electromagnéticas son invariantes frente a la conjugación de carga y esto conduce a la conservación de T_2 y, por consiguiente, a la de \mathcal{C} también.* Empero, los procesos en que intervienen interacciones débiles no son invariantes frente a la conjugación de carga.

* Experimentos recientes realizados en Brookhaven y en el CERN sobre la desintegración del η^0 en π^0 , π^+ y π^- han sido analizados buscando una posible asimetría en el comportamiento del π^+ y el π^- . Los resultados experimentales han provocado discusiones acerca de la falta de invariancia de las interacciones electromagnéticas frente a la conjugación de carga. Sin embargo, hasta el momento de escribir este libro todavía no se ha aclarado la cuestión.

Usando la desintegración del pión como ejemplo (fig. 9-21a) vemos que el sistema con conjugación de carga (fig. 9-21b) no puede ocurrir porque el antineutrino tendría helicidad incorrecta.

Sin embargo, la comparación de las figs. 9-19 y 9-21 sugiere una nueva posibilidad. Supongamos que primero se realiza una reflexión espacial u operación de paridad P sobre el sistema mostrado en la fig. 9-21(a) y a continuación una conjugación de carga C , como se muestra en la fig. 9-22; el sistema resultante de la operación combinada (CP) también ocurre en la naturaleza: $\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}$. Luego,

las interacciones débiles son invariantes frente a la operación combinada CP.

Inversión del tiempo. ¿Qué ocurriría si se invirtiera el sentido en que fluye el tiempo? Es decir: si se pusiera $-t$ en vez de t , las ecuaciones resultantes ¿describirían procesos posibles? Las cantidades velocidad, momentum y momentum angular se invierten al invertir el tiempo y en una colisión se intercambian

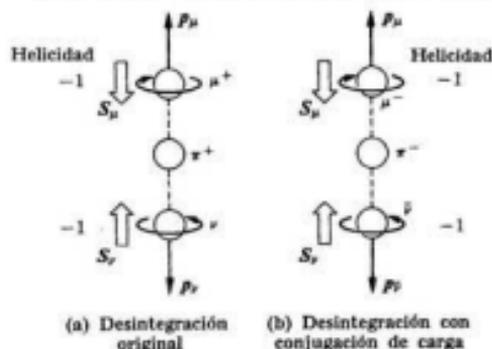
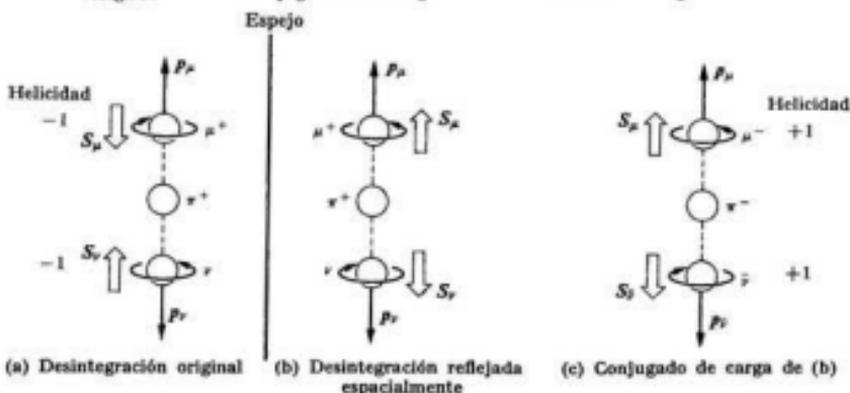


Fig. 9-21. Aplicación de la conjugación de carga a la desintegración π .

Fig. 9-22. La operación CP aplicada a la desintegración π .



los estados inicial y final (fig. 9-23). Nuestra intuición, apoyada en una sólida evidencia experimental tanto al nivel macroscópico como al atómico, nos indica

que las leyes físicas son invariantes frente a la inversión del tiempo. Se puede demostrar fácilmente que las leyes de la mecánica clásica y del electromagnetismo son invariantes frente a la inversión del tiempo. Por ejemplo, $d\mathbf{p}/dt$ es invariante frente a la inversión del tiempo, ya que ésta implica los reemplazos $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ y $t \rightarrow -t$. El campo eléctrico \mathcal{E} es invariante frente a la inversión del tiempo mientras que el campo magnético sufre la transformación $\mathcal{B} \rightarrow -\mathcal{B}$ porque la inversión del tiempo implica la inversión de las velocidades \mathbf{v} , por lo tanto, de las corrientes. Luego, $\mathbf{v} \times \mathcal{B}$ es invariante frente a la inversión del tiempo porque ambos factores cambian de signo y la ecuación de movimiento de una partícula cargada, $d\mathbf{p}/dt = q(\mathcal{E} + \mathbf{v} \times \mathcal{B})$ es invariante frente a la inversión del tiempo.

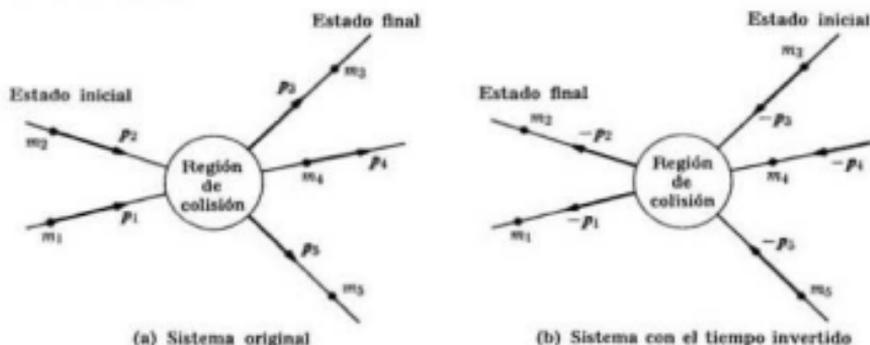


Fig. 9-23. La operación T.

Se considera que las interacciones fuertes y débiles son invariantes frente a la inversión del tiempo aunque últimamente el problema ha quedado abierto a discusión. Experimentos recientes (1966) referentes a una forma especial de desintegración del kaón neutro que ocurre sólo en 0,3 % de los casos, parecen indicar que las interacciones débiles pueden violar el principio de invariancia frente a la inversión del tiempo.

Concluiremos esta sección enunciando otro teorema importante:

Se considera que todas las leyes son invariantes frente a la operación CPT,

esto es, frente a la operación combinada de inversión del tiempo T, paridad P y conjugación de carga C. Este teorema vale aun en los casos en que las leyes pueden no ser invariantes frente a las operaciones individuales.

EJEMPLO 9.5. La paridad del pión.

Solución: Como el tema es interesante por su relación con otros cálculos, ilustraremos cómo se determina la paridad del pión. Supongamos que un haz de mesones π^-

se mueve a través de deuterio líquido. Después de frenarse, muchos piones son capturados por deuterones y se mueven en estados estacionarios similares a los estados electrónicos. Los sistemas así formados se denominan *átomos méscicos*. Si se excita un estado méscico, los piones pasan rápidamente al estado fundamental $1s$ con radiación de energía. El momento angular orbital del π^- es cero en el estado fundamental. Como el espín del pión es cero, el momentum angular total del átomo méscico es el del deuterón, esto es, $J = 1$. La dimensión de la órbita $1s$ del π^- es $1/280$ de la órbita $1s$ de un electrón; hay, por lo tanto, una gran probabilidad de que el pión choque con el deuterón. La reacción de mayor probabilidad de ocurrencia es



En este proceso se conserva el momentum angular, por lo que los dos neutrones resultantes también deben tener un momentum angular total igual a 1. Pero los neutrones obedecen el principio de exclusión y la función de onda completa (función orbital \times función de espín) de los dos neutrones debe ser antisimétrica. La paridad de las funciones de onda orbitales es $(-1)^l$. Los dos neutrones pueden tener sus espines paralelos ($S = 1$) o antiparalelos ($S = 0$). Las funciones de espín para $S = 1$ son simétricas y para $S = 0$ son antisimétricas (recordar la sección 4.2). Luego, $S = 1$ debe estar combinado con un momentum angular orbital $l = 1, 3, 5, \dots$ impar y $S = 0$ con $l = 0, 2, 4, \dots$ par. Los estados posibles de los dos neutrones son entonces

$$S = 1: {}^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2, {}^3F_0, {}^3F_2, {}^3F_4, \dots$$

$$S = 0: {}^1S_0, {}^1D_2, {}^1G_4, \dots$$

donde, como de costumbre, se indica el momentum angular total mediante un subíndice. El único estado con $J = 1$ es 3P_1 que debe ser entonces el estado de los dos neutrones y que corresponde a un momentum angular orbital $l_n = 1$.

Llamemos P_n , P_p y P_π a las paridades de las tres partículas involucradas, l_d al momentum angular orbital del deuterón y l_n al momentum angular orbital de los dos neutrones. La paridad del primer miembro de la ecuación es $P_n P_p P_\pi (-1)^{l_d}$ y la del segundo miembro es $P_n^2 (-1)^{l_n}$. La conservación de la paridad en las interacciones fuertes requiere que

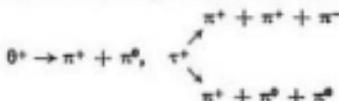
$$P_n P_p P_\pi (-1)^{l_d} = P_n^2 (-1)^{l_n}.$$

Pero el estado fundamental del deuterón tiene $l_d = 0$ (con una pequeña mezcla de $l_d = 2$; ver la sección 7.7) y hemos demostrado que $l_n = 1$. Luego: $P_n P_p = -P_n$. Si suponemos que el protón y el neutrón tienen la misma paridad (lo cual es razonable, ya que son diferentes estados de carga del nucleón), concluimos que $P_n = -1$ o sea que el π^- tiene paridad *impar*.

Para hablar de la paridad del mesón π^0 necesitamos un análisis ligeramente más complejo basado en que el proceso $\pi^- + d^+ \rightarrow \pi^0 + 2n^0$ no existe. El resultado es compatible con la asignación de paridad impar al π^0 . Concluimos entonces que todos los piones tienen paridad impar.

EJEMPLO 9.6. Falta de conservación de la paridad en la desintegración del mesón K.

Solución: La tabla 9-2 indica que un mesón K puede desintegrarse en dos o en tres piones. Como mencionamos anteriormente, cuando se observó por primera vez estos tipos de desintegración, los físicos supusieron que se debían a dos mesones diferentes llamados θ y τ . Las desintegraciones eran escritas como sigue:



Dentro de la precisión experimental los mesones θ y τ son idénticos por lo menos en lo que respecta a masa, carga, espín y vida media, por lo que la suposición natural debía ser considerarlos como una misma partícula. La razón en contra de esta suposición era en 1956 que la paridad no se podía conservar en uno de los procesos si se conservaba en el otro. Analizaremos a continuación este punto.

Utilizando el sistema de referencia de la partícula que se desintegra, llamemos s_θ al valor del espín del θ^+ . La conservación del momentum angular requiere que el momentum angular total l del sistema $\pi^+ + \pi^0$ respecto al punto de desintegración sea también s_θ , esto es $l = s_\theta$. Por otra parte, la paridad intrínseca del pion es -1 (ver el ejemplo 9.5). Luego, la paridad del sistema $\pi^+ + \pi^0$ es $(-1)^l(-1)^l = (-1)^{2l}$. Si P_θ es la paridad intrínseca del mesón θ y si la paridad se conserva en la desintegración del θ^+ , debemos tener

$$P_\theta = (-1)^{2l} = \begin{cases} +1 & \text{si } s_\theta = 0, \\ -1 & \text{si } s_\theta = 1. \end{cases}$$

Como hay una fuerte evidencia de que $s_\theta = 0$ deberíamos tener $P_\theta = +1$.

Consideremos ahora la desintegración de la partícula τ^+ utilizando un sistema de referencia fijo a la misma. Llamaremos s_τ al valor del espín del τ^+ . Usando el esquema de desintegración $\tau^+ \rightarrow \pi^+ + \pi^+ + \pi^-$ (se puede obtener el mismo resultado usando el otro esquema de desintegración dado anteriormente), llamemos l al momentum angular del sistema $\pi^+ + \pi^+$ respecto a su centro de masa y L al momentum angular respecto al centro de masa del sistema total compuesto por el sistema $(\pi^+ + \pi^+)$ y el mesón π^- . El centro de masa del sistema total coincide con el punto en que tiene lugar la desintegración del τ^+ . La conservación del momentum angular requiere entonces que $l + L = s_\tau$, y la regla cuántica de adición de momenta angulares

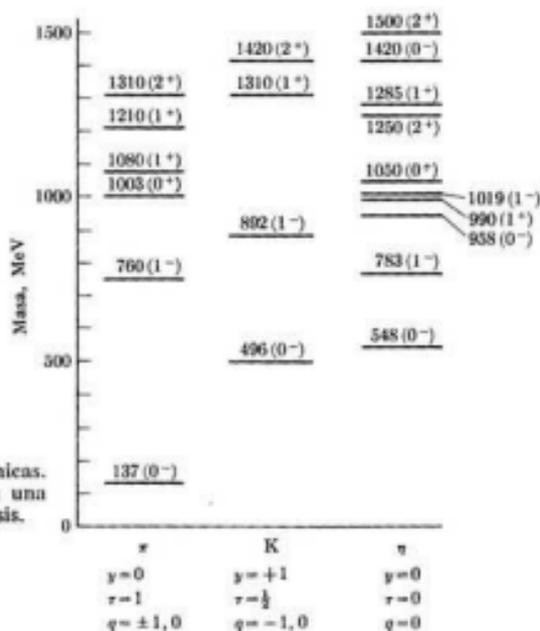


Fig. 9-24. Resonancias mesónicas. El espín y la paridad de cada una están indicados entre paréntesis.

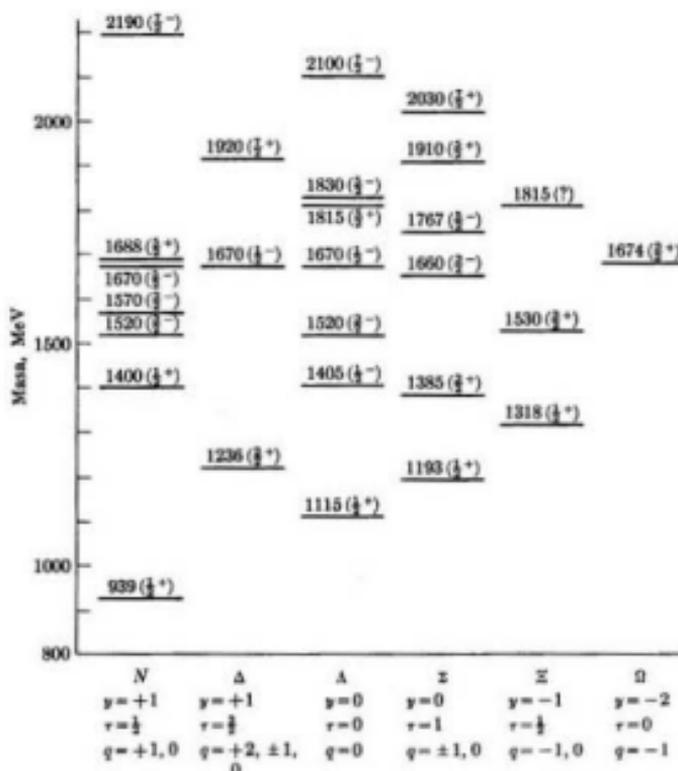


Fig. 9-25. Resonancias bariónicas. El espín y la paridad de cada una están indicados entre paréntesis.

requiere que

$$|l - L| \leq s_\tau \leq l + L.$$

Por otra parte, la paridad de los productos de desintegración es $(-1)^l(-1)^L = -(-1)^{l+L}$. Luego, si P_τ es la paridad intrínseca del mesón τ y si la paridad se conserva en la desintegración del τ^+ , debemos tener

$$P_\tau = -(-1)^{l+L}.$$

Como parece ser que el espín del mesón τ es cero ($s_\tau = 0$), deberíamos tener $l = L$ o sea $l + L =$ entero par por lo que $P_\tau = -1$. Luego, si $s_\tau = s_\tau = 0$ tenemos que $P_\tau = -P_\tau$ o sea que las dos partículas no tienen la misma paridad. (Si $s_\tau = s_\tau = 1$ se llega a la misma conclusión después de un razonamiento más elaborado.) En consecuencia la suposición de que las partículas θ y τ son las mismas implica que la ley de la conservación de la paridad ha sido violada en una de las dos desintegraciones.

9.7 Resonancias

Se puede considerar que todas las partículas que aparecen en la tabla 9-1 son de vida larga en la escala de partículas. Además de estas partículas de vida larga, en los últimos años se ha acumulado evidencia experimental que indica la existencia de partículas de vida muy corta denominadas *resonancias*. Sus vidas son tan cortas (del orden de 10^{-20} s o menos) que no dejan traza reconocible alguna en las cámaras de burbujas o de chispas. Se puede clasificar estas partículas conforme al número bariónico, la hipercarga y el isospín y se las designa con los mismos símbolos que los bariones y mesones que tienen los mismos números cuánticos que ellas, agregando un subíndice 1, 2, 3, ... en orden de masa creciente. El número de estas resonancias es alrededor de 80 incluyendo

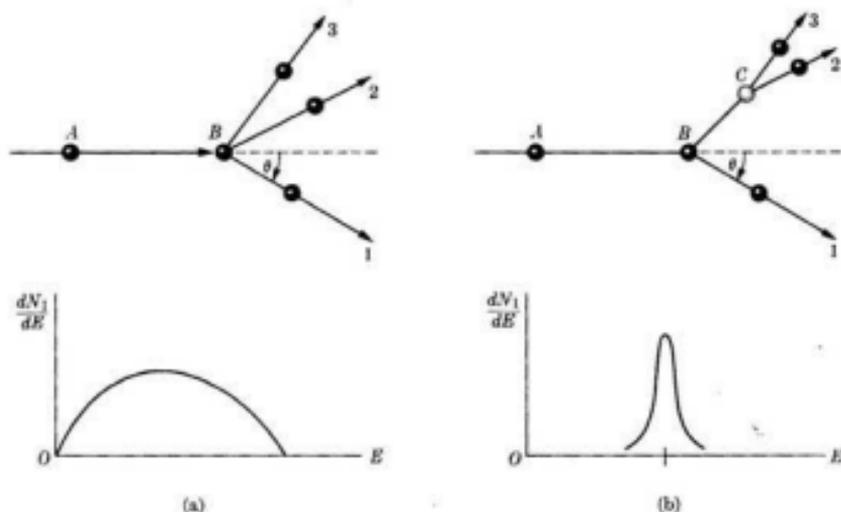


Figura 9-26

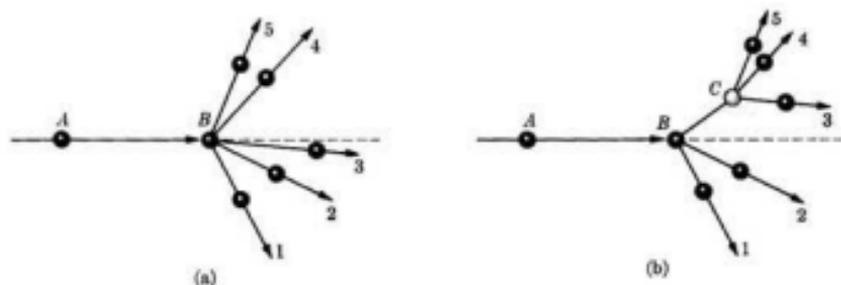


Figura 9-27

todos los estados de carga y las antipartículas, y está creciendo continuamente. La fig. 9-24 (página precedente) muestra algunas resonancias mesónicas y la fig. 9-25 da algunas de las resonancias bariónicas conocidas. Se indica también la masa (en MeV), el espín y la paridad.

Las resonancias son identificadas mediante una aplicación muy sutil de los principios de conservación de la energía y del momentum. Supongamos que una partícula A choca con otra partícula B en reposo en el laboratorio, resultando las partículas 1, 2, 3 (fig. 9-26a), esto es: $A + B \rightarrow 1 + 2 + 3$. Si observamos la partícula 1 a un cierto ángulo respecto a la dirección del movimiento de A debemos observar un espectro continuo de energía, ya que la conservación de la energía y del momentum permite que las partículas 2 y 3 tengan diferentes direcciones de movimiento y diferentes energías para una dirección determinada del movimiento de 1. Supongamos en cambio que el proceso es en dos etapas. En la primera etapa se producen sólo dos partículas: $A + B \rightarrow 1 + C$. En la segunda etapa la partícula C se desintegra en 2 y 3: $C \rightarrow 2 + 3$ (fig. 9-26b). Como el primer proceso involucra sólo dos partículas, la energía de la partícula 1 es fija para una dirección de movimiento determinada y su espectro de energía es como se muestra en la figura. En este caso también es fija la energía de las partículas 2 + 3. La fig. 9-27 muestra una situación más compleja en la cual se producen cinco partículas. Si las partículas 3, 4 y 5 resultan de la desintegración de una partícula C intermedia, debe haber una cierta correlación entre sus energías. Entonces, analizando la energía de las partículas producidas en una colisión, estamos en condiciones de determinar si el proceso ocurre en una o en dos etapas.

La primera resonancia que se descubrió (alrededor de 1960) fue η^0 (originalmente llamada ω^0). Su descubrimiento se produjo como resultado del análisis de la aniquilación protón-antiprotón observada en la cámara de burbujas de

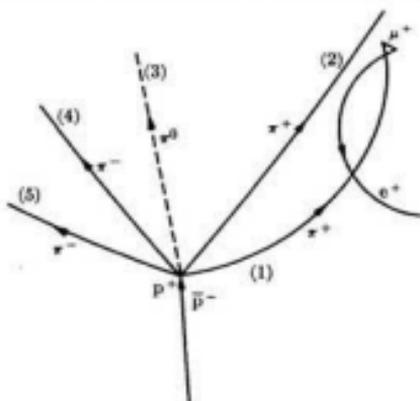
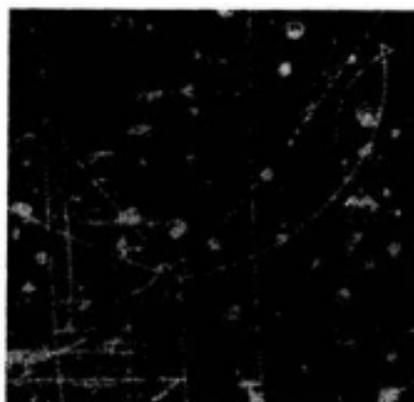
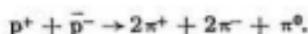


Fig. 9-28. Producción de la resonancia η^0 en una aniquilación protón-antiprotón. (Fotografía cortesía del Laboratorio de Radiaciones Lawrence de la Universidad de California, Berkeley, California.)

Berkeley. La fig. 9-28 muestra una de estas aniquilaciones, que corresponde a la producción de cinco piones:



Naturalmente que el η^0 no es visible, pero su existencia se puede inferir de la conservación del momentum y de la energía. El proceso se puede representar como en el dibujo de la fig. 9-28. Analizando las energías de los mesones en éste y muchos otros procesos similares, podemos concluir que tres de los mesones [en nuestro caso los indicados con (1), (3) y (5)] provienen de la desintegración de una partícula de vida muy corta que tiene una masa en reposo alrede-

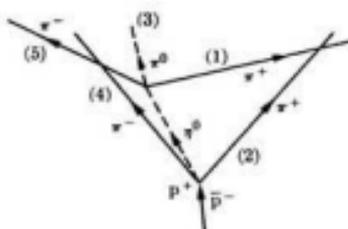
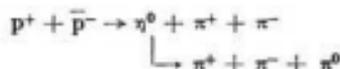


Fig. 9-29. Región de interacción del proceso ilustrado en la fig. 9-28 aumentada unas 10^{13} veces.

dor de 548 MeV y, por lo tanto, es un mesón η que designamos con η^0 . Luego, en vez del esquema de desintegración anterior, debemos escribir



Esta es la forma en que el proceso está representado en la fig. 9-29. Notar que aunque el mesón η^0 se moviera con la velocidad de la luz (3×10^8 m s⁻¹), durante su vida (10^{-20} s) no se podría desplazar más de 3×10^{-12} m, que es una distancia imposible de medir en una fotografía tomada en una cámara de burbujas.

Las resonancias se desintegran por medio de interacciones fuertes, lo cual explica sus vidas extremadamente cortas. Las desintegraciones siguientes son algunas de las observadas:

Mesones	Bariones	
$\pi_1^+ \rightarrow \pi^+ + \pi^0$	$N_1^+ \rightarrow p^+ + \pi^0$	$N_2^+ \rightarrow \eta^0 + \pi^+$
$\eta^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^- + \pi^0$	$\Lambda^0 \rightarrow \Sigma^0 + \pi^0$	$\Lambda_2^0 \rightarrow \Sigma^+ + \pi^-$
$K_1^+ \rightarrow K^+ + \pi^0$	$\Sigma_1^+ \rightarrow \Lambda^0 + \pi^+$	$\Delta^{++} \rightarrow p^+ + \pi^+$

El estudiante debe aplicar las leyes de conservación a estas desintegraciones para hallar si se viola alguna, y debe dar razones de por qué es posible que estas desintegraciones ocurran por medio de interacciones fuertes.

EJEMPLO 9.7. Cálculo de la dispersión de valores de la energía, en el laboratorio, de los dos fotones que resultan de la desintegración de un mesón π^0 de energía E_π respecto al sistema de referencia L .

Solución: Consideremos un mesón π^0 de energía E_π y momentum p_π respecto al sistema L o de laboratorio. Se tiene entonces $E_\pi = c\sqrt{m_\pi^2 c^2 + p_\pi^2}$. La velocidad del mesón es (ver apéndice I, ec. A.10)

$$v = c^2 p_\pi / E_\pi. \quad (9.12)$$

Esta es también la velocidad respecto al sistema L del sistema C , en el cual el π^0 está en reposo. En el sistema C los dos fotones resultantes de la desintegración $\pi^0 \rightarrow \gamma + \gamma$ se emiten en direcciones opuestas con energía $E'_\gamma = \frac{1}{2} m_\pi c^2$ y momentum $p'_\gamma = E'_\gamma / c = \frac{1}{2} m_\pi c$. La emisión de los fotones es isotrópica debido a la simetría en el sistema C . Empero, ello no es así en el sistema L donde hay preferencia por la dirección frontal debido al movimiento del sistema C .

La energía de los fotones en los sistemas C y L no es la misma debido al efecto Doppler. En general, los dos fotones no tienen la misma energía en el sistema L . La dispersión máxima de valores de energía ocurre cuando se emite un fotón en la dirección de p_π (hacia delante) y el otro en la dirección opuesta (hacia atrás). En este caso el cálculo de la energía de los dos fotones en el sistema L es muy simple. Si E_{γ_1} es la energía del fotón emitido hacia delante y E_{γ_2} la del emitido hacia atrás, sus momenta respectivos en la dirección de p_π son $p_{\gamma_1} = E_{\gamma_1}/c$ y $p_{\gamma_2} = -E_{\gamma_2}/c$. La conservación de la energía y del momentum da

$$E_\pi = E_{\gamma_1} + E_{\gamma_2}, \quad p_\pi = E_{\gamma_1}/c - E_{\gamma_2}/c, \quad (9.13)$$

de modo que

$$E_{\gamma_1} = \frac{1}{2}(E_\pi + cp_\pi) \quad \text{y} \quad E_{\gamma_2} = \frac{1}{2}(E_\pi - cp_\pi). \quad (9.14)$$

Por lo tanto, las energías de los fotones tienen en el sistema L una dispersión $\Delta E = E_{\gamma_1} - E_{\gamma_2} = cp_\pi$.

Aplicaremos ahora estas fórmulas a una situación particular. Se observa que en una colisión $\pi^- - p^+$ los productos finales son a menudo un neutrón y dos fotones; por lo tanto, podemos escribir la reacción en la forma



Si la reacción ocurre en una etapa (es decir, si corresponde a la fig. 9-26(a) con una identificación apropiada de las partículas), se trata de un problema de tres cuerpos. Suponiendo que tanto el π^- como el p^+ están en reposo en el laboratorio, la energía total disponible es

$$Q = (m_\pi + m_p - m_n)c^2 = 139 \text{ MeV}.$$

Esta energía debe aparecer como energía cinética de las tres partículas resultantes. Como esta energía puede distribuirse en forma continua entre las tres partículas, los fotones pueden tener cualquier energía entre cero y casi 139 MeV.

Una alternativa es que el proceso ocurra en dos etapas, esto es:



correspondiente a la fig. 9-26(b). En este caso (si el π^- y el p^+ están en reposo en el sistema L) la energía liberada es

$$Q = (m_\pi + m_p - m_n - m_{\pi^0})c^2 = 4 \text{ MeV}.$$

Esta energía aparece como energía cinética del n y el π^0 ; luego, de acuerdo con las leyes de conservación de la energía y del momentum (ver apéndice II, ec. A.27), la

energía cinética del π^0 es

$$E_{k,\pi^0} = \frac{m_0}{m_\pi + m_{\pi^0}} Q \approx 3,6 \text{ MeV.}$$

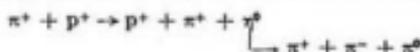
Hemos utilizado una fórmula no relativista, ya que la energía del pion es mucho menor que su masa en reposo. En consecuencia, la energía total del π^0 es aproximadamente 138,6 MeV, que corresponde a $cp_\pi \sim 31$ MeV, lo cual sería la dispersión de energía de los fotones resultantes de la desintegración del pion. Las energías de los fotones deben caer entonces en el intervalo $\pm(138,6 \pm 31)$ MeV o sea entre $E_{\gamma_2} \sim \sim 54$ MeV y $E_{\gamma_1} \sim 85$ MeV. Esto es lo que se observa experimentalmente verificando que la colisión $\pi^- - p^+$ es un proceso en dos etapas que tiene lugar conforme a la ec. (9.16). En consecuencia, este ejemplo ilustra lo que hemos dicho acerca de la identificación de resonancia por medio de correlaciones de momentum y energía.

EJEMPLO 9.8. Detección de la partícula η^0 .

Solución: Como se explicó en relación con las figs. 9-28 y 9-29, la partícula η^0 tiene una vida tan corta que no puede dejar una traza medible en una cámara de burbujas. En lo que concierne a esto la partícula η^0 se comporta como una resonancia. Consideremos la reacción



Si todos los piones se producen en el momento de la colisión el proceso correspondería a la fig. 9-27(a) y no habría correlación entre la energía y el momentum de las cinco partículas excepto la impuesta al sistema total por las leyes de conservación. Empero, existe la posibilidad de que el proceso ocurra en dos etapas:



correspondiendo a la fig. 9-27(b). En este caso la energía y el momentum de las tres partículas resultantes de la desintegración del η^0 deben ser compatibles con los de una partícula de masa determinada. Considerando que en este caso debemos tener

$$\begin{aligned} E_\pi + E_p &\rightarrow E'_p + E'_\pi + E_{\eta^0} \\ \mathbf{p}_\pi + \mathbf{p}_p &\rightarrow \mathbf{p}'_p + \mathbf{p}'_\pi + \mathbf{p}_0 \end{aligned}$$

podemos determinar experimentalmente E_0 y \mathbf{p}_0 midiendo las otras cantidades; con estos valores deberíamos poder obtener la masa del η^0 . La dificultad es que

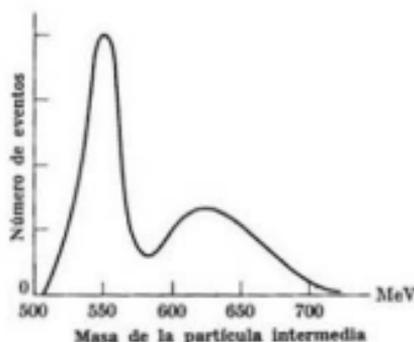


Fig. 9-30. Masa experimental de la resonancia intermedia η^0 . Si esta partícula no existiera, se observaría una distribución de masa sin picos.

observamos dos π^+ y no podemos decir cuál es el original y cuál el que proviene del η^0 . En consecuencia, debemos calcular la masa del η^0 dos veces: una para cada π^+ . La fig. 9-30 muestra el resultado experimental. El pico pronunciado alrededor de una masa equivalente a 550 MeV, correspondiente al π^+ correcto, prueba que el proceso es en dos etapas involucrando una partícula η^0 de esa masa. El resto de la distribución de masa se debe a la elección equivocada de un π^+ en cada caso. Vemos, entonces, nuevamente cómo las leyes de conservación nos permiten inferir la existencia de una partícula por lo demás inobservable.

9.8 ¿Qué es una partícula fundamental?

A la luz de la discusión precedente, ¿estamos ahora en condiciones de definir una partícula fundamental? Sabemos que las partículas fundamentales son entes físicos precisos caracterizados por ciertas propiedades como la carga, la masa, el espín, etc.; que interactúan entre ellas conforme a interacciones más o menos definidas (fuerte, electromagnética, débil y gravitacional), y que todos los procesos que tienen lugar entre ellas siguen ciertas leyes de conservación. Pero hay aún muchas preguntas serias e importantes. ¿Por qué hay tantas partículas? ¿Qué función cumple cada una en la naturaleza? ¿Cómo están relacionadas entre sí? ¿Por qué tienen masas y espines determinados? ¿Por qué están divididas en dos clases muy distintas: bosones y fermiones?

De la misma manera que consideramos que los átomos están compuestos de ciertos ingredientes básicos (electrones, protones y neutrones) o que los núcleos están compuestos de protones y neutrones, podemos suponer que todas las partículas fundamentales están compuestas de ciertas unidades o partículas superfundamentales. Gell-Mann ha propuesto el nombre "quark" para estas partículas superfundamentales.* Los "quarks" tienen ciertas propiedades nuevas, tal como una carga fraccionaria ($\frac{1}{3}e$ ó $\frac{2}{3}e$). Pero hasta el presente nadie ha observado "quarks" a pesar de la caza intensiva que ha habido. Siguiendo otra hipótesis, podríamos considerar que todos los bariones y sus resonancias, por ejemplo, son estados excitados de un barión básico (podríamos usar el mismo razonamiento para los mesones), del mismo modo que un átomo de hidrógeno puede existir en su estado fundamental o en muchos estados excitados, teniendo cada estado sus propios atributos tales como energía, momentum angular y paridad. Empero, hasta ahora no se ha formulado una teoría satisfactoria en este sentido.

De todos modos lo que llamamos partículas fundamentales no parecen ser de ninguna manera entes simples. Por muchos años los físicos han considerado

* Del inglés *quark*. La palabra fue tomada de un pasaje bastante oscuro de *Finnegan's Wake*, de James Joyce:

*Three quarks for Muster Mark!
Sure he hasn't got much of a bark
And sure any he has it's all beside the mark.*

El Webster's New International Dictionary, 1961, define "quark" como el graznido del cuervo o cualquier sonido imitativo del mismo.

N. del T.: La mencionada obra es intraducible, ya que Joyce mezcla en ella el folklore, la realidad, la mitología, la leyenda y toda clase de juegos lingüísticos para los que recurre a otros idiomas.

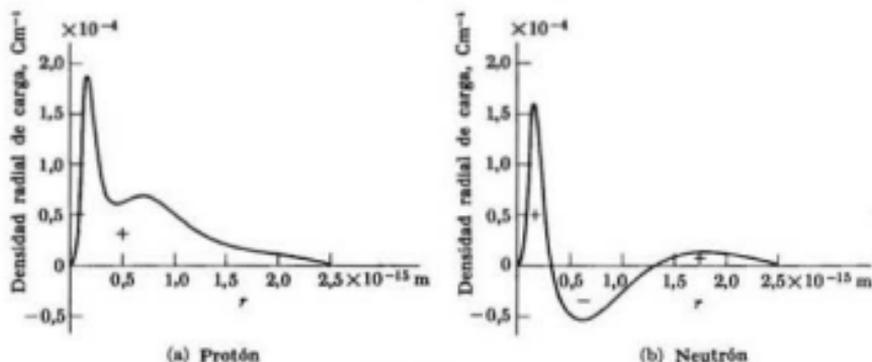


Fig. 9-31. Distribución radial teórica de carga para (a) protones, (b) neutrones.

que el nucleón está compuesto de un carozo — un nucleón “desnudo” inobservable — rodeado de una nube de piones, del mismo modo que un átomo es un núcleo rodeado de una nube electrónica. La distribución radial de carga de esta nube de piones podría ser para el protón y el neutrón como se ilustra en la fig. 9-31. La carga total es cero para el neutrón. (Indiquemos al pasar que esto es un medio de distinguir un neutrón de un antineutrón, ya que éste tendría invertido el signo de las diversas camadas de carga.) Estos gráficos son similares a los de la fig. 3-13 correspondiente a la distribución radial de carga de un electrón en un átomo. Aún no se ha desarrollado ninguna teoría sobre la dinámica de piones en un nucleón, pero aparentemente la nube piónica se podría excitar a niveles de energía más altos dando lugar a los isóbaros nucleónicos del mismo modo que los átomos pueden existir en estados electrónicos excitados.

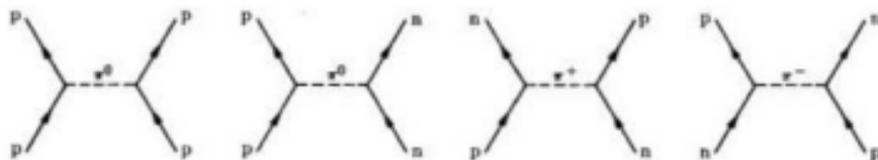


Fig. 9-32. Interacción fuerte resultante del intercambio de piones.

Otro aspecto interesante es la interpretación de las interacciones como el resultado del intercambio de bosones entre las partículas interactuantes. Una interacción electromagnética resulta del intercambio de fotones entre dos partículas cargadas, como se indicó en la fig. 1-12. Análogamente, se acepta que la interacción fuerte resulta del intercambio de piones entre las partículas interactuantes, como se indica en la fig. 9-32. Las partículas intercambiadas se denominan *virtuales* porque no es posible detectarlas como entes separados. Con este modelo para las interacciones se puede explicar elegantemente el corto alcance de las

fuerzas nucleares. El protón no es un sistema estático sino que está continuamente emitiendo y reabsorbiendo algunos de los piones que lo rodean. Cuando se emite un pion virtual la energía del protón varía en

$$\Delta E \sim m_{\pi}c^2 \sim 140 \text{ MeV.}$$

Conforme al principio de indeterminación de Heisenberg, ec. (1.49), este pion puede existir sin violar ninguna ley de la mecánica cuántica durante un tiempo

$$\Delta t \sim \hbar / \Delta E \sim \hbar / m_{\pi}c^2 \sim 10^{-23} \text{ s.}$$

Después de este tiempo el pion virtual debe ser reabsorbido por el nucleón o intercambiando con otro nucleón. Si suponemos que el pion viaja con una velocidad cercana a la de la luz, la máxima distancia que puede andar en este tiempo es 10^{-14} m aproximadamente. Esto da entonces la distancia máxima a que debe estar un segundo nucleón para absorber el pion virtual. El estudiante debiera sorprenderse de que éste es precisamente el alcance de la interacción nuclear. Si pensamos un poco sobre este modelo de los nucleones y sus interacciones, vemos que decir que el núcleo está compuesto de protones y neutrones es simplificar demasiado. La mejor indicación de que un neutrón ligado no es igual a un neutrón libre es que los neutrones ligados son, en general, estables y no se desintegran.

En el caso de las interacciones electromagnéticas podemos suponer que una partícula cargada está continuamente emitiendo y absorbiendo fotones virtuales. Los fotones virtuales emitidos por las partículas cargadas tienen masa en reposo nula; por ello la fluctuación ΔE en la energía de una partícula cargada puede tener un valor arbitrario, siendo también arbitrario el tiempo durante el cual el fotón virtual puede existir antes de ser reabsorbido o intercambiado con otra partícula cargada. Haciendo el cálculo se ve que la fuerza entre dos partículas cargadas que resulta del intercambio de dos fotones de masa en reposo nula, debe variar como la inversa del cuadrado de la distancia entre las dos cargas, lo cual está de acuerdo con la ley de Coulomb.

Parece entonces que los piones son los portadores de la interacción fuerte. Es por esta razón que se ha postulado la existencia del gravitón como el portador de la interacción gravitacional, y la de otra partícula (un bosón débil W) como portador de las interacciones débiles. Ninguna de estas dos partículas ha sido observada aún.

Aunque la teoría de partículas elementales está aún en un estado imperfecto, los físicos han podido obtener (utilizando algunos conceptos matemáticos elaborados) cierta comprensión de las relaciones entre las partículas. La teoría más interesante es posiblemente la propuesta en 1961 por M. Gell-Mann y Y. Ne'eman, que se denominó *camino óctuple* porque requiere un conjunto de ocho operadores básicos. Esta teoría predice que entre los bariones y mesones deben existir multipletes de ocho y de diez partículas con relaciones determinadas entre sus números cuánticos y sus masas. Se supone que existen otros grupos con un número mayor de partículas. La teoría predijo la existencia de la partícula Ω^- , que fue observada poco después (Febrero de 1964) en el Laboratorio Nacional de Brookhaven (ver el ejemplo 9.10).

El campo de las partículas elementales es una de las áreas de investigación más activas y prometedoras en la física contemporánea. Se está constantemente construyendo nuevos aceleradores cada vez mayores para examinar los problemas existentes, pero estos aceleradores crean a menudo nuevos problemas al traer a la luz procesos nuevos e insospechados. Se espera, sin embargo, que en pocos años nuestra comprensión de las partículas elementales alcance un status similar al de nuestra comprensión de los núcleos, los átomos y las moléculas.

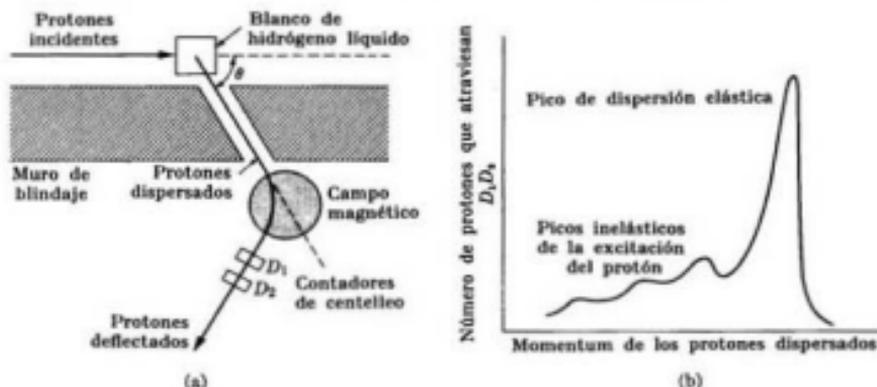


Fig. 9-33. (a) Diagrama esquemático del experimento de dispersión protón-protón inelástica. (b) Resultados experimentales que muestran los picos de dispersión inelástica.

EJEMPLO 9.9. Dispersión inelástica de protones de alta energía en las colisiones protón-protón.

Solución: El análisis de las colisiones protón-protón es un experimento importante que muestra la existencia de estados excitados del nucleón (esto es, isóbaros nucleónicos en los que la nube piónica ha sido llevada a un estado excitado de energía). La fig. 9-33(a) muestra el orden experimental. Los protones provenientes de un acelerador inciden sobre un blanco de hidrógeno líquido. Los protones dispersados un ángulo θ fijo atraviesan un campo magnético B que deflexiona algunos de ellos según un arco de circunferencia de radio r fijo, determinado por la dirección inicial del movimiento y la posición de los detectores D_1 y D_2 . Esto permite determinar el momento de los protones, dado por $p = eEr$. Variando la intensidad del campo magnético podemos cambiar el momento de los protones que atraviesan los detectores fijos y analizar la distribución de momento de los protones dispersados. La figura 9-33(b) muestra el resultado experimental. Además del pico principal de la distribución de momento de los protones (correspondiente a la dispersión elástica en el blanco), hay varios picos secundarios que corresponden a protones de momento o energía cinética menores. Estos picos secundarios se deben a la dispersión inelástica, en la cual los protones incidentes entregan parte de su energía cinética a un protón del blanco; este protón se excita a un estado isobárico de energía bien definida. El estudiante habrá notado que este experimento es similar al de Franck y Hertz, en el que la colisión electrón-átomo demostró la existencia de estados estacionarios excitados de energía definida en el átomo.

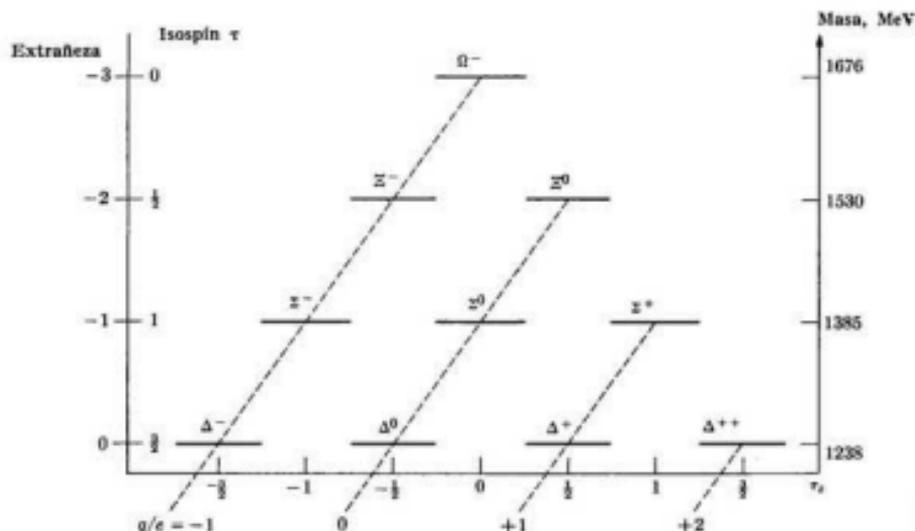


Fig. 9-34. Ordenamiento de los hiperones más livianos con espín $\frac{1}{2}$ y paridad positiva, según el camino óctuple de Gell-Mann.

EJEMPLO 9.10. El experimento omega menos.

Solución: Según la teoría del "camino óctuple" de Gell-Mann, las partículas deben estar agrupadas en familias cuyos miembros tienen espín y paridad iguales. Si de entre las resonancias mostradas en la fig. 9-25 representamos la familia de las diez más livianas que tienen espín $\frac{1}{2}$ (y paridad positiva), obtenemos el ordenamiento de la fig. 9-34 que tiene una simetría geométrica elegante. Cuando Gell-Mann lanzó su idea (1961) sólo se conocía el cuadruplete Δ y el triplete Σ . Pero poco después (1962) se descubrió el doblete Ξ que encajaba bien en el esquema. Teniendo en cuenta la regularidad de la estructura piramidal era fácil predecir que la partícula que faltaba en la cima debía tener $\tau_3 = 0$ y $\tau = 0$ y ser, por lo tanto, un singlete. Además su extrañeza debía ser $s = -3$ resultando una carga $-e$ conforme a la ec. (9.11). Finalmente, se podía inferir de la regularidad de las diferencias de masas $\Delta - \Sigma$ y $\Sigma - \Xi$ que la nueva partícula (llamada Ω^- por Gell-Mann) debía tener una masa de 1675 MeV aproximadamente. La partícula faltante estaba, en consecuencia, identificada teóricamente. (La predicción de Gell-Mann tenía una base teórica más seria que este simple ordenamiento geométrico.) Teniendo en cuenta estas propiedades y las leyes de conservación, los experimentadores supusieron que el Ω^- podía desintegrarse en $\Xi^0 + \pi^-$, $\Xi^- + \pi^0$ ó $\Lambda^0 + \bar{K}^-$; esto significaba que observando los productos de desintegración se podía tener una clave para identificar esta partícula.

El paso siguiente era ver si era posible producir y observar la partícula en el laboratorio. Un proceso posible de producción, compatible con las leyes de conservación, podía ser



En 1963 se preparó el dispositivo experimental en el Laboratorio Nacional de Brookhaven. Un haz de protones de 33 GeV generado por el acelerador incidía sobre un blanco de tungsteno produciendo mesones \bar{K}^- junto con piones, antipro-

tones y otras partículas. Para extraer los mesones K^- los experimentadores diseñaron un ingenioso dispositivo que la fig. 9-35 muestra en forma simplificada. Eligió, por conveniencia experimental, mesones K^- con una energía cinética de 5,0 GeV (que está muy por encima del umbral de energía del proceso que es 3,2 MeV) y los extrajeron del tubo del acelerador por medio de un imán deflector. El haz extraído contenía, además de las partículas K^- , un gran número de π^- y algunos \bar{p}^- por lo que la tarea siguiente fue separar las partículas K^- de las otras. Esto se llevó a cabo

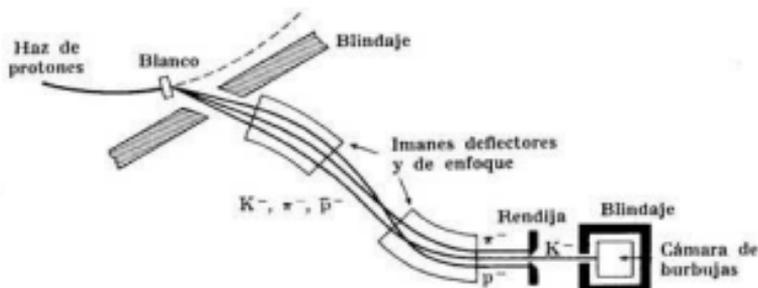
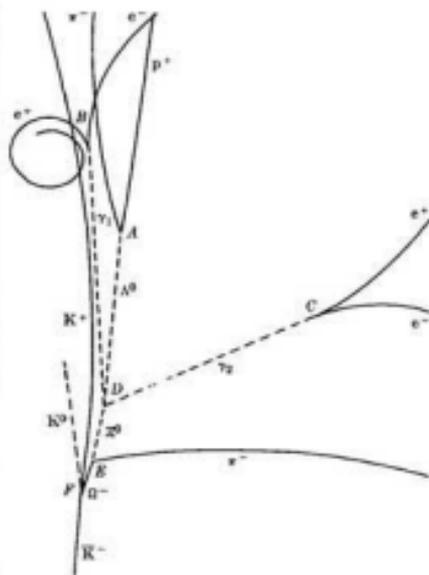


Fig. 9-35. Diagrama esquemático del experimento Ω^- . Antes de la separación había aproximadamente 800 π^- y 10 \bar{p}^- por cada 10 partículas K^- . Después de la separación había sólo un π^- y ningún \bar{p}^- por cada 10 partículas K^- .



(a)



(b)

Fig. 9-36. Fotografía que mostró por primera vez la producción de la partícula Ω^- . (Fotografía cortesía del Laboratorio Nacional de Brookhaven.)

11. "Unified Theories of Elementary Particles", S. Blackman, *Physics Today*, febrero de 1966, pág. 55
12. *Structure of Matter*, W. Finkelburg. Academic Press, New York, 1964, cap. 5, secs. 20-26
13. "Symmetry and Conservation Laws", E. Wigner y "Elementary Particles", G. Chew, publicados en *The Scientific Endeavor*. Rockefeller Institute, New York, 1965.
14. *The Feynman Lectures on Physics*, vol. I. R. Feynman, R. Leighton y M. Sands. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1963, cap. 52
15. *The Fundamental Particles*, C. Swartz. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1965
16. *Elementary Particles*, D. Frisch y A. Thorndike. Momentum Books, Van Nostrand, New York, 1964
17. *Particles and Accelerators*, R. Gouiran, World University Library. McGraw-Hill, New York, 1967

Problemas

9.1 Calcular el radio, la energía y la velocidad angular correspondientes a la órbita del estado fundamental del positronio. Determinar también la primera energía de excitación del positronio. ¿Cuántas revoluciones hará en promedio el positronio antes de aniquilarse si está en (a) el estado *singlete*, (b) el estado *triplete*?

9.2 El muonio se forma cuando un mesón μ y un electrón o un positrón giran uno alrededor del otro. Determinar: (a) la energía y el radio del muonio en el estado fundamental; (b) la energía de disociación del muonio.

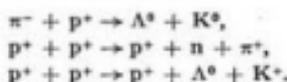
9.3 Un pion negativo puede ser capturado en una órbita estable alrededor de un núcleo, constituyendo un *átomo mesíco*. Suponiendo que se puede calcular la energía y el radio de la órbita mesónica con las fórmulas usadas para las órbitas electrónicas en el átomo de hidrógeno (ejemplo 3.1): (a) ¿Qué energía se libera cuando un pion libre en reposo es capturado en el estado fundamental alrededor de un protón? (b) Calcular el radio de la órbita del estado fundamental de un pion que se mueve alrededor de un protón. (c) Estimar para qué núcleo el radio de la órbita del estado fundamental del pion es igual al radio del núcleo.

9.4 Un kaón neutro de 100 MeV de energía cinética se desintegra en vuelo en dos piones de carga opuesta. La

energía cinética de uno de los piones es 200 MeV. Calcular el momentum de cada pion y los ángulos que forman sus trayectorias en el sistema de referencia L .

9.5 Se observa que un mesón K^0 neutro se desintegra en un par de piones de carga opuesta. Inicialmente las trazas de los piones son perpendiculares en el sistema L , pero en un campo magnético de $8,5 \times 10^{-4}$ T se desvían formando arcos de 0,8 m y 1,6 m de radio. Calcular la masa en reposo del mesón K y su energía cinética.

9.6 Determinar el Q de las siguientes reacciones y el umbral de energía del proyectil en el sistema L :



En todos los casos el proyectil es la primera partícula. El blanco es la segunda partícula, que se supone está en reposo en el laboratorio.

9.7 Calcular la energía cinética mínima del protón incidente necesaria para iniciar el proceso mostrado en la fig. 9-12.

9.8 Determinar la energía del fotón en el proceso $\pi^- + p^+ \rightarrow n + \gamma$, cuando las dos partículas que chocan están en reposo.

9.9 ¿Cuál es el umbral de energía cinética de la partícula incidente en los

procesos ilustrados en las figs. 9-10 y 9-11?

9.10 Hallar el campo magnético necesario para obtener el momentum del \bar{p}^- elegido en el experimento antiproton (ejemplo 9.2).

9.11 Considerar en el proceso $\pi^+ \rightarrow \gamma + \gamma$ el caso en que los dos fotones son emitidos, en el sistema C , en dirección perpendicular a \mathbf{p}_π (en el sistema L). Demostrar que en el sistema L sus energías son $\frac{1}{2}E_\pi$ y que se mueven formando con \mathbf{p}_π un ángulo dado por $\arctg m_\pi c/p_\pi$.

9.12 Un mesón π^0 que en el sistema L tiene una energía cinética igual a su energía en reposo, se desintegra en dos fotones. Suponiendo que en el sistema C los dos fotones se emiten a 30° y 210° respecto a la dirección de movimiento del π^0 en el sistema L , ¿cuáles son sus energías y el ángulo que forman sus direcciones de movimiento en el sistema L ?

9.13 Considerar la desintegración de un mesón π^0 en dos fotones. Si las energías de éstos son E_1 y E_2 , demostrar que están relacionadas por

$$E_1 E_2 = \frac{1}{2}(m_\pi c^2)^2 / (1 - \cos \theta),$$

donde θ es el ángulo entre las direcciones de los dos fotones en el sistema L .

9.14 Un haz de piones negativos (π^-) entra en una cámara de burbujas e inicia la reacción $\pi^- + p^+ \rightarrow \Lambda^0 + K^0$. Los sucesivos procesos de desintegración del Λ^0 y del K^0 también tienen lugar dentro de la cámara. Se aplica un campo magnético en la región ocupada por la cámara. Hacer un diagrama mostrando todo el proceso. Se debe representar las partículas neutras con líneas de trazos y las cargadas con líneas llenas de curvatura apropiada.

9.15 Un positrón de 1 MeV choca con un electrón en reposo en el sistema L y ambos se aniquilan. (a) ¿Cuál es la energía, en el sistema C , de los dos fotones emitidos? (b) Si uno de los fotones se emite en la dirección de movimiento del positrón y el otro en dirección opuesta, hallar las energías en el sistema L .

9.16 La probabilidad de aniquilación de positrones por unidad de tiempo es $\lambda = 7,48 \times 10^{-14} n \text{ s}^{-1}$, donde n es el

número de electrones por unidad de volumen. Mostrar que la vida media de positrones que se mueven en argón ($Z = 18$) es $T = 2,67 \times 10^{-7}/p$, donde p es la presión del argón en atmósferas.

9.17 En el sincrotrón de gradiente alternado (SGA) de Brookhaven es posible acelerar protones hasta una energía de 33 GeV. (a) ¿Cuánta energía hay disponible para reacciones con los protones (en reposo en el sistema L) de la cámara de burbujas de Brookhaven? (b) ¿Cuánta energía hay disponible si se almacenan los protones en un anillo circular y se los hace chocar con los protones de la misma energía almacenados en otro anillo en el cual circulan en sentido opuesto?

9.18 Un mesón π de 100 MeV se desintegra produciendo un mesón μ en dirección delantera. Calcular la energía cinética del mesón μ en el sistema L .

9.19 Calcular la energía del fotón emitido cuando una partícula Σ^0 que está en reposo en el sistema L , se desintegra en una partícula Λ^0 .

9.20 Aplicando la transformación de Lorentz para la energía y el momentum (apéndice I, ec. A.16), deducir las ecs. (9.14) que relacionan la energía y el momentum de los fotones en los sistemas C y L . (Tomar el eje X paralelo a la velocidad relativa, que está dada por la ec. 9.12.)

9.21 Considerando el proceso $\pi^- + p^+ \rightarrow \Lambda^0 + K^0$, (a) ¿cuáles son los valores posibles de T para las dos partículas que reaccionan y para las dos resultantes? Determinar el valor de T para el cual se conserva el isospin. Determinar también si se conservan T_x y δ . (b) Repetir el análisis para el proceso $\pi^- + p^+ \rightarrow \Lambda^0 + \pi^0$ y concluir si se puede esperar que el proceso ocurra en la naturaleza.

9.22 Considerar el proceso $p^+ + p^+ \rightarrow p^+ + n + \pi^+$. Determinar el isospin total; ¿se conservan T_x y la extrañeza? Repetir para $p^+ + p^+ \rightarrow p^+ + n + e^+ + \nu_e$. Este proceso ocurre con una probabilidad mucho menor que el primero. ¿Por qué?

9.23 Comprobar las diversas leyes de conservación (excepto energía, momentum y momentum angular) en los si-

guientes procesos con interacciones fuertes:

- (a) $p^+ + p^+ \rightarrow p^+ + \Lambda^0 + K^+$
 (b) $\pi^- + p^+ \rightarrow \Sigma^0 + K^0$
 (c) $p^+ + p^+ \rightarrow \Xi^0 + p^+ + K^0 + K^+$
 (d) $\Lambda^0 + p^+ \rightarrow n + p^+ + \bar{K}^0$
 (e) $\bar{K}^- + p^+ \rightarrow K^+ + \Xi^-$

En cada caso, determinar los valores de T_z , T y ϕ para las partículas que reaccionan y las resultantes.

9.24 ¿Cuáles leyes de conservación se cumplen y cuáles se violan en los procesos

$$\eta^0 \rightarrow p^+ + e^- \quad \text{y} \quad \pi^0 \rightarrow \gamma + \gamma?$$

¿Por qué ocurre $\Sigma^0 \rightarrow \Lambda^0 + \gamma$ pero no se observa $\Sigma^+ \rightarrow p^+ + \gamma$? ¿Por qué ocurre $\Xi^- \rightarrow \Lambda^0 + \pi^-$ pero no se observa $\Xi^- \rightarrow \eta^0 + \pi^-$?

9.25 Analizar el proceso $\bar{K}^- + p^+ \rightarrow \Omega^- + K^+ + K^0$ desde el punto de vista de las leyes de conservación. Calcular el umbral de energía cinética de la partícula \bar{K}^- .

9.26 Demostrar que todos los procesos $\pi^- + p^+ \rightarrow n + \gamma$, $\pi^- + d \rightarrow 2n + \gamma$ y $\pi^+ + d \rightarrow 2p^+ + \gamma$ implican que el espín del pion es 0 ó 1. (Ver el problema siguiente.)

9.27 Llamemos σ_1 a la sección eficaz del proceso $p^+ + p^+ \rightarrow \pi^+ + d$ y σ_2 a la del proceso inverso $\pi^+ + d \rightarrow p^+ + p^+$. Podemos demostrar que dichas secciones eficaces están relacionadas por

$$\sigma_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{p_\pi}{p_p} \right)^2 (2s_\pi + 1) \sigma_2,$$

donde p_π y p_p son el momentum del pion y el del protón en el sistema C cuando son incidentes y s_π es el espín del pion. Se ha encontrado experimentalmente que $\sigma_1 = 0,18$ mb para protones con una energía de 340 MeV en el sistema L y $\sigma_2 = 3,1$ mb para piones de 29 MeV de energía en el sistema L . Verificar que estos datos experimentales son compatibles con $s_\pi = 0$ pero no con $s_\pi = 1$. [Sugerencia: Para hallar p_π y p_p en el sistema C , usar fórmulas no relativistas una vez calculada la energía cinética.] Además, para justificar el empleo de la relación anterior entre σ_1 y σ_2 , verificar que las energías en el sistema C son de magnitud comparable.

9.28 Utilizando la ley de conservación del momentum angular, probar que en la desintegración $\Lambda^0 \rightarrow \pi^- + p^+$ el momentum angular orbital resultante de los productos en el sistema C debe ser 0 o 1 (canal s) ó 1 (canal p). Como resultado, se puede demostrar que la distribución angular de los piones es proporcional a $1 + k \cos \phi$, donde ϕ es el ángulo entre la dirección de movimiento del pion (en el sistema C) y el espín de la partícula Λ^0 . Verificar que esta distribución angular es incompatible con la conservación de la paridad. El valor experimental de k es 0,62. [Sugerencia: Para probar la última parte, hacer una reflexión en un plano perpendicular al espín de la partícula Λ^0 .]

9.29 Probar que la desintegración η^0 viola la conservación del isospín. ¿Qué interacción podría ser responsable del proceso?

9.30 Llamemos $\xi(\pm)$ a la función de onda de isospín de un nucleón correspondiente a $\tau_z = \pm \frac{1}{2}$, de modo que $\xi(+)$ corresponde a un protón y $\xi(-)$ a un neutrón. Por analogía con la función de onda de espín de dos partículas (sección 4.2), escribir las funciones de onda de isospín de dos nucleones, correspondientes a $T = 0$ y $T = 1$. Indicar el valor de T_z en cada caso. Identificar las partículas involucradas en cada función de onda.

9.31 Si r_{ij} es la distancia entre las partículas i y j , demostrar que $f(r_{ij})$ es un invariante traslacional. Determinar si las interacciones gravitacional y eléctrica son invariantes frente a traslaciones.

9.32 Hacer una tabla que muestre la relación entre las interacciones fuertes, electromagnéticas y débiles, y las siguientes leyes: conservación del isospín, de la extrañeza y de la paridad, conjugación de carga e inversión del tiempo.

9.33 ¿Cómo afecta la inversión del tiempo a los campos eléctrico y magnético? Probar que las ecuaciones de Maxwell son invariantes frente a la inversión del tiempo.

9.34 Demostrar que una reflexión en el plano XY (o en cualquier otro plano coordenado) cambia un sistema de referencia derecho en uno izquierdo.

9.35 Demostrar que si A y B son vectores polares, $A \times B$ es un vector axial y que si A es polar y B axial $A \times B$ es polar. [Sugerencia: Analizar cómo se comporta $A \times B$ al hacer una reflexión en el plano XY .]

9.36 Escribir las componentes cartesianas de L y analizar cómo cambian en una reflexión en el plano XY . Comparar con la discusión concerniente a la fig. 9-16.

9.37 Estudiar el comportamiento de las ecuaciones de Maxwell al hacer reflexiones en el plano XY . ¿Se puede concluir que estas ecuaciones son compatibles con la conservación de la paridad en las interacciones electromagnéticas?

9.38 Probar que una reflexión respecto al origen de coordenadas (es decir, el cambio de x, y, z por $-x, -y, -z$) es equivalente a una reflexión en el plano XY seguida de una rotación de 180° alrededor del eje Z . Concluir entonces que el comportamiento frente a paridad respecto a reflexión en un plano y en un punto, es el mismo.

9.39 Se puede demostrar que en las transiciones dipolares eléctricas, el campo electromagnético de un fotón tiene paridad impar. Probar que la regla de selección $\Delta l \neq 0$ introducida en la sección 3.4, es necesaria para que la paridad se conserve en la transición o, en forma más general, que los estados inicial y final deben tener paridad opuesta.

9.40 Estimar las áreas bajo las curvas de la fig. 9-31 y comparar con la carga del protón y del neutrón.

9.41 Se ha observado que el ^{152}Eu se desintegra por captura electrónica conforme a $^{152}\text{Eu} + e^- \rightarrow ^{152}\text{Sm}^* + \nu$. A su vez, el samario excitado se desintegra por emisión gamma conforme a $^{152}\text{Sm}^* \rightarrow$

$\rightarrow ^{152}\text{Sm} + \gamma$. Los núcleos de ^{152}Eu y ^{152}Sm tienen espín cero. Observando los rayos γ emitidos en dirección opuesta a la de emisión de los neutrinos, los físicos hallaron que los fotones tienen predominantemente polarización derecha (o sea que tienen helicidad negativa). Probar que esto implica que el neutrino también tiene helicidad negativa. [Sugerencia: Analizar la conservación del momentum angular en todo el proceso.]

9.42 En el proceso

$$\pi^- + p^+ \rightarrow \Lambda^0 + K^0,$$

los Λ^0 están fuertemente polarizados con sus espines perpendiculares al plano de producción en la dirección del vector $\mathbf{p}_\pi \times \mathbf{p}_p$ (ver fig. 9.37). ¿Se conserva la paridad en el proceso? En la desintegración subsiguiente del Λ^0 en π^- y p^+ , los productos son emitidos predominantemente como se muestra en la figura. ¿Se conserva la paridad en el proceso de desintegración del Λ^0 ? (Comparar con el problema 9.28.)

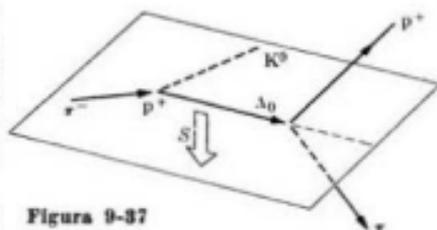


Figura 9-37

9.43 Probar que si en el experimento con el ^{60}Co (fig. 9.18) los electrones fueran emitidos con la misma intensidad hacia atrás y hacia delante, la paridad se conservaría en el proceso.

PARTE 2

FISICA ESTADISTICA

- 10 *Mecánica estadística clásica*
- 11 *Termodinámica*
- 12 *Propiedades térmicas de los gases*
- 13 *Estadística cuántica*

En los capítulos precedentes de este texto hemos estudiado los constituyentes fundamentales de la materia: partículas, núcleos, átomos y moléculas. Empero, no podemos observar los átomos o las moléculas individuales en acción. Lo que observamos es el resultado de un gran número de ellos actuando de una manera más o menos organizada: es decir, procesos macroscópicos. Las propiedades de la materia como un todo (llamadas propiedades macroscópicas) son el resultado de dichas acciones colectivas. El comportamiento colectivo de un gran número de átomos y moléculas resulta fundamentalmente de sus interacciones electromagnéticas, ya que la interacción gravitacional desempeña un papel de importancia menor y las interacciones fuertes y débiles afectan sólo los procesos nucleares. Procesos familiares, tales como la fusión y la vaporización, la difusión, la conducción térmica y eléctrica, la emisión de electrones por metales calientes y muchos otros, y también conceptos tales como temperatura, capacidad calórica, calor de cambio de fase, etc., se incluyen dentro de esta categoría de propiedades colectivas. Es precisamente la comprensión y control de estos fenómenos colectivos lo que interesa mayormente al físico aplicado, al ingeniero, al químico y a otros científicos en su esfuerzo por utilizar las fuerzas de la naturaleza para el bienestar del hombre.

Es necesario idear métodos especiales para describir los procesos en que interviene un gran número de partículas. Estos métodos son necesariamente de naturaleza estadística, ya que no podemos tener en cuenta el movimiento detallado de las partículas (tampoco es necesario hacer ese esfuerzo para obtener resultados de valor práctico). Por esta razón el estudio de los procesos macroscópicos desde el punto de vista molecular constituye lo que se denomina *física estadística*. Se debe interpretar la palabra "estadística" como calificativo de una técnica para describir procesos que involucran un gran número de partículas cuyas interacciones individuales son conocidas, sin considerar el comportamiento individual de cada una. A este respecto señalamos que se ha aplicado métodos estadísticos al estudio de átomos con muchos electrones y a núcleos con muchos nucleones.

En esta parte del texto desarrollaremos primero el método estadístico conocido como *mecánica estadística clásica*, trataremos sus aplicaciones generales a lo que se denomina *termodinámica* y lo aplicaremos al análisis de propiedades de los gases. Concluiremos esta parte con una introducción breve a la *mecánica estadística cuántica* ilustrada con algunas de sus aplicaciones.

10

MECANICA ESTADISTICA
CLASICA

- 10.1 *Introducción*
- 10.2 *Equilibrio estadístico*
- 10.3 *Ley de distribución de Maxwell-Boltzmann*
- 10.4 *Temperatura*
- 10.5 *Equilibrio térmico*
- 10.6 *Aplicación al gas ideal*

10.1 Introducción

La mecánica está basada en ciertos principios fundamentales, como la conservación de la energía y del momentum, que son aplicables al movimiento de partículas en interacción. En este capítulo extenderemos los principios de la mecánica a sistemas de muchas partículas, enfatizando los métodos utilizados para obtener propiedades colectivas o macroscópicas del sistema, sin considerar el movimiento detallado de cada partícula. Esta técnica se denomina *mecánica estadística*. Usamos aquí "partícula" en un sentido amplio que incluye a las partículas fundamentales, como el electrón, o a las asociaciones de partículas fundamentales, como los átomos o las moléculas. Una "partícula" será entonces cada una de las unidades definidas y estables que componen un sistema físico determinado.

Es posible darse cuenta fácilmente de que necesitamos un tratamiento estadístico de las propiedades macroscópicas de la materia si recordamos que en un centímetro cúbico de gas a temperatura y presión normales hay unas 3×10^{19} moléculas. Es prácticamente imposible a la vez que innecesario tener en cuenta el movimiento de cada molécula en detalle para determinar las propiedades macroscópicas del gas, tales como su presión o su temperatura. Por otra parte, para hacer un análisis estadístico de un sistema con muchas partículas, tenemos que hacer una estimación razonable acerca del estado dinámico de cada partícula, basada en las propiedades generales de las partículas. Hacemos esta estimación introduciendo el concepto de *probabilidad de distribución* de las partículas entre los diversos estados dinámicos en que pueden encontrarse. Al introducir la idea de probabilidad no estamos implicando que suponemos que las partículas se mueven al azar o en forma caótica, sin obedecer ninguna ley definida. El concepto de probabilidad surge de nuestro método de estimar los estados dinámicos de las partículas de un sistema, y no del mecanismo por el cual las partículas del sistema se distribuyen en la naturaleza entre los posibles estados dinámicos como resultado de sus interacciones. Luego, la validez del análisis estadístico de un sistema de muchas partículas está directamente relacionada con la de nuestras hipótesis acerca de la probabilidad de distribución de las partículas.

10.2 Equilibrio estadístico

Consideremos un sistema aislado compuesto de un gran número N de partículas, en el cual cada partícula tiene a su disposición varios estados de energía E_1, E_2, E_3, \dots . Los estados de energía pueden estar cuantizados (como los estados rotacionales y vibracionales de una molécula) o pueden formar un espectro prácticamente continuo (como la energía cinética traslacional de las moléculas de un gas). En un instante dado las partículas están distribuidas entre los diferentes estados, de modo que n_1 partículas tienen energía E_1 , n_2 partículas energía E_2 y así sucesivamente. El número total de partículas es

$$N = n_1 + n_2 + n_3 + \dots = \sum n_i \quad (10.1)$$

y suponemos que permanece constante durante todos los procesos que ocurren en el sistema. La energía total del sistema es

$$U = n_1 E_1 + n_2 E_2 + n_3 E_3 + \dots = \sum_i n_i E_i. \quad (10.2)$$

Esta expresión de la energía total del sistema supone implícitamente que las partículas no interactúan (o que sólo lo hacen ligeramente), por lo que podemos atribuir a cada partícula una energía que depende solamente de sus coordenadas. Si consideramos las interacciones debemos agregar a la ec. (10.2) términos de la forma $E_{p_{12}} + E_{p_{13}} + \dots + E_{p_{23}} + \dots$ correspondientes a la energía potencial de interacción entre pares de partículas. Cada término incluye las coordenadas de ambas partículas interactuantes. En este caso no podemos hablar de la energía de cada partícula sino solamente de la del sistema.

Puede parecer a primera vista que nuestro tratamiento no está de acuerdo con la realidad, ya que todas las partículas que componen los sistemas físicos están en interacción. Sin embargo, en condiciones especiales podemos usar una técnica denominada del *campo autocompatible*, en la que se considera que cada partícula está sujeta a una interacción *promedio* debida a las otras, teniendo una energía potencial promedio que sólo depende de sus coordenadas; podemos entonces seguir escribiendo U como en la ec. (10.2), sólo que ahora $E_i = E_{ki} + \bar{E}_{pi}$. En los casos en que es necesario considerar explícitamente las interacciones entre partículas, hay que usar otras técnicas. Hablaremos de ellas en el capítulo 12 al tratar los gases reales.

Si el sistema está aislado, la energía total U debe ser constante. Sin embargo, puede cambiar la distribución de las partículas entre los estados disponibles de energía debido a sus interacciones y colisiones. Por ejemplo, en un gas, una molécula rápida puede chocar con una lenta; después del choque la molécula rápida puede haberse frenado y la lenta puede haberse acelerado. O un átomo excitado puede chocar inelásticamente con otro átomo, transfiriendo su energía de excitación como energía cinética de ambos átomos. En ambos ejemplos las partículas están en estados diferentes después de la colisión. En otras palabras: los números n_1, n_2, n_3, \dots que dan la partición (o distribución) de las N partículas entre los estados disponibles de energía, pueden estar cambiando. Es razonable suponer que para cada estado macroscópico de un sistema de partículas hay una partición que es más probable que cualquier otra. De otro modo: podemos decir que, *dadas las condiciones físicas del sistema de partículas* (el número de partículas, la energía total y la estructura de cada partícula) *hay una partición mucho más probable*. Una vez alcanzada esta partición, se dice que el sistema está en *equilibrio estadístico*.

Un sistema en equilibrio estadístico no se apartará de la partición más probable (excepto por fluctuaciones estadísticas) a no ser que sea perturbado por un agente externo. Queremos significar con esto que los números de partición n_1, n_2, n_3, \dots pueden fluctuar alrededor de los valores correspondientes a la partición más probable sin que se produzcan efectos macroscópicos. Supongamos, por ejemplo, que tenemos un gas en equilibrio estadístico, una de cuyas moléculas con energía E_i choca con otra de energía E_j ; después de la colisión sus energías

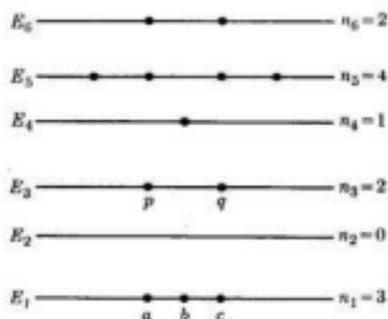
son E_r y E_s . Podemos suponer que después de un corto tiempo otro par de moléculas sale de los estados de energía E_r y E_s y que el mismo par u otro va a los estados E_i y E_j , de modo que estadísticamente, la partición no ha cambiado.

El problema clave de la mecánica estadística es hallar la partición (o ley de distribución) más probable de un sistema aislado, dada su composición. Una vez hallada la partición más probable, el problema siguiente es idear métodos para obtener de dicha partición las propiedades observadas macroscópicamente. Es necesario hacer alguna hipótesis para obtener la ley de distribución. Se puede probar varias hipótesis razonables hasta obtener una ley de distribución que esté de acuerdo con los resultados experimentales. Actualmente se usan tres leyes de distribución o sea tres estadísticas. Una es la que se denomina *ley de distribución de Maxwell-Boltzmann*, que es la base de la *estadística clásica*. En este capítulo estudiaremos dicha distribución.

La mecánica estadística clásica se desarrolló a fines del siglo XIX y comienzos del XX como resultado de los trabajos de Ludwig Boltzmann (1844-1906), James C. Maxwell (1831-1879) y Josiah W. Gibbs (1839-1903). La mecánica estadística clásica tiene un amplio campo de aplicación, particularmente en el tratamiento de muchas propiedades de los gases. Las dos leyes de distribución restantes, la de *Fermi-Dirac* y la de *Bose-Einstein*, pertenecen a la *estadística cuántica* y serán tratadas en el capítulo 13. Se puede considerar que la mecánica estadística clásica es el límite de las dos estadísticas cuánticas (ver la sección 13.9).

10.3 Ley de distribución de Maxwell-Boltzmann

Consideremos un sistema compuesto de un gran número de partículas *idénticas y distinguibles*. Por idénticas entendemos que las partículas tienen la misma estructura y composición. Por distinguibles entendemos que es posible distinguir, o decir cual es la diferencia, entre una partícula idéntica y otra. A primera vista, parece existir una contradicción entre idéntica y distinguible [y realmente es así! Más tarde consideraremos esta aparente falta de lógica; empero, los resultados que obtengamos ahora serán suficientemente simples como para justificar un estudio preliminar de un sistema así compuesto.



Representemos una partición determinada n_1, n_2, n_3, \dots mediante el ordenamiento geométrico mostrado en la fig. 10-1. Cada línea representa un estado particular de energía E_i y el número de puntos indica el número n_i de partículas que hay en cada estado de energía. En nuestro ejemplo $n_1 = 3, n_2 = 0, n_3 = 2, n_4 = 1$, etc.

Fig. 10-1. Distribución de partículas entre diversos estados de energía.

Nuestra primera suposición es que todos los estados de energía son igualmente accesibles a las partículas del sistema, es decir que *todos los estados de energía tienen la misma probabilidad de ser ocupados*. Supondremos entonces que

la probabilidad de una partición determinada es proporcional al número de maneras diferentes en que las partículas pueden distribuirse entre los estados disponibles de energía para producir la partición.

Veamos entonces como ejemplo, el número de maneras diferentes en que se puede obtener la partición de la fig. 10-1. Por diferentes queremos decir que los números n_1, n_2, n_3, \dots son fijos, pero que las partículas que hay en cada estado son diferentes. Esto es: se considera que una partición en la que la partícula a está en el estado E_1 y la partícula p está en el E_2 , es diferente de una partición en la que la partícula a está en el estado E_2 y la partícula p en el E_1 . Esto proviene de suponer que las partículas componentes son distinguibles. Si fueran indistinguibles tendríamos que suponer que las dos particiones son iguales.

Para comenzar a llenar el estado E_1 podemos escoger la primera partícula entre todas las N partículas disponibles. Hay entonces N modos distinguibles de escoger la primera partícula. La segunda partícula se puede escoger de $N-1$ modos diferentes, ya que sólo quedan $N-1$ partículas disponibles. La tercera partícula se puede escoger de $N-2$ modos diferentes. Por lo tanto, el número de modos diferentes distinguibles en que podemos escoger las tres primeras partículas para colocarlas en el estado E_1 es

$$N(N-1)(N-2) = \frac{N!}{(N-3)!} \quad (10.3)$$

Llamemos a, b y c a las tres partículas escogidas. Podemos tomarlas en cualquiera de los siguientes $3! = 6$ órdenes o permutaciones diferentes: $abc, bca, cab, bac, acb, cba$. Pero estos $3!$ órdenes diferentes de colocar las partículas a, b y c en E_1 dan la *misma* partición, ya que todos corresponden a las partículas a, b y c en E_1 . Una partición está determinada solamente por el número y la designación de las partículas que están en cada estado y no por el orden en que fueron colocadas allí, el cual no tiene importancia una vez constituida la partición. En consecuencia, para obtener el número total de modos distinguibles diferentes en que podemos escoger las tres primeras partículas para ocupar el estado E_1 , debemos dividir la ec. (10.3) por $3!$ con lo cual resulta

$$\frac{N!}{3!(N-3)!}$$

La expresión general del número total de modos distinguibles diferentes de colocar n_1 partículas en el estado E_1 es entonces

$$\frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} \quad (10.4)$$

Este es justamente el número de permutaciones de N objetos tomados de n_1 por vez. Al pasar al segundo estado E_2 , sólo disponemos de $N - n_1$ partículas; luego, si queremos colocar n_2 partículas en el estado E_2 debemos emplear la ec. (10.4) con $N - n_1$ en vez de N y n_2 en vez de n_1 , resultando

$$\frac{(N - n_1)!}{n_2!(N - n_1 - n_2)!} \quad (10.5)$$

Para el tercer estado nos quedan sólo $N - n_1 - n_2$ y estamos colocando n_3 partículas en él, por lo que en vez de la ec. (10.4) obtenemos

$$\frac{(N - n_1 - n_2)!}{n_3!(N - n_1 - n_2 - n_3)!}$$

Se puede continuar el proceso hasta agotar todos los estados de energía. El número total de modos diferentes distinguibles de obtener la partición n_1, n_2, n_3, \dots se obtiene multiplicando las expresiones (10.4), (10.5) y las siguientes correspondientes a los estados de energía restantes. Al hacer esto, el estudiante puede verificar que ciertos factores, como $(N - n_1)!$, $(N - n_1 - n_2)!$, etc., se cancelan, resultando la expresión simplificada

$$P = \frac{N!}{n_1!n_2!n_3!\dots} \quad (10.6)$$

que da el número de modos diferentes distinguibles en que se puede obtener la partición n_1, n_2, n_3, \dots . Supondremos ahora que la probabilidad de obtener esa partición es proporcional a P . Por ejemplo, para la partición de la fig. 10-1 la probabilidad P es

$$P = \frac{N!}{3!0!2!1!4!\dots}$$

Debemos tomar $0! = 1$, ya que hay un sólo modo de escoger $n_i = 0$. En la ec. (10.6) hay que escoger los números n_1, n_2, n_3, \dots de modo que se satisfagan las ecs. (10.1) y (10.2), que dan el número total de partículas y la energía total.

Hasta ahora hemos supuesto que todos los estados disponibles tienen la misma probabilidad de ser ocupados. Puede ocurrir que los estados tengan *probabilidades intrínsecas* g_i diferentes. Por ejemplo, un cierto estado de energía puede ser compatible con más estados diferentes de momentum angular que otros estados por lo que es más probable que sea ocupado. Si se tiene en cuenta esta probabilidad intrínseca, la probabilidad P de una partición determinada es diferente de la ec. (10.6). Es evidente que si g_i es la probabilidad de encontrar una partícula en el nivel de energía E_i , la probabilidad de encontrar dos partículas en dicho estado es $g_i \times g_i = g_i^2$, y para n_i partículas es $g_i \times g_i \times g_i \times \dots \times g_i = g_i^{n_i}$. Luego, la probabilidad de una partición determinada, en vez de estar dada por la ec. (10.6), es

$$P = \frac{N!g_1^{n_1}g_2^{n_2}g_3^{n_3}\dots}{n_1!n_2!n_3!\dots} \quad (10.7)$$

Levantemos finalmente la condición de distinguibilidad. Si todas las partículas son idénticas e indistinguibles, no podemos, por ejemplo, darnos cuenta de la diferencia proveniente de intercambiar las partículas a y p en la partición de la fig. 10-1. En consecuencia, todas las $N!$ permutaciones entre las partículas que ocupan los estados diferentes dan la misma partición. Esto significa que debemos dividir la ec. (10.7) entre $N!$, resultando

$$P = \frac{g_1^{n_1} g_2^{n_2} g_3^{n_3} \dots}{n_1! n_2! n_3! \dots} = \prod_{i=1}^N \frac{g_i^{n_i}}{n_i!}. \quad (10.8)$$

Esta es la expresión de la probabilidad de una distribución en la estadística de Maxwell-Boltzmann.

Podemos obtener el estado de equilibrio, que corresponde a la distribución más probable, determinando el máximo de P (dada por la ec. 10.8) compatible con las condiciones (10.1) y (10.2) con N y U constantes. El método es una técnica matemática simple y se explica en detalle en el ejemplo 10.1. El resultado es que la partición que tiene máxima probabilidad está dada por

$$n_i = g_i e^{-\alpha - \beta E_i}, \quad (10.9)$$

donde α y β son dos parámetros que, como se verá, están relacionados con las propiedades físicas del sistema. Se puede expresar la cantidad α en función del número total N de partículas. Utilizando la ec. (10.9) tenemos que

$$\begin{aligned} N &= n_1 + n_2 + n_3 + \dots \\ &= g_1 e^{-\alpha - \beta E_1} + g_2 e^{-\alpha - \beta E_2} + \dots \\ &= e^{-\alpha} (g_1 e^{-\beta E_1} + g_2 e^{-\beta E_2} + g_3 e^{-\beta E_3} + \dots) \\ &= e^{-\alpha} \left(\sum_i g_i e^{-\beta E_i} \right) = e^{-\alpha} Z, \end{aligned}$$

donde

$$Z = \sum_i g_i e^{-\beta E_i}, \quad (10.10)$$

la cantidad Z , denominada *función de partición*, es una expresión muy importante que aparece frecuentemente en muchos cálculos. Podemos escribir entonces $e^{-\alpha} = N/Z$ con lo que la ec. (10.9) se convierte en

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-\beta E_i}. \quad (10.11)$$

La expresión (10.11) constituye la *ley de distribución de Maxwell-Boltzmann*. La cantidad β está relacionada con la energía del sistema, o más precisamente con la energía media de una partícula, como se explicará en la sección 10.4.

Daremos ahora una aplicación de la ec. (10.11). Conforme a la definición de valor medio, tenemos que el valor medio (para una partición determinada) de una propiedad física $F(E)$ expresable en función de la energía E de una partícula, está dado por

$$\bar{F} = \frac{1}{N} \left[\sum_i n_i F(E_i) \right].$$

y para la distribución más probable o de equilibrio tenemos, usando la ec. (10.11),

$$\bar{F} = \frac{1}{Z} \sum_i g_i F(E_i) e^{-\beta E_i} \quad (10.12)$$

Por ejemplo, si las partículas de un sistema sólo pueden estar en dos estados de energía, $E_1 = +\epsilon$ y $E_2 = -\epsilon$, ambos con igual probabilidad ($g_1 = g_2 = 1$), se tiene

$$Z = e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2} = e^{-\beta\epsilon} + e^{\beta\epsilon} = 2 \cosh \beta\epsilon,$$

y la energía media de una partícula es

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \frac{1}{Z} (E_1 e^{-\beta E_1} + E_2 e^{-\beta E_2}) \\ &= \frac{\epsilon e^{-\beta\epsilon} - \epsilon e^{\beta\epsilon}}{2 \cosh \beta\epsilon} = -\epsilon \operatorname{tgh} \beta\epsilon. \end{aligned}$$

La energía total es

$$U = N\bar{E} = -N\epsilon \operatorname{tgh} \beta\epsilon,$$

que nos permite hallar β en función de U .

EJEMPLO 10.1. Obtención de la partición más probable o de equilibrio.

Solución: La partición más probable o de equilibrio corresponde (por definición) al máximo de P . Este máximo corresponde a su vez a la situación en que el cambio de P es prácticamente cero ($dP = 0$) para cambios pequeños dn_1, dn_2, dn_3, \dots de los números de ocupación n_1, n_2, n_3, \dots . Sin embargo, en vez de obtener el máximo de P es matemáticamente más fácil obtener el máximo de $\ln P$, que corresponde al mismo valor de P . Ahora bien, según la ec. (10.9) tenemos

$$\begin{aligned} \ln P &= n_1 \ln g_1 + n_2 \ln g_2 + n_3 \ln g_3 + \dots \\ &\quad - \ln n_1! - \ln n_2! - \ln n_3! - \dots \end{aligned}$$

Empleando la fórmula de Stirling para el logaritmo del factorial de un número muy grande (ver el apéndice V),

$$\ln x! \approx x \ln x - x,$$

y suponiendo que n_1, n_2, n_3, \dots son números grandes (ya que los sistemas físicos están compuestos en general de muchísimas partículas), tenemos

$$\begin{aligned} \ln P &= n_1 \ln g_1 + n_2 \ln g_2 + n_3 \ln g_3 + \dots \\ &\quad - (n_1 \ln n_1 - n_1) - (n_2 \ln n_2 - n_2) - (n_3 \ln n_3 - n_3) - \dots \\ &= -n_1 \ln n_1/g_1 - n_2 \ln n_2/g_2 - \dots + (n_1 + n_2 + \dots), \end{aligned}$$

o sea, empleando la ec. (10.1):

$$\ln P = N - \sum_i n_i \ln n_i/g_i. \quad (10.13)$$

Diferenciando esta expresión (recordando que N es constante por lo que $dN = 0$) obtenemos

$$\begin{aligned} d(\ln P) &= - \sum_i (dn_i) \ln n_i/g_i - \sum_i n_i d(\ln n_i/g_i) \\ &= - \sum_i (dn_i) \ln n_i/g_i - \sum_i n_i (dn_i)/n_i \\ &= - \sum_i (dn_i) \ln n_i/g_i - \sum_i dn_i. \end{aligned} \quad (10.14)$$

Pero de la ec. (10.1) se deduce, ya que $dN = 0$ porque N es constante,

$$\sum_i dn_i = 0. \quad (10.15)$$

En consecuencia, la ec. (10.14) se reduce a

$$- d(\ln P) = \sum_i (\ln n_i/g_i) dn_i = 0. \quad (10.16)$$

Escribimos cero en el último miembro de la ec. (10.16) porque estamos buscando el estado de equilibrio para el cual P es máxima o $dP = 0$, por lo que $d(\ln P) = P^{-1} dP = 0$. Si todos los cambios dn_1, dn_2, dn_3, \dots fueran arbitrarios, podríamos satisfacer la ec. (10.16) haciendo

$$\ln n_1/g_1 = 0, \ln n_2/g_2 = 0, \ln n_3/g_3 = 0, \dots \text{ ó } n_1 = g_1, n_2 = g_2, \dots$$

Empero, los cambios dn_i no son enteramente arbitrarios debido a la condición (10.15) que proviene de la constancia del número de partículas, y a la condición análoga

$$\sum_i E_i dn_i = 0, \quad (10.17)$$

que resulta de la constancia de la energía interna y que se obtiene diferenciando la ec. (10.2) y haciendo $dU = 0$.

Para tener en cuenta las dos condiciones (10.15) y (10.17), introducimos dos parámetros arbitrarios α y β , denominados *multiplicadores indeterminados*, conforme a una técnica matemática sugerida por Lagrange (ver el apéndice VII). Multiplicando la ec. (10.15) por α y la ec. (10.17) por β y sumando el resultado de la ec. (10.16), obtenemos

$$\sum_i (\ln n_i/g_i + \alpha + \beta E_i) dn_i = 0.$$

Esto agrega dos coeficientes arbitrarios α y β que sirven para compensar las dos condiciones restrictivas (10.15) y (10.17) dándoles valores convenientes. La distribución de equilibrio se obtiene entonces si

$$\ln n_i/g_i + \alpha + \beta E_i = 0$$

o sea

$$n_i = g_i e^{-\alpha - \beta E_i},$$

que es el resultado expresado anteriormente en la ec. (10.9).

EJEMPLO 10.2. Un sistema está compuesto de 4000 partículas que pueden estar en uno de los tres niveles o estados de energía igualmente espaciados cuyas energías son 0, ϵ y 2ϵ , y que tienen la misma probabilidad intrínseca g (ver fig. 10-2). Este sistema podría, por ejemplo, consistir en átomos de momentum angular total igual a 1 colocados en un campo magnético. Comparar la probabilidad relativa de la partición en que hay 2000 partículas en el nivel inferior, 1700 en el intermedio y 300 en el

superior, con la de la partición resultante de la transferencia de dos partículas del nivel intermedio, una al inferior y otra al superior, proceso que es compatible con la conservación de la energía.

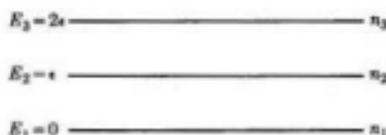


Fig. 10-2. Sistema con tres niveles de energía.

Solución: Conforme a la ec. (10.8), las probabilidades de la primera y segunda partición son

$$P_1 = \frac{g^{4000}}{2000!1700!300!}, \quad P_2 = \frac{g^{4000}}{2001!1698!301!}.$$

En vez de calcular los valores de P_1 y de P_2 , lo cual podríamos hacer utilizando la ec. (10.13), hallaremos simplemente su cociente:

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{1700 \times 1699}{2001 \times 301} = \frac{2\,888\,300}{602\,301} = 4.8.$$

Entonces, la simple transferencia de dos partículas de un total de 4000 a otros niveles, cambia la probabilidad en un factor 4.8. Esto significa que las particiones P_1 y P_2 están lejos de ser la partición de equilibrio; esto se debe a una población excesiva en el nivel intermedio. Por lo tanto, el sistema tratará de evolucionar hacia un estado en que el nivel intermedio esté menos poblado. Se sugiere que el estudiante repita el problema considerando otras distribuciones posibles de partículas, compatibles con la misma energía total. (Cambiar dos partículas más del nivel intermedio o poner dos partículas más en el nivel intermedio, una del nivel superior y otra del inferior y recalculando las probabilidades relativas.)

EJEMPLO 10.3. Determinar la partición más probable o de equilibrio para el sistema del ejemplo 10.2.

Solución: El sistema está compuesto de $N = 4000$ partículas y conforme a los datos dados en el ejemplo 10.2, su energía total (ver fig. 10-2) es $2000 \times 0 + 1700 \times \epsilon + 300 \times (2\epsilon) = 2300\epsilon$. Empleando la expresión (10.9) de la partición más probable, debemos tener, conforme a la notación de la fig. 10-2 y con $g_1 = g_2 = g_3 = g$,

$$n_1 = g e^{-\alpha}, \quad n_2 = g e^{-\alpha - \beta \epsilon}, \quad n_3 = g e^{-\alpha - 2\beta \epsilon}$$

o sea que, llamando x a $e^{-\beta \epsilon}$, tenemos $n_2 = n_1 x$ y $n_3 = n_1 x^2$. Luego, las condiciones (10.1) y (10.2) que dan respectivamente el número total de partículas y la energía total, se convierten en

$$n_1 + n_1 x + n_1 x^2 = 4000, \quad (n_1 x) \epsilon + (n_1 x^2) (2\epsilon) = 2300 \epsilon.$$

Cancelando el factor común ϵ en la segunda relación, tenemos

$$\begin{aligned} n_1(1 + x + x^2) &= 4000, \\ n_1(x + 2x^2) &= 2300. \end{aligned}$$

Eliminando n_1 , obtenemos una ecuación para x :

$$47x^2 + 17x - 23 = 0,$$

o sea $x = 0,5034$. (Sólo se usa la raíz positiva: ¿por que?) Por lo tanto, $n_1 = 2277$ (el número ha sido redondeado). En consecuencia, $n_2 = 1146$ y $n_3 = 577$. La correspondiente probabilidad de partición es

$$P = \frac{g^{4000}}{2277!1146!577!}.$$

Calculemos ahora el cambio que se produce en P cuando se saca dos partículas del nivel intermedio y se transfieren una al nivel superior y otra al inferior. La nueva probabilidad de partición es

$$P' = \frac{g^{4000}}{2278!1144!578!}.$$

El cociente de las dos probabilidades es

$$\frac{P'}{P} = \frac{1146 \times 1145}{2278 \times 578} = \frac{1\,312\,170}{1\,316\,684} = 0,9966.$$

Por lo tanto, las dos probabilidades son esencialmente iguales como tenía que ser, ya que si P es máxima, ΔP debe ser cero o muy pequeña para un cambio pequeño en los números de distribución de una partición de equilibrio.

10.4 Temperatura

El parámetro β de las ecs. (10.10) y (10.11) está directamente relacionado con una cantidad física, la temperatura, que fue introducida originalmente más para describir una experiencia sensorial que como propiedad estadística de una colección de partículas. Notemos en primer lugar que para que haya compatibilidad dimensional en las ecs. (10.10) y (10.11), debemos expresar β en unidades inversas de energía, esto es, J^{-1} , eV^{-1} , etc. Usando la ec. (10.11), tenemos que la energía total de un sistema de partículas en equilibrio estadístico es

$$\begin{aligned} U &= n_1 E_1 + n_2 E_2 + n_3 E_3 + \dots \\ &= \frac{N}{Z} (g_1 E_1 e^{-\beta E_1} + g_2 E_2 e^{-\beta E_2} + g_3 E_3 e^{-\beta E_3} + \dots) \end{aligned}$$

o sea

$$U = \frac{N}{Z} \left(\sum_i g_i E_i e^{-\beta E_i} \right). \quad (10.18)$$

Usando la definición (10.10) de la función de partición, podemos escribir U en la forma equivalente

$$U = - \frac{N}{Z} \frac{d}{d\beta} \left(\sum_i g_i e^{-\beta E_i} \right) = - \frac{N}{Z} \frac{dZ}{d\beta} = -N \frac{d}{d\beta} (\ln Z), \quad (10.19)$$

que es una relación importante entre la energía total y la función de partición de un sistema en equilibrio estadístico. La energía media de una partícula es

$$\bar{E} = \frac{U}{N} = - \frac{d}{d\beta} (\ln Z). \quad (10.20)$$

Notar que, dado un sistema físico descrito por las g_i y las E_i , la función de partición Z (y, por lo tanto, la energía total U) y la energía media \bar{E} de una partícula son funciones de β (y también de otros parámetros que determinan el estado macroscópico, como el volumen y la presión). Esto es, podemos usar el parámetro β para caracterizar la energía interna del sistema. Sin embargo, se ha encontrado que es más conveniente introducir una nueva cantidad física en vez de β . Esta cantidad se denomina *temperatura absoluta*, se designa con T y se define conforme a la relación

$$kT = \frac{1}{\beta}. \quad (10.21)$$

Es evidente que se debe expresar la cantidad kT en unidades de energía, como joules o electronvolts. La constante k se denomina *constante de Boltzmann*. Su valor está determinado por la elección de las unidades de T . Queda por demostrar que la temperatura que hemos definido aquí coincide con la temperatura medida, digamos con un termómetro de gas. Haremos esto más adelante (sección 12.2). Baste decir, por ahora, que cuando se expresa T en una unidad denominada *kelvin*, que se designa K (unidad introducida antes de que se desarrollara la mecánica estadística), el valor de la constante de Boltzmann es

$$k = 1,3805 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} = 8,6178 \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}.$$

Es claro que podríamos hacer $k = 1$ y medir la temperatura en unidades de energía directamente, como joules o electronvolts. Esto es perfectamente posible. Sin embargo, la tradición de expresar la temperatura en kelvins, originada mucho antes de que se descubriera la relación entre temperatura y estructura molecular de un sistema, está tan profundamente arraigada en la física, que es casi imposible (e inconveniente quizás) suprimir su uso. La cantidad β es positiva (excepto en algunos casos especiales), como se demuestra más adelante, por lo que la temperatura absoluta T es positiva. La temperatura más baja es cero, y corresponde a lo que se denomina *cero absoluto*.

Es necesario tener presente que la definición estadística de temperatura dada en la ec. (10.21), sólo es válida para un sistema en equilibrio estadístico y, por lo tanto, no se aplica a una sola partícula o a un sistema que no está en equilibrio. La razón de esto es que el parámetro β sólo aparece en relación con el cálculo de la partición más probable de un sistema, la cual corresponde por definición al estado de equilibrio. Si el sistema no está en equilibrio, podemos aún hablar de una temperatura "efectiva" de una porción pequeña del sistema, suponiendo que toda porción suficientemente pequeña está casi en equilibrio.

Introduciendo la definición (10.21) de temperatura en la ec. (10.10), podemos escribir la función de partición de equilibrio en la forma

$$Z = \sum_i g_i e^{-E_i/kT}. \quad (10.22)$$

Análogamente, los números de ocupación en el equilibrio son

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-E_i/kT}, \quad (10.23)$$

que da la distribución de Maxwell-Boltzmann en función de la temperatura. Como $\beta = 1/kT$, $d\beta = -dT/kT^2$, y podemos escribir la ec. (10.19) en la forma

$$U = kNT^2 \frac{d}{dT} (\ln Z). \quad (10.24)$$

La energía media por partícula, U/N , está dada por

$$\bar{E} = kT^2 \frac{d}{dT} (\ln Z). \quad (10.25)$$

Observar que la ec. (10.25) establece una relación entre la energía media por partícula de un sistema en equilibrio estadístico y la temperatura del mismo. La relación exacta depende evidentemente de la estructura microscópica del sistema, expresada por la función de partición Z , y es diferente para un gas ideal, un gas real, un líquido o un sólido. Podemos decir entonces que *la temperatura de un sistema en equilibrio estadístico es una cantidad relacionada con la energía media por partícula del sistema, dependiendo dicha relación de la estructura del sistema.*

En el caso general, el valor medio de cualquier propiedad $F(E)$ asociada con las partículas, se convierte ahora en

$$\bar{F} = \frac{1}{Z} \sum_i g_i F(E_i) e^{-E_i/kT}, \quad (10.26)$$

y es, por lo tanto, función de la temperatura. Por ejemplo, en el sistema compuesto de partículas con energías $+\epsilon$ y $-\epsilon$ considerado al final de la sección 10.3, la energía media de una partícula es, a la temperatura T ,

$$\bar{E} = -\epsilon \operatorname{tgh}(\epsilon/kT).$$

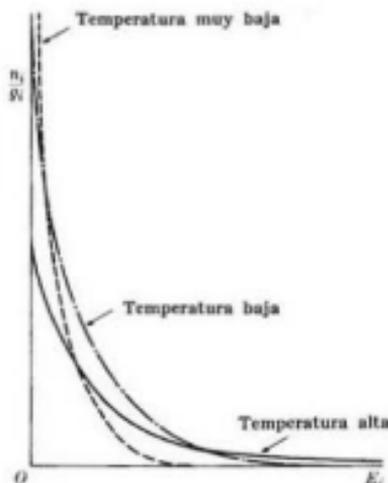


Fig. 10-3. Distribución de Maxwell-Boltzmann a tres temperaturas diferentes.

Como en la ec. (10.23) la exponencial $e^{-E_i/kT}$ es una función decreciente de E_i/kT , cuanto mayor sea este cociente, menor será el valor del número de ocupación n_i . En consecuencia, a una temperatura dada, cuanto mayor es la energía E_i , menor es el valor de n_i . En otras palabras: la ocupación de los estados disponibles para las partículas disminuye a medida que aumenta la energía. A temperaturas muy bajas, sólo los niveles más bajos están ocupados, como se muestra en la fig. 10-3; pero a temperaturas altas (correspondientes a valores menores de E_i/kT para una energía dada) aumenta la población relativa de los niveles altos (como también se muestra en la fig. 10-3) a expensas de la población de los niveles bajos. Notar que la relación entre los números de ocupación de dos niveles de energía E_i y E_j es

$$\frac{n_j}{n_i} = \frac{g_j}{g_i} e^{-(E_j - E_i)/kT} = \frac{g_j}{g_i} e^{-\Delta E/kT}, \quad (10.27)$$

donde ΔE es la diferencia de energía entre los dos niveles. Luego, n_i y n_j sólo son comparables si ΔE es mucho menor que kT .

EJEMPLO 10.4. Dadas las temperaturas 100 K, 300 K (temperatura ambiente) y 1000 K, determinar para cada una el cociente de los números de ocupación de los niveles correspondientes a ΔE igual a: (a) 10^{-4} eV, que es del orden del espaciamiento de los niveles rotacionales de muchas moléculas, (b) 5×10^{-3} eV, que corresponde a los niveles vibracionales moleculares, y (c) 3 eV, que es del orden de las excitaciones electrónicas en átomos y moléculas. Suponer $g = 1$.

Solución: Recordando que $k = 8,6178 \times 10^{-5}$ eV K⁻¹, tenemos que $kT = 8,6178 \times 10^{-3} T$ eV y $\Delta E/kT = 1,1603 \times 10^4 E/T$, donde E está expresada en electronvolts. Luego, para los valores indicados de ΔE , los valores de n_j/n_i a las tres temperaturas están dados en la tabla siguiente:

ΔE , eV	100 K	300 K	1000 K
10^{-4}	0,9885	0,9962	0,9988
5×10^{-3}	3×10^{-3}	$1,45 \times 10^{-1}$	$5,60 \times 10^{-1}$
3,00	3×10^{-344}	8×10^{-48}	8×10^{-36}

Por lo tanto, para $\Delta E = 10^{-4}$ eV los dos niveles tienen prácticamente la misma población a todas las temperaturas consideradas. Esto explica, por ejemplo, que a temperatura normal se observe todo el espectro rotacional de absorción de las moléculas, tal como el ilustrado en la fig. 5-35 para el caso de HCl. Para $\Delta E = 5 \times 10^{-3}$ eV, la población ya es apreciable a temperatura ambiente, lo cual significa que muchas moléculas están en estados excitados vibracionales a temperatura ambiente. En cambio, para $\Delta E = 3$ eV el cociente n_j/n_i es tan pequeño que resulta razonable considerar que el nivel superior está esencialmente vacío a todas las temperaturas consideradas. Por lo tanto, la mayoría de los átomos y las moléculas están (a temperatura ambiente) en su estado electrónico fundamental. Sólo a temperaturas extremadamente altas, como en las estrellas muy calientes, los átomos y moléculas están en estados excitados electrónicos en cantidad apreciable. Las excitaciones electrónicas son producidas en el laboratorio mediante colisiones inelásticas de las moléculas del gas con electrones rápidos en una descarga eléctrica.

EJEMPLO 10.5. Considerar un sistema de moléculas polares colocado en un campo eléctrico uniforme, pero que está aislado de cualquier otro agente externo. Calcular la polarización del sistema en función de la temperatura.

Solución: Designemos con p_0 el momento dipolar eléctrico de cada molécula. Supondremos que el único efecto del campo eléctrico aplicado es modificar la orientación al azar de las moléculas sin perturbar sus movimientos traslacional e interno (rotacional o vibracional), y que las moléculas son libres de seguir la acción orientadora del campo eléctrico. La energía de una molécula cuyo momento dipolar forma un ángulo θ con el campo eléctrico \mathcal{E} es $E(\theta) = -p_0\mathcal{E} \cos \theta$. Como el ángulo puede tener cualquier valor entre 0 y π , las energías de los estados disponibles no son discretas sino que varían en forma continua. Luego, en vez de buscar el número de moléculas orientadas según un ángulo θ , debemos hallar el número de moléculas con sus dipolos orientados dentro del ángulo sólido $d\Omega$, definido por los dos conos coaxia-

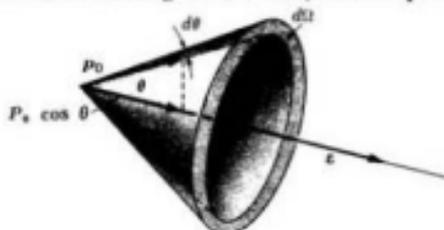


Figura 10-4

les de aberturas θ y $\theta + d\theta$ (fig. 10-4). El valor de este ángulo sólido es $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$; empleando la ec. (10.22) con $d\Omega$ en vez de g_i e integrando en vez de sumando, podemos escribir la función de partición en la forma

$$Z = \int_0^\pi e^{p_0\mathcal{E} \cos \theta / kT} 2\pi \sin \theta d\theta = 4\pi (kT/p_0\mathcal{E}) \sinh(p_0\mathcal{E}/kT).$$

La orientación de las moléculas debe ser simétrica respecto a la dirección del campo eléctrico por lo que el valor medio del momento dipolar es paralelo a \mathcal{E} . Luego, para hallar \bar{p} debemos calcular $\overline{p_0 \cos \theta}$, ya que $p_0 \cos \theta$ es la componente del momento dipolar eléctrico en la dirección de \mathcal{E} . Usando la ec. (10.26) con una integral en vez de una suma, tenemos

$$\bar{p} = \frac{1}{Z} \int_0^\pi (p_0 \cos \theta) e^{p_0\mathcal{E} \cos \theta / kT} 2\pi \sin \theta d\theta = p_0 \left(\coth \frac{p_0\mathcal{E}}{kT} - \frac{kT}{p_0\mathcal{E}} \right),$$

resultado que se denomina *fórmula de Langevin*. Cuando \mathcal{E} es muy grande o cuando la temperatura es muy baja (o sea para $p_0\mathcal{E} \gg kT$), tenemos que $\coth(p_0\mathcal{E}/kT) \rightarrow 1$, y $kT/p_0\mathcal{E} \rightarrow 0$, por lo que $\bar{p} = p_0$. Esto significa que cuando el campo eléctrico es muy intenso o la temperatura es cercana al cero absoluto, prácticamente todas las moléculas están orientadas paralelamente al campo. Para \mathcal{E} pequeño o T grande (esto es, $p_0\mathcal{E}/kT \ll 1$), usamos el desarrollo asintótico

$$\coth x = 1/x + x/3 + \dots,$$

y se obtiene

$$\bar{p} = p_0^2 \mathcal{E} / 3kT.$$

Si hay n moléculas por unidad de volumen, la polarización de la sustancia es

$$\mathcal{P} = n\bar{p} = (np_0^2/3kT)\mathcal{E}.$$

Esta expresión se usa en el cálculo de la permitividad eléctrica de un medio compuesto de moléculas polares. La magnetización de una sustancia colocada en un campo magnético externo se obtiene, cuando las moléculas poseen un momento magnético permanente, por medio de un cálculo similar. Este es el efecto de orientación que da lugar al paramagnetismo. Empero, en este caso surge una complicación. El momento magnético está relacionado con el momentum angular, cuya orientación está restringida como se indicó en la sección 3.4. Debemos entonces sumar en vez de integrar. El resultado final es, sin embargo, muy similar al obtenido para un momento dipolar eléctrico (ver el problema 10.8).

10.5 Equilibrio térmico

Consideremos un sistema compuesto por dos grupos diferentes de partículas. Diremos que cada grupo de partículas constituye un *subsistema*. Por ejemplo, los dos subsistemas pueden ser un líquido con un sólido sumergido en él, una mezcla de dos gases o de dos líquidos, o dos sólidos en contacto. Por medio de choques y otras interacciones, puede haber un intercambio de energía entre las partículas que componen los dos subsistemas, pero se supone que la energía del sistema total es fija. Llamemos N y N' al número total de partículas de cada subsistema, y E_1, E_2, E_3, \dots y E'_1, E'_2, E'_3, \dots a los correspondientes niveles de energía disponibles para las partículas. Si no hay reacciones entre las partículas de los dos subsistemas, el número total de partículas de cada subsistema es constante; la energía total del sistema también lo es, pero la energía de cada subsistema no se conserva porque pueden intercambiar energía debido a sus interacciones. Por lo tanto, en una partición determinada, los números de ocupación n_1, n_2, n_3, \dots y n'_1, n'_2, n'_3, \dots de cada subsistema deben satisfacer las condiciones siguientes:

$$N = \sum_i n_i = \text{const}, \quad (10.28)$$

$$N' = \sum_j n'_j = \text{const}, \quad (10.29)$$

$$U = \sum_i n_i E_i + \sum_j n'_j E'_j = \text{const}. \quad (10.30)$$

La probabilidad de una partición o distribución determinada está dada por el producto de dos expresiones análogas a la ec. (10.8), una para cada subsistema:

$$P = \left[\frac{g_1^{n_1} g_2^{n_2} g_3^{n_3} \dots}{n_1! n_2! n_3! \dots} \right] \times \left[\frac{g'_1{}^{n'_1} g'_2{}^{n'_2} g'_3{}^{n'_3} \dots}{n'_1! n'_2! n'_3! \dots} \right]. \quad (10.31)$$

Podemos obtener el equilibrio del sistema compuesto imponiendo que P sea un máximo compatible con las ecs. (10.28), (10.29) y (10.30). El resultado es (ver el ejemplo 10.6):

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-\beta E_i}, \quad n'_j = \frac{N'}{Z'} g'_j e^{-\beta E'_j}, \quad (10.32)$$

donde Z y Z' son las respectivas funciones de partición de los dos subsistemas. Notemos que para que los dos sistemas estén en equilibrio deben tener el mismo parámetro β . En vista de nuestra definición (10.21) de temperatura, concluimos que

dos sistemas diferentes interactuantes de partículas en equilibrio estadístico deben tener la misma temperatura.

Este enunciado se denomina *ley cero de la termodinámica*. Se dice, entonces, que los subsistemas están en *equilibrio térmico*. Reemplazando β por $1/kT$, podemos escribir en lugar de la ec. (10.32):

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-E_i/kT}, \quad n'_j = \frac{N'}{Z'} g'_j e^{-E'_j/kT},$$

donde T es la temperatura absoluta común de los dos subsistemas. Las expresiones de n_i y n'_j muestran que en el equilibrio térmico cada subsistema alcanza la misma partición más probable que alcanzaría si estuviera aislado a la misma temperatura T . Estas relaciones expresan entonces que una vez alcanzado el equilibrio térmico, la energía de cada subsistema permanece constante en sentido estadístico. Esto significa que aunque los dos subsistemas pueden intercambiar energía a nivel microscópico, dicho intercambio tiene lugar en ambas direcciones, no habiendo en promedio un intercambio neto en ninguna de las dos. Se sigue entonces que cuando se pone en contacto dos cuerpos a temperaturas diferentes, intercambiarán energía hasta que ambos alcancen el equilibrio térmico a la misma temperatura. En ese momento cesa de haber intercambio neto de energía.

La ley cero es la base para medir la temperatura de un cuerpo; esta temperatura se determina colocándolo en contacto con un cuerpo patrón calibrado adecuadamente (termómetro). La ley cero también está de acuerdo con nuestro concepto común de temperatura, según el cual si se pone en contacto un cuerpo "frio" con uno "caliente", el frío se calienta y el caliente se enfria hasta que "se siente" que ambos están a la misma temperatura. En consecuencia, aunque el concepto de temperatura se introdujo originalmente para corresponder a una experiencia sensorial que por supuesto está asociada con una condición física del cuerpo humano, ahora se lo puede definir en forma precisa por medio de la relación estadística (10.21).

EJEMPLO 10.6. Obtención de las relaciones (10.32).

Solución: Cuando P está dada por la ec. (10.31) tenemos, siguiendo el mismo procedimiento utilizado para obtener la ec. (10.16):

$$-d(\ln P) = \sum_i \ln n_i/g_i \, dn_i + \sum'_j \ln n'_j/g'_j \, dn'_j = 0. \quad (10.33)$$

Las condiciones restrictivas (10.28), (10.29) y (10.30) dan en este caso

$$\sum_i dn_i = 0, \quad (10.34)$$

$$\sum'_j dn'_j = 0, \quad (10.35)$$

$$\sum_i E_i \, dn_i + \sum'_j E'_j \, dn'_j = 0. \quad (10.36)$$

Multiplicando la ec. (10.34) por α , la ec. (10.35) por α' y la ec. (10.36) por β y sumándolas a la ec. (10.33), obtenemos

$$\sum_i (\ln n_i/g_i + \alpha + \beta E_i) dn_i + \sum_j (\ln n'_j/g'_j + \alpha' + \beta E'_j) dn'_j = 0,$$

que requiere (por la misma razón que en el caso de una sola clase de partículas) que

$$\ln n_i/g_i + \alpha + \beta E_i = 0, \quad \ln n'_j/g'_j + \alpha' + \beta E'_j = 0.$$

Obtenemos entonces

$$n_i = g_i e^{-\alpha - \beta E_i}, \quad n'_j = g'_j e^{-\alpha' - \beta E'_j}$$

o sea, utilizando las relaciones (10.28) y (10.29) para eliminar $e^{-\alpha}$ y $e^{-\alpha'}$,

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-\beta E_i}, \quad n'_j = \frac{N'}{Z'} g'_j e^{-\beta E'_j}.$$

Nótese que usamos α y α' porque el número de partículas de cada subsistema se conserva separadamente, pero utilizamos un solo β porque es la energía total la que se conserva.

10.6 Aplicación al gas ideal

Nuestro próximo paso es determinar si hay algún sistema de partículas en la naturaleza cuyo comportamiento colectivo se parezca a las predicciones de la ley de distribución de Maxwell-Boltzmann. Hasta ahora hemos presentado esta distribución solamente como una construcción teórica más o menos razonable. La experiencia confirma que se puede describir la mayoría de los gases con la estadística de Maxwell-Boltzmann en un intervalo de temperaturas muy amplio. Para simplificar, consideraremos ahora los gases ideales compuestos de moléculas monoatómicas. De este modo no tenemos que incluir ni la energía potencial de las fuerzas intermoleculares ni la energía asociada con los movimientos internos de rotación o de vibración de las moléculas; por lo tanto, toda la energía molecular es traslacional; esto es, la E_i que aparece en la ec. (10.11) es

$$E_i = \frac{1}{2m} p_i^2 = \frac{1}{2} m v_i^2. \quad (10.37)$$

Notemos empero, que, como se explicó en el ejemplo 2.4, se puede considerar que la energía cinética de un gas ideal que ocupa un volumen suficientemente grande no está cuantizada sino que tiene un espectro continuo. Debemos entonces volver a escribir la ec. (10.22), reemplazando la suma por una integral, en la forma

$$Z = \int_0^\infty e^{-E/kT} g(E) dE, \quad (10.38)$$

donde $g(E) dE$ reemplaza a g_i y representa el número de estados moleculares en el intervalo de energía entre E y $E + dE$. Este número proviene de las diferentes orientaciones que puede tener el momentum \mathbf{p} para una energía determinada. Conforme a la ec. (12.19), tenemos que

$$g(E) dE = \frac{4\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3} E^{1/2} dE, \quad (10.39)$$

donde V es el volumen ocupado por el gas. Por lo tanto:

$$Z = \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\infty} E^{1/2} e^{-E/kT} dE.$$

Se encuentra que la integral del segundo miembro (ver el apéndice IV) tiene el valor $\frac{1}{2} \sqrt{\pi(kT)^3}$. Luego,

$$Z = \frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3}, \quad (10.40)$$

que da la función de partición de un gas ideal monoatómico en función de la temperatura y el volumen del gas. Tomando el logaritmo natural de ambos miembros tenemos

$$\ln Z = C + \frac{3}{2} \ln kT,$$

donde C incluye todas las demás cantidades constantes. Sustituyendo este valor de $\ln Z$ en la ec. (10.25), obtenemos para la energía media de las moléculas:

$$\bar{E} = \frac{3}{2} kT. \quad (10.41)$$

Por lo tanto, la energía cinética media de las moléculas de un gas ideal en equilibrio estadístico es proporcional a la temperatura absoluta del gas. Históricamente, la ec. (10.41) fue introducida en el siglo XIX mucho antes del desarrollo de la mecánica estadística, en conexión con la teoría cinética de los gases. Fue esta relación la que sugirió la identificación de β con $1/kT$. La energía total de un gas compuesto de N moléculas es entonces

$$U = N\bar{E} = \frac{3}{2} NT.$$

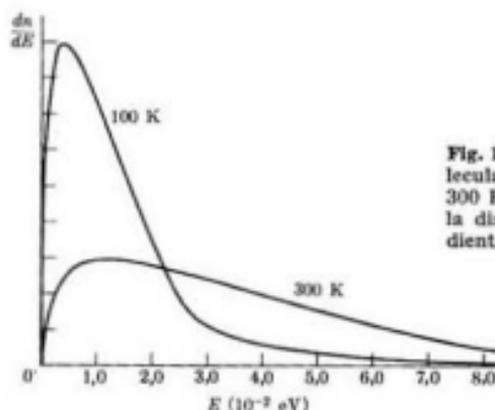


Fig. 10-6. Distribución de energía molecular a dos temperaturas (100 K y 300 K). Notar que según la ec. (10.44) la distribución de energía es independiente de la masa molecular.

Concluimos, por lo tanto, que la energía interna de un gas ideal monoatómico sólo depende de su temperatura. Esto es un resultado directo de nuestras definiciones de gas ideal y de temperatura. No es de esperar que las mismas relaciones valgan para los gases reales y otras sustancias, ya que parte de su energía interna es potencial y depende, por tanto, de la separación de las moléculas, esto es, del volumen de la sustancia.

Si n es el número de moles* del gas, y $N_A = 6,0225 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ es la constante de Avogadro, o sea el número de moléculas en un mol de la sustancia, que es el mismo para todas las sustancias, tenemos $n = N/N_A$. Luego,

$$U = \frac{3}{2}nkN_A T = \frac{3}{2}nRT, \quad (10.42)$$

donde

$$\begin{aligned} R &= kN_A = 8,3143 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \\ &= 1,9860 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \\ &= 5,1894 \times 10^{19} \text{ eV mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \end{aligned} \quad (10.43)$$

se denomina constante de los gases.

La expresión (10.23) de la distribución de moléculas en las diferentes energías es, reemplazando g_l por $g(E) dE$ dada por la ec. (10.39):

$$dn = \frac{N}{Z} e^{-E/kT} g(E) dE = \frac{N}{Z} \frac{4\pi V(2m^3)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} e^{-E/kT} dE,$$

donde dn es el número de moléculas con energía entre E y $E + dE$. Introduciendo el valor de Z dado por la ec. (10.40), tenemos

$$\frac{dn}{dE} = \frac{2\pi N}{(\pi kT)^{3/2}} E^{1/2} e^{-E/kT}, \quad (10.44)$$

que es la fórmula de Maxwell para la distribución de energía de las moléculas de un gas ideal. Esta fórmula fue una de las primeras aplicaciones de los métodos estadísticos en física. James C. Maxwell la obtuvo por primera vez hacia 1857 empleando un razonamiento diferente. En la fig. 10-5 está representada la ec. (10.44) para dos temperaturas diferentes.

A veces se necesita la distribución de velocidades en vez de la distribución de energía. Teniendo en cuenta que $E = \frac{1}{2}mv^2$, se tiene

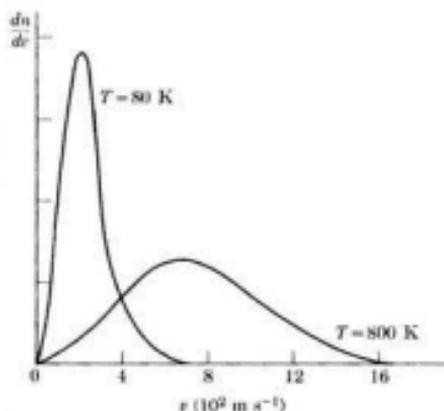
$$\frac{dn}{dv} = \frac{dn}{dE} \frac{dE}{dv} = mv \frac{dn}{dE}.$$

Sustituyendo $E = \frac{1}{2}mv^2$ en la ec. (10.44) tenemos

$$\frac{dn}{dv} = 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 e^{-mv^2/2kT}, \quad (10.45)$$

* Recordar que un mol es la cantidad de sustancia en gramos igual a su masa molecular en una.

Fig. 10-6. Distribución de velocidad molecular en el oxígeno a dos temperaturas (80 K y 800 K). Notar que según la ec. (10.45) la distribución de velocidad depende de la masa molecular.



que es la fórmula de Maxwell para la distribución de velocidades de las moléculas en un gas ideal. La misma da el número de moléculas que se mueven con una velocidad entre v y $v + dv$ independientemente de la dirección de movimiento. La distribución de velocidades en el oxígeno a dos temperaturas diferentes está representada en la fig. 10-6.

Una prueba crucial de la aplicabilidad de la estadística de Maxwell-Boltzmann a los gases ideales es ver si las distribuciones de energía y de velocidad ilustradas en las figs. 10-5 y 10-6 ocurren realmente. Una manera indirecta de hacer esto es analizar cómo la velocidad de las reacciones químicas depende de la temperatura. Supongamos que una reacción determinada ocurre sólo si las moléculas que chocan tienen cierta energía igual o mayor que E_a . La velocidad de reacción a una temperatura dada depende entonces del número de moléculas que tienen una energía igual o mayor que E_a . En la fig. 10-7 este número está dado para dos temperaturas diferentes por cada una de las áreas sombreadas debajo de las curvas. Notemos que hay más moléculas disponibles a altas temperaturas que a bajas. Con un cálculo apropiado podemos predecir el efecto de estas moléculas adicionales y compararlo con los datos experimentales. Estos muestran un acuerdo excelente con la ec. (10.45), lo cual confirma la aplicabilidad de la estadística de Maxwell-Boltzmann a los gases.

Una verificación más directa consistiría en "contar" realmente el número de moléculas que hay en cada intervalo de velocidad o de energía. Con este fin han sido utilizados varios dispositivos experimentales. La fig. 10-8 ilustra un método que usa un selector de velocidades o "cortadora". Dos discos D y D' , cada uno con una muesca, rotan con velocidad angular ω . Las muescas están desplazadas un ángulo θ . De las moléculas de gas que escapan de un horno a cierta temperatura (proceso denominado *efusión*) sólo pasan por las dos muescas e inciden en el detector aquellas cuya velocidad es $v = \omega/\theta$. En realidad, como ambas muescas tienen un ancho finito, las moléculas transmitidas tienen velocidades

dentro de cierto intervalo Δv en el entorno del valor dado. Se puede cambiar la velocidad de las moléculas recibidas en el detector variando ω o θ . Haciendo varias observaciones para diversas velocidades v se obtiene las distribuciones de velocidades y de energía. Los resultados experimentales confirman la predicción de la estadística de Maxwell-Boltzmann expresada por las ecs. (10.44) y (10.45).

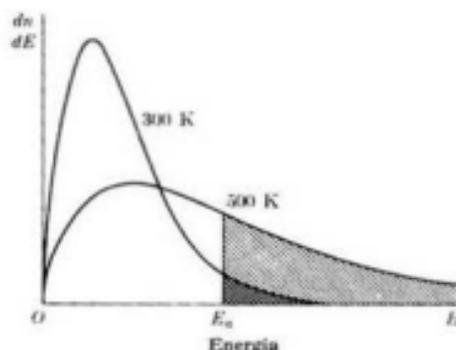


Fig. 10-7. Número de moléculas con energía mayor que E_0 a dos temperaturas diferentes. En ambos casos el número está indicado por el área sombreada.

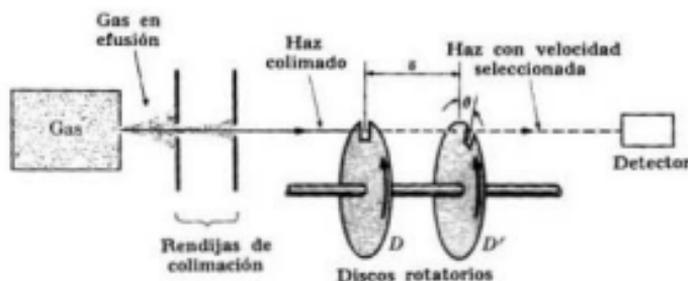


Fig. 10-8. Selector de velocidades moleculares.

Como se explicó en la sección 8.6, es posible disminuir la velocidad de los neutrones producidos en un proceso de la fisión dentro de un reactor nuclear por medio de un moderador apropiado hasta que están en equilibrio térmico a la temperatura del reactor. Los neutrones de un reactor nuclear térmico se comportan entonces como un gas ideal y su distribución de energía concuerda con la ley de Maxwell, ec. (10.44); esto es, los neutrones térmicos siguen la estadística de Maxwell-Boltzmann. Este hecho es esencial para el diseño de reactores nucleares. Si los neutrones que emergen a través de una ventana en el reactor pasan por un selector similar al de la fig. 10-8, se obtiene un haz monoenergético de neutrones.

EJEMPLO 10.7. Obtener la energía y la velocidad más probables de las moléculas de un gas a una temperatura determinada; estos valores corresponden respectivamente a los máximos de dn/dE y dn/dv .

Solución: Para obtener el máximo de dn/dE , ec. (10.44), a una temperatura determinada, sólo es necesario calcular el máximo de $y = E^{1/2}e^{-E/kT}$. Luego:

$$\frac{dy}{dE} = \left(\frac{1}{2}E^{-1/2} - \frac{E^{1/2}}{kT} \right) e^{-E/kT} = 0,$$

de donde obtenemos $E_{mp} = \frac{1}{2}kT$. Así que a temperatura ambiente, para la cual $kT \sim 0,025$ eV, tenemos $E_{mp} \sim 0,012$ eV.

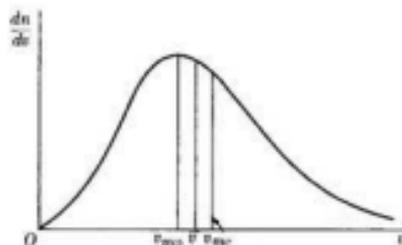
Análogamente, para obtener el máximo de dn/dv , ec. (10.45), basta hallar el máximo de $y = v^2 e^{-mv^2/2kT}$. Luego:

$$\frac{dy}{dv} = \left(2v - \frac{mv^2}{kT} \right) e^{-mv^2/2kT} = 0.$$

Por lo tanto, $v_{mp} = \sqrt{2kT/m}$. Esta velocidad corresponde a una energía $E = kT$ que es diferente de E_{mp} . ¿Puede el estudiante explicar la razón de esta diferencia?

EJEMPLO 10.8. Velocidad media (\bar{v}) y velocidad media cuadrática (v_{mc}) de las moléculas de un gas ideal.

Fig. 10-9. Velocidades más probable, media y media cuadrática de un gas.



Solución: Se define la velocidad media por

$$\bar{v} = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} v \, dn = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} v \frac{dn}{dv} \, dv.$$

Introduciendo el valor de dn/dv dado por la ec. (10.45), tenemos

$$\bar{v} = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} v^2 e^{-mv^2/2kT} \, dv.$$

Primero transformamos la integral poniendo $u = v^2$, de modo que $du = 2v \, dv$, resultando

$$\frac{1}{2} \int_0^{\infty} u e^{-(m/2kT)u} \, du.$$

Luego integramos por partes, resultando $\frac{1}{2}(kT/m)^2$, de donde

$$\bar{v} = \left(\frac{8kT}{\pi m} \right)^{1/2} = \left(\frac{2,55kT}{m} \right)^{1/2} = 1,13v_{mp}.$$

Definimos la velocidad media cuadrática por $v_{mc}^2 = \bar{v}^2$ y obtenemos el promedio de v^2 de la expresión

$$\bar{v}^2 = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} v^2 dn.$$

Teniendo en cuenta que $v^2 = 2E/m$, también podemos escribir

$$\bar{v}^2 = \frac{2}{m} \frac{1}{N} \int_0^{\infty} E dn = \frac{2}{m} \bar{E},$$

ya que la energía media está definida por $\bar{E} = (1/N) \int E dn$. Pero para un gas ideal se tiene, conforme a la ec. (10.44), $\bar{E} = \frac{3}{2}kT$. Luego

$$v_{mc}^2 = \bar{v}^2 = \frac{2}{m} \left(\frac{3}{2}kT\right) = \frac{3kT}{m}$$

y

$$v_{mc} = \left(\frac{3kT}{m}\right)^{1/2} = 1,25v_{mp}.$$

Las tres velocidades v_{mp} , \bar{v} y v_{mc} están indicadas en la fig. (10.9).

Bibliografía

1. "What is Probability?", R. Carnap, *Sci. Am.*, septiembre de 1953, pág. 128
2. "Thermodynamics, Statistics, and Information", L. Brillouin, *Am. J. Phys.* **29**, 318 (1961)
3. "The Work of T. H. Berlin in Statistical Mechanics", M. Kac, *Physics Today*, octubre de 1964, pág. 40
4. "New Approach to Statistical Mechanics", R. Weinstock, *Am. J. Phys.* **35**, 710 (1967)
5. *Statistical Mechanics*, G. Rushbrooke. Oxford University Press, London, 1949
6. *Statistical Physics*, G. Wannier. John Wiley, New York, 1966, caps. 1, 2 y 3
7. *Fundamentals of Statistical Thermodynamics*, R. Sonntag y G. Van Wylen. (John Wiley, New York, 1966) caps. 1 y 2
8. *Statistical Thermodynamics*, E. Schrödinger. (Cambridge University Press, Cambridge, 1964) caps. 1 y 2
9. *The Feynman Lectures on Physics*, vol. I, R. Feynman, R. Leighton y M. Sands. (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1963) cap. 40

Problemas

10.1 Refiriéndose al ejemplo 10.2, calcular el cambio que se produce en la probabilidad de distribución si se transfieren dos partículas al nivel intermedio, una del nivel superior y otra del inferior.

10.2 Calcular el cociente P_2/P_1 en el ejemplo 10.2 usando la ec. (10.13) para $\ln P$.

10.3 Determinar la temperatura del sistema del ejemplo 10.3 cuando está en equilibrio estadístico. Suponer $\epsilon = 0,02$ eV.

10.4 Hallar el cociente entre el número de electrones con espín paralelo y el de aquéllos con espín antiparalelo a un campo magnético en función de la temperatura. Calcular el valor numérico para temperaturas T iguales a 10 k, 300 k y 1000 k. [Sugerencia: Recordar que el momento magnético de espín de los electrones está dado por $M_S = -2\mu_B S$, ec. (3.33).]

10.5 (a) Demostrar que la función de partición de un gas de electrones colocado en un campo magnético \mathcal{H} es $Z = 2 \cosh(\mu_B \mathcal{H}/kT)$, donde μ_B es el magnetón de Bohr. (b) Calcular la energía magnética de un gas de electrones en dicho campo magnético; demostrar luego que el paramagnetismo de los electrones libres corresponde a una magnetización $M = n\mu_B \tanh(\mu_B \mathcal{H}/kT)$, donde n es el número de electrones por unidad de volumen. (c) Hallar los valores límites de la función de partición y de la magnetización para temperaturas muy bajas y muy altas.

10.6 Las energías posibles de una partícula en un sistema de partículas son $0, \epsilon, 2\epsilon, \dots, n\epsilon, \dots$ (a) Demostrar que la función de partición del sistema es (con $g_i = 1$)

$$Z = (1 - e^{-\epsilon/kT})^{-1}.$$

(b) Calcular la energía media de las partículas. (c) Hallar el valor límite de la energía media cuando ϵ es mucho menor que kT .

10.7 Considerando un sistema de partículas cuyas energías son $0, \epsilon, 2\epsilon, \dots, n\epsilon, \dots$ representar gráficamente los nú-

meros de ocupación para (a) 100 K, (b) 300 K, (c) 800 K, si el valor de la energía ϵ es (a) 10^{-3} eV, (b) 0,1 eV. [Sugerencia: Usar el resultado del problema 10.6 para la función de partición.]

10.8 El momento magnético de un átomo (o molécula) que tiene un momento angular J está dado, según la ec. (3.40), por $M = -\mu_B g J$. (a) Obtener una expresión que dé el número de átomos que tienen un valor de J_x igual a $m\hbar$, cuando se los coloca en un campo magnético \mathcal{H} paralelo al eje Z . (b) Demostrar que la función de partición del sistema de átomos es

$$Z = \frac{\sinh[(j + \frac{1}{2})\mu_B g \mathcal{H}/kT]}{\sinh[\frac{1}{2}\mu_B g \mathcal{H}/kT]}$$

(c) Demostrar que para $j = \frac{1}{2}$ la función de partición se reduce a la obtenida para los electrones en el problema 10.5.

10.9 Obtener la energía magnética media de los átomos considerados en el problema precedente. Utilizando este resultado verificar que el momento magnético medio de los átomos en dirección paralela al campo magnético es

$$\bar{M} = \mu_B g [(j + \frac{1}{2}) \coth(j + \frac{1}{2})x - \frac{1}{2} \coth \frac{1}{2}x]$$

donde $x = \mu_B g \mathcal{H}/kT$. Hallar los valores límites de \bar{M} para x muy pequeño y muy grande con respecto a 1.

10.10 ¿A qué temperatura el número de moléculas de un gas ideal por unidad de intervalo de energía alrededor de 2×10^{-3} eV, es la cuarta parte del número correspondiente a 1×10^{-3} eV?

10.11 Hallar el cociente entre los números de moléculas de un gas por unidad de intervalo de energía alrededor de las energías 0,2 eV y 0,02 eV para las siguientes temperaturas: (a) 100 K, (b) 300 K, (c) 600 K.

10.12 Calcular el número suficiente de puntos como para construir gráficos de la función de distribución de la energía molecular de un gas ideal para un kilomol a 200 K y 600 K.

10.13 (a) Calcular las velocidades media cuadrática, media y más probable

de las moléculas de oxígeno a una temperatura de 300 K. (b) Calcular la velocidad más probable de las moléculas de oxígeno a las siguientes temperaturas: 100 K, 300 K, 1000 K y 10.000 K.

10.14 (a) Calcular la energía cinética traslacional media de una molécula de un gas ideal a 300 K. (b) Calcular la velocidad media cuadrática cuando el gas es hidrógeno (H_2), oxígeno (O_2) y vapor de mercurio (Hg). Comparar los resultados correspondientes al hidrógeno y el oxígeno con la velocidad del sonido en los mismos.

10.15 Calcular la velocidad media cuadrática de (a) los átomos de helio a 2 K, (b) las moléculas de nitrógeno a 27°C, (c) los átomos de mercurio a 100°C.

10.16 ¿A qué temperatura la energía cinética traslacional media de una molécula de un gas ideal es igual a la de un ion monocargado de la misma masa que ha sido acelerado a partir del reposo en una diferencia de potencial de (a) 1 volt, (b) 1000 volts, (c) 1.000.000 volts? Despreciar los efectos relativistas.

10.17 Determinar el número relativo de moléculas de un gas ideal con velocidades entre \bar{v} y $1.2\bar{v}$ utilizando la ec. (10.45) con (a) $v = \bar{v}$ y $dv = 0,2\bar{v}$; (b) $v = 1,1\bar{v}$ y $dv = 0,2\bar{v}$.

10.18 Demostrar que el número de moléculas de un gas ideal que se mueven con velocidad cuyas componentes están en los intervalos v_x y $v_x + dv_x$, v_y y $v_y + dv_y$, v_z y $v_z + dv_z$ está dado por

$$dn = N(m/2\pi kT)^{-3/2} e^{-m\mathbf{v}^2/2kT} dv_x dv_y dv_z.$$

[Notar que para este caso, debemos reemplazar en la ec. (10.45) el elemento de integración $4\pi v^2 dv$ por $dv_x dv_y dv_z$. Justificar este reemplazo.]

10.19 Demostrar que el número de moléculas de un gas ideal que tiene la componente X de su velocidad entre v_x y $v_x + dv_x$ independientemente de los valores de las componentes v_y y v_z , es

$$dn = N(m/2\pi kT)^{-1/2} e^{-mv_x^2/2kT} dv_x.$$

[Sugerencia: Integrar la expresión obtenida en el problema 10.18 respecto a v_y y v_z . En ambos casos los límites de integración deben ser $-\infty$ y $+\infty$.]

10.20 Utilizar el resultado del problema 10.19 para obtener el valor medio de (a) v_x , (b) v_x^2 , (c) $|v_x|$ en el caso de un gas ideal.

10.21 Se define la *función error* $\text{erf}(x)$ mediante

$$\text{erf}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt.$$

En la tabla 10-1 damos algunos valores de esta función. Usando el resultado del problema 10.19, demostrar que el número de moléculas de un gas ideal que tienen la componente X de su velocidad entre 0 y v_x es

$$N(0, v_x) = N \text{erf}(x),$$

donde $x = (m/2kT)^{1/2} v_x$, y que el número de moléculas que tienen la componente X de su velocidad mayor que v_x es

$$N(v_x, \infty) = N \left[\frac{1}{2} - \text{erf}(x) \right].$$

10.22 ¿Qué fracción de las moléculas de un gas ideal tienen componentes X de su velocidad mayores que $2v_{mp}$?

TABLA 10-1 Valores de $\text{erf}(x)^*$

x	$\text{erf}(x)$	x	$\text{erf}(x)$
0	0	1,6	0,4882
0,2	0,1113	1,8	0,4946
0,4	0,2142	2,0	0,4977
0,6	0,3019	2,2	0,4991
0,8	0,3711	2,4	0,4996
1,0	0,4214	2,6	0,4999
1,2	0,4552	2,8	0,5000
1,4	0,4762	3,0	0,5000

* Para valores mayores de x , $\text{erf}(x)$ tiene valores constantes, hasta cuatro cifras significativas, de 0,5000.

10.23 Calcular la fracción de moléculas de un gas ideal cuya velocidad tiene una componente X (a) menor que v_{mp} , (b) mayor que v_{mp} , (c) menor que \bar{v} , (d) mayor que \bar{v} . [Sugerencia: Ver el problema 10.21.]

10.24 ¿Qué fracción de las moléculas de un gas ideal tienen la componente X

de su velocidad entre $-v_{mp}$ y $+v_{mp}$?

10.25 Demostrar que el número de moléculas de un gas ideal que tienen una velocidad entre cero y v está dada por

$$N(0, v) = 2N \left[\operatorname{erf}(x) - \frac{1}{\sqrt{\pi}} x e^{-x^2} \right],$$

donde $x^2 = mv^2/kT$. Hallar también el número de moléculas que tienen una velocidad mayor que v . [Sugerencia: Usar la ec. (10.45) e integrar por partes.]

10.26 Utilizando el resultado del problema 10.25 calcular la fracción de moléculas de un gas ideal que tienen una velocidad (a) menor que v_{mp} , (b) mayor que v_{mp} , (c) menor que v , (d) mayor que v .

10.27 ¿Qué porcentaje de moléculas de oxígeno tienen velocidades mayores que 10^3 m s^{-1} a una temperatura de (a) 100 K, (b) 1000 K, (c) 10.000 K? Ilustrar gráficamente usando la función de distribución.

10.28 Utilizando el resultado del problema 10.25, hallar el porcentaje de moléculas de un gas ideal que tienen una energía mayor que 0,5 eV si la temperatura es (a) 300 K, (b) 600 K, (c) 1000 K. [Sugerencia: Notar que en la expresión obtenida en el problema 10.25, $x = (E/kT)^{1/2}$.]

10.29 Demostrar que el número de moléculas de un gas con velocidad entre v y $v + dv$ que chocan por unidad de tiempo y de área contra las paredes de un recipiente, es $\int v (dn/dv) dv$. Demostrar luego que el número total de moléculas que chocan contra la pared por unidad de tiempo es $\int n v$, donde n se refiere en ambos casos al número de moléculas por unidad de volumen. Notar que las moléculas con velocidad v que chocan por unidad de área y por unidad de tiempo y que se mueven en una dirección que forma un ángulo θ con la normal a la pared son las contenidas dentro de un volumen cilíndrico de altura $v \cos \theta$. Además, la fracción de moléculas que se mueve dentro del ángulo sólido $d\Omega$ es

$$\frac{1}{4\pi} \frac{dn}{dv} dv d\Omega \quad \text{y} \quad d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta.$$

10.30 Supongamos que se hace un pequeño agujero en la pared de un horno que contiene un gas a la temperatura T . Demostrar que el número de moléculas con velocidad entre v y $v + dv$ que escapan por unidad de área y por unidad de tiempo es

$$dn = \pi N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^3 e^{-mv^2/2kT} dv,$$

donde N es el número total de moléculas por unidad de volumen que hay en el horno. Hallar el número total de moléculas que escapan por unidad de área y por unidad de tiempo. Demostrar también que en el haz que sale, las velocidades moleculares media y media cuadrática son

$$\bar{v} = \frac{3}{8} \sqrt{\frac{2\pi kT}{m}}$$

y

$$v_{mc} = \sqrt{4kT/m}.$$

Comparar con los valores correspondientes para las moléculas que hay en el horno y hacer una evaluación crítica de los resultados del experimento ilustrado en la fig. 10-8. [Sugerencia: Usar los resultados del problema precedente.]

10.31 (a) Demostrar que la longitud de onda de de Broglie de una partícula de masa m que se mueve con la velocidad más probable de una distribución maxwelliana a la temperatura T es $\lambda = h/\sqrt{2mkT}$, donde k es la constante de Boltzmann. (b) Calcular la longitud de onda de de Broglie de un neutrón que se mueve con la velocidad más probable de una distribución maxwelliana a 20° C. Comparar estas longitudes de onda con la separación interatómica en un sólido.

10.32 ¿Qué fracción de (a) átomos de H y (b) moléculas de HCl estarían en el primer estado excitado a 300 K?

10.33 Supongamos que se puede expresar la energía de las moléculas de un sistema como suma de dos términos, es decir:

$$E_i = E_{i, \text{tr}} + E_{i, \text{int}}$$

donde $E_{i, \text{tr}}$ se refiere al movimiento traslacional y $E_{i, \text{int}}$ se refiere a los grados de libertad internos (tal como los de

rotación y vibración de la molécula) o a la interacción con un campo eléctrico o magnético. Si $g_{t, tr}$ y $g_{t, int}$ son las probabilidades intrínsecas correspondientes a ambos tipos de movimiento, tenemos que $g_t = g_{t, tr} g_{t, int}$. Demostrar: (a) que $Z = Z_{tr} Z_{int}$, donde Z es la función de partición total y Z_{tr} y Z_{int} son las funciones de partición traslacional e interna; (b) que $U = U_{tr} + U_{int}$.

11

TERMODINAMICA

- 11.1 Introducción*
- 11.2 Conservación de la energía de un sistema de partículas*
 - 11.3 Sistemas de muchas partículas; trabajo*
 - 11.4 Sistemas de muchas partículas; calor*
 - 11.5 Primera ley de la termodinámica*
 - 11.6 Representación gráfica de procesos*
 - 11.7 Procesos especiales*
- 11.8 Entropía y la segunda ley de la termodinámica*
 - 11.9 Entropía y calor*
- 11.10 Estudio de procesos mediante la entropía*

11.1 *Introducción*

En el capítulo 10 hemos desarrollado un modelo estadístico para tratar sistemas con muchos componentes idénticos, al cual denominamos estadística de Maxwell-Boltzmann. Ilustramos este modelo aplicándolo a un ejemplo especial de partículas que no interactúan entre sí: el gas ideal. Pero las partículas que encontramos en la naturaleza están siempre en interacción mutua. Luego, nuestro próximo paso es discutir los agregados de partículas en interacción, tales como los átomos y las moléculas en los estados sólido, líquido o vapor, o aun los nucleones en un núcleo. Por ser igualmente importante, queremos establecer una correlación entre las predicciones de la mecánica estadística y las cantidades que medimos u observamos experimentalmente a nivel macroscópico. Además, en lugar de considerar un sistema aislado en equilibrio estadístico, queremos saber qué sucede cuando un sistema interactúa con el medio que lo rodea, ya que ésta es la situación más común en la naturaleza.

Existe un puente entre la mecánica estadística y las propiedades macroscópicas de la materia: la rama de la física llamada *termodinámica*. Históricamente, la ciencia de la termodinámica se desarrolló durante los siglos XVIII y XIX (antes de la introducción de los métodos estadísticos) cuando las nociones de calor y temperatura no estaban todavía bien comprendidas. Evolucionó hasta constituir una teoría formal y elegante cuyos resultados y métodos llegaron a ser extremadamente importantes para fines de ingeniería, debido a que más o menos por la misma época se desarrollaron las máquinas a vapor. La termodinámica culminó al final del siglo XIX con los trabajos de Carnot, Joule, Kelvin y otros, precisamente en la época en que los métodos estadísticos comenzaban a ser introducidos a través de los trabajos de Mayer, Boltzmann, Gibbs y otros. El desarrollo de los métodos estadísticos y sus aplicaciones a los procesos químicos han hecho necesaria una revisión de la formulación de la termodinámica. Sin embargo, desde el punto de vista de las aplicaciones, no se han introducido cambios esenciales.

En este capítulo estudiaremos la termodinámica desde el punto de vista de la mecánica estadística.

11.2 *Conservación de la energía de un sistema de partículas*

Consideremos un sistema de partículas sujeto tanto a sus interacciones mutuas como a fuerzas externas. El sistema puede, por ejemplo, estar constituido por una sola molécula de hidrógeno (en cuyo caso las partículas que lo constituyen son dos protones y dos electrones) o un gas que contiene un gran número de moléculas de hidrógeno. En el último caso las partículas que componen el sistema son las moléculas; por lo tanto, en primera aproximación se puede ignorar la estructura interna de los componentes. Si $E_{p_{ij}}$ es la energía potencial debida a la interacción de las partículas i y j , la *energía potencial interna* del sistema es

$$E_p \text{ int} = \sum_{\substack{\text{Todos} \\ \text{los pares}}} E_{p_{ij}} = E_{p_{12}} + E_{p_{13}} + \dots + E_{p_{23}} + \dots \quad (11.1)$$

Análogamente, llamemos *energía cinética interna* a la suma de la energía cinética de las partículas referida al centro de masa del sistema,* es decir,

$$E_{k \text{ int}} = \sum_{\text{Todas las partículas}} \frac{1}{2} m_i v_i^2 = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 + \frac{1}{2} m_3 v_3^2 + \dots \quad (11.2)$$

Obsérvese que la ec. (11.2), correspondiente a la energía cinética, tiene un término para *cada* partícula, mientras que la ec. (11.1), correspondiente a la energía potencial, tiene un término para *cada par* de partículas, porque se refiere a interacciones de dos partículas solamente. Entonces la *energía interna total* U del sistema es

$$U = E_{k \text{ int}} + E_{p \text{ int}}. \quad (11.3)$$

En un gas ideal, no existen fuerzas intermoleculares y la energía interna es precisamente la energía cinética. En algunos casos la energía potencial se puede expresar como una suma de términos, uno para cada partícula, como se indicó en la sección 10.2. Esto es posible cuando en primera aproximación, la energía potencial entre partículas se puede reemplazar por la energía potencial media de cada partícula. Si sobre las partículas del sistema no actúan fuerzas externas (esto es, si el sistema está aislado de acciones externas), U no cambia. En otras palabras:

La energía interna de un sistema de partículas aislado permanece constante.

Cuando sobre las partículas del sistema actúan fuerzas externas, la energía interna del mismo en general no permanece constante. Supongamos que inicialmente el sistema se encuentre en un estado con una energía interna U_0 . Las fuerzas externas modifican continuamente este estado, por lo cual después de un cierto tiempo la energía interna es U . Designemos W_{ext} al trabajo total realizado durante el mismo tiempo por las fuerzas externas que actúan sobre las partículas. Este trabajo W_{ext} es una suma de muchos términos, uno para cada partícula sobre la cual actúan fuerzas externas. Luego, la conservación de la energía requiere que

$$U - U_0 = W_{\text{ext}}, \quad (11.4)$$

la cual establece que

el cambio en la energía interna de un sistema de partículas es igual al trabajo hecho sobre el sistema por las fuerzas externas.

Puede ocurrir que aun cuando haya fuerzas externas actuando sobre el sistema, el trabajo total realizado por estas fuerzas sea nulo: $W_{\text{ext}} = 0$. En tal caso no hay cambio en la energía interna, esto es: $U = U_0$. Si se realiza trabajo sobre el sistema (W_{ext} positivo), su energía interna aumenta ($U > U_0$), pero si el trabajo es realizado por el sistema (W_{ext} negativo), su energía interna disminuye ($U < U_0$).

* Para expresar la energía cinética, tenemos que definir un sistema de referencia, ya que de otro modo su valor es indeterminado.

11.3 Sistemas de muchas partículas; trabajo

Los sistemas que consideramos en la termodinámica están compuestos de un número muy grande de partículas, por lo que calcular el trabajo externo como suma de los trabajos individuales realizados sobre cada partícula presenta dificultades serias. Por esa razón se ha encontrado conveniente expresar W_{ext} como una suma de dos términos, ambos de naturaleza estadística. Uno de ellos se sigue denominando trabajo y al otro se le llama *calor*. Muy a menudo, especialmente cuando estamos tratando con máquinas térmicas, es preferible calcular el trabajo externo hecho por el sistema, designado por W_{sist} , en lugar del trabajo externo hecho sobre el sistema, W_{ext} . Como ambos trabajos corresponden al mismo desplazamiento, pero a fuerzas iguales y opuestas, los mismos son de igual valor absoluto pero de signos opuestos; es decir, $W_{\text{sist}} = -W_{\text{ext}}$. En adelante escribiremos W en lugar de W_{sist} para el trabajo hecho por el sistema.

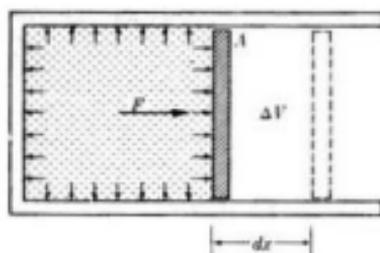


Fig. 11-1. Trabajo realizado durante la expansión de un gas.

Consideremos, por ejemplo, un gas en el interior de un cilindro (fig. 11-1). El gas puede intercambiar energía y momentum con el medio exterior a través de choques e interacciones de sus moléculas con las moléculas de las paredes del cilindro. El intercambio de momentum está representado por una fuerza que ejerce cada molécula en el punto de colisión con la pared. Estas fuerzas individuales varían de punto a punto, pero como hay un gran número de colisiones repartidas en un área extensa, el efecto total se puede representar por una fuerza media actuando sobre toda el área. La presión p del gas se define como la fuerza promedio por unidad de área. Por lo tanto, si A es el área,

$$p = F/A \quad \text{ó} \quad F = pA. \quad (11.5)$$

Si una de las paredes del recipiente es móvil, tal como el pistón de la fig. 11-1, la fuerza ejercida por el gas producirá un desplazamiento dx de la pared. El intercambio de energía del sistema con el mundo exterior se puede expresar como el trabajo hecho por esta fuerza durante el desplazamiento. Por consiguiente

$$dW = F dx = pA dx = p dV, \quad (11.6)$$

donde $dV = A dx$ es la variación del volumen del gas. Entonces, si el volumen cambia desde V_0 hasta V , el trabajo externo hecho por el gas durante la expan-

sión será

$$W = \int_{V_0}^V p \, dV. \quad (11.7)$$

Para calcular esta integral debemos conocer la relación entre p y V . Esta relación se ha estudiado detalladamente para los gases y otras sustancias, y será considerada más adelante.

Evidentemente, el trabajo hecho sobre el gas es

$$W_{\text{ext}} = - \int_{V_0}^V p \, dV. \quad (11.8)$$

Recordemos ahora algunas de las unidades más comunes en las cuales se mide la presión. Observar primero que la presión se debe expresar como el cociente entre una unidad de fuerza y una unidad de área. Luego, en el sistema MKSC la presión se expresa en *newtons por metro cuadrado*: N m^{-2} . Otras unidades frecuentemente usadas son *dinas por centímetro cuadrado* (din cm^{-2}) y *kilogramos-fuerza por centímetro cuadrado* (kgf cm^{-2}). Otra unidad útil, usada principalmente para expresar la presión de los gases, es la *atmósfera*, que se abrevia atm y se define de acuerdo a las equivalencias

$$1 \text{ atm} = 1,013 \times 10^5 \text{ N m}^{-2} = 1,033 \text{ kgf cm}^{-2}.$$

Una atmósfera es aproximadamente la presión normal que la atmósfera terrestre ejerce sobre los cuerpos al nivel del mar.

EJEMPLO 11.1. Un gas que ocupa un volumen de $0,30 \text{ m}^3$ ejerce una presión de $2 \times 10^5 \text{ N m}^{-2}$. El gas se expande hasta un volumen de $0,45 \text{ m}^3$, permaneciendo constante la presión. Hallar el trabajo realizado por el gas.

Solución: Usamos la ec. (11.7) y, si la presión permanece constante,

$$W = \int_{V_0}^{V_1} p \, dV = p \int_{V_0}^{V_1} dV = p(V_1 - V_0). \quad (11.9)$$

Resultado que es completamente general y se aplica a cualquier sistema cuyo volumen cambie a presión constante. Insertando los valores numéricos, obtenemos

$$W = 3 \times 10^4 \text{ J}.$$

EJEMPLO 11.2. Un gas se expande de tal modo que se cumple la relación $pV = C$ (constante). Esta relación requiere que la temperatura del gas permanezca constante y constituye la *ley de Boyle*. Hallar el trabajo realizado cuando el volumen se expande desde V_1 hasta V_2 .

Solución: Usando la ec. (11.8), obtenemos

$$W = \int_{V_1}^{V_2} p \, dV = \int_{V_1}^{V_2} C \frac{dV}{V} = \ln \frac{V_2}{V_1}. \quad (11.10)$$

En consecuencia, el trabajo realizado depende del cociente V_2/V_1 entre los volúmenes (este cociente se denomina *relación de expansión*). En el diseño de máquinas de combustión interna, la relación de compresión (o expansión) es uno de los factores que determinan la potencia de la máquina.

11.4 Sistemas de muchas partículas; calor

Es importante tener presente que la ec. (11.7) expresa un *promedio macroscópico* que combina los intercambios de energía individuales entre las moléculas del gas y las del pistón. Pero, ¿cómo calcular el intercambio de energía que ocurre debido a la interacción de las moléculas del gas con las paredes, que permanecen fijas? En este caso no se puede aplicar el método que hemos usado para calcular el trabajo W realizado por el pistón. Aunque todavía podemos definir una fuerza media ejercida sobre la pared, no podemos definir un desplazamiento medio de la pared. A cada interacción individual entre las moléculas del gas y la pared, corresponde una fuerza pequeña y se produce un desplazamiento pequeño de las moléculas de la pared. Si pudiéramos calcular cada una de estas cantidades infinitesimales de trabajo y sumarlas, podríamos tener el trabajo externo correspondiente realizado por el sistema. Empero, esta técnica es obviamente casi imposible debido al gran número de factores que intervienen. Por lo tanto, definiremos un nuevo concepto macroscópico o estadístico llamado *calor* para dar cuenta de dicho trabajo.

El valor medio del trabajo externo o energía intercambiada entre un sistema y el medio que lo rodea, debida a los intercambios individuales de energía que pueden ocurrir como consecuencia de los choques entre las moléculas del sistema y las del medio se denomina *calor*, Q , siempre que no se pueda expresar como fuerza multiplicada por distancia. Por consiguiente, Q está compuesto de muchos trabajos individuales pequeñísimos, tales que no se pueden expresar colectivamente como una fuerza multiplicada por una distancia media.

De acuerdo a la convención de signos adoptada, el calor Q se considera positivo cuando corresponde a un trabajo externo neto realizado *sobre* el sistema y negativo cuando es equivalente a un trabajo externo neto realizado *por* el sistema. En el primer caso decimos que el sistema absorbe calor y en el segundo que el sistema cede calor.

Como el calor corresponde a un trabajo, se puede expresar en joules. Sin embargo, el calor se expresa a menudo en una unidad llamada *caloría*, que se abrevia cal y cuya definición, adoptada en 1948, es 1 caloría = 4,1840 J. La caloría se introdujo como una unidad de medida del calor cuando la naturaleza de éste no estaba comprendida claramente. Pero la caloría es simplemente otra unidad para medir trabajo y energía, y no sólo calor.

En este punto debemos advertir al estudiante que no considere el calor como una forma nueva o diferente de energía. Es un nombre dado a una forma especial de trabajo o transferencia de energía en la cual participa un número muy grande de partículas. Cuando aún no estaban claros los conceptos de interacción y de estructura atómica de la materia, los físicos clasificaban la energía en dos grupos: energía *mecánica*, correspondiente a las energías cinética y potencial gravitacional, y energía *no mecánica* que comprendía el calor, la energía química, la energía eléctrica, la radiación, etc. Esta división no tiene ya justificación. Hoy en día los físicos distinguen solamente la energía cinética y la potencial, teniendo esta última expresiones diferentes según la naturaleza de la interacción física correspondiente; el calor y la radiación expresan dos mecanismos de transferencia

de energía. Energía química es un término macroscópico usado para describir la energía asociada con interacciones eléctricas entre átomos y moléculas, y que se pone de manifiesto en los procesos químicos, es decir, en los reagrupamientos de átomos en las moléculas.

11.5 Primera ley de la termodinámica

En las dos secciones previas hemos visto que cuando estamos tratando sistemas compuestos de un gran número de partículas, debemos expresar el *trabajo externo total* como la suma de dos partes: $Q + W_{\text{ext}}$ donde W_{ext} expresa el trabajo externo cuando se puede calcular multiplicando una fuerza media por una distancia, como se discutió en la sección 11.3, y Q representa el trabajo externo cuando se debe expresar como calor, como se estudió en la sección 11.4. La expresión (11.4) del principio de conservación de la energía se puede escribir entonces en la forma

$$U - U_0 = Q + W_{\text{ext}}, \quad (11.11)$$

la cual se puede expresar en palabras como sigue:

El cambio en la energía interna de un sistema es igual al calor absorbido más el trabajo externo hecho sobre el sistema.

En la fig. 11-2(a) se puede ver un esquema representativo de la ec. (11.11): el sistema absorbe una cantidad de calor y se hace un trabajo W_{ext} sobre el sistema. La suma $Q + W_{\text{ext}}$ se almacena como energía interna $U - U_0$ del sistema. Algunas veces, especialmente en aplicaciones de ingeniería, no escribimos el trabajo externo W_{ext} hecho sobre el sistema, sino el trabajo externo W hecho por el sistema; como ya se ha explicado, éste corresponde al trabajo hecho sobre el sistema con signo cambiado. Haciendo $W_{\text{ext}} = -W$, tenemos, en lugar de la ec. (11.11),

$$U - U_0 = Q - W. \quad (11.12)$$

En la fig. 11-2(b) se ilustra la ec. (11.12): el sistema absorbe una cantidad de calor Q y hay un trabajo W hecho por el sistema; la diferencia $Q - W$ se almacena como energía interna $U - U_0$ del sistema.

Los enunciados relacionados con las ecs. (11.11) y (11.12) constituyen lo que se denomina *primera ley de la termodinámica*; es simplemente la ley de conser-

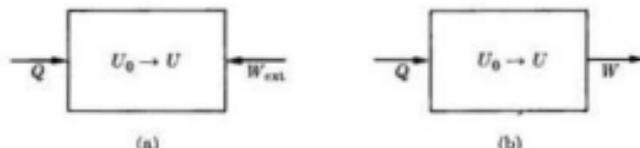


Fig. 11-2. Relación entre calor, trabajo y energía interna.

vación de la energía aplicada a sistemas que tienen un gran número de partículas, con el trabajo externo convenientemente dividido en dos términos estadísticos, uno que se sigue denominando trabajo y el otro llamado calor.

Podemos observar que debido a su definición, la *energía interna de un sistema depende solamente del estado del sistema*, esté o no en equilibrio, y no depende de cómo el sistema llegó a ese estado. Sin embargo, sólo cuando el sistema está en un estado de equilibrio y las partículas que componen el sistema obedecen la estadística de Maxwell-Boltzmann se puede usar la ec. (10.24) para calcular U , es decir

$$U = kNT^2 \frac{d}{dT} (\ln Z).$$

Por otra parte, el trabajo W y el calor Q son cantidades directamente relacionadas con los procesos que el sistema experimenta cuando pasa del estado inicial al final. Es decir: cuando el sistema pasa de un estado inicial a otro final determinados, hay varios procesos posibles. En todos los procesos por los cuales se alcanza los mismos estados, los valores U_0 y U de la energía inicial y final son los mismos, de suerte que la diferencia $\Delta U = U - U_0$ es independiente del proceso. En otras palabras, la división del intercambio de energía en calor y trabajo depende del proceso.

Un caso especialmente interesante ocurre cuando el sistema experimenta una *transformación cíclica* o simplemente un *ciclo*. Esto significa que al final del proceso el sistema regresa a su estado inicial. Por consiguiente

$$U = U_0 \quad \text{y} \quad \Delta U = U - U_0 = 0,$$

la cual, sustituida en la ec. (11.12), da

$$Q = W. \tag{11.13}$$

Luego, el calor absorbido en un ciclo por el sistema se transforma totalmente en trabajo realizado por el mismo. Esto es, precisamente, el principio de funcionamiento de las máquinas térmicas, cuyo propósito es absorber calor y realizar trabajo de un modo cíclico.

Si la transformación que experimenta un sistema es infinitesimal, debemos reemplazar $\Delta U = U - U_0$ por dU , Q por dQ y W por dW en la ec. (11.12). Con ello se obtiene la siguiente expresión:

$$dU = dQ - dW. \tag{11.14}$$

Esta es la forma diferencial de la primera ley de la termodinámica. Observar que estamos escribiendo dQ y dW y no dQ y dW para los cambios infinitesimales de Q y W . Esto es con el fin de enfatizar que, aunque U es una función de estado y su variación depende sólo de los estados inicial y final, Q y W son cantidades asociadas solamente con los procesos. En lenguaje matemático decimos que dU es un diferencial exacto de las variables usadas para definir el estado del sistema, mientras que dQ y dW no lo son.

Cuando el trabajo dW se debe a una expansión o cambio de volumen, tenemos según la ec. (11.8) que $dW = p dV$, y la ec. (11.14) se convierte en

$$dU = dQ - p dV. \quad (11.15)$$

Pero advertimos al estudiante que puede haber otras clases de trabajo además del debido a la expansión, los cuales dan diferentes expresiones en función de las variables del problema. Por ejemplo, si una carga dq se mueve debido a una fem V_E , debemos escribir $dW = V_E dq$.

11.6 Representación gráfica de procesos

Para describir macroscópicamente el estado de equilibrio de un sistema de átomos o moléculas, usamos algunos parámetros macroscópicos o estadísticos. De éstos los más usados son la presión, la temperatura y el volumen. Se podría usar también la energía interna total, pero esto no es común. Si el sistema está compuesto de dos o más sustancias independientes, a fin de especificar el estado del sistema, debemos conocer también sus proporciones relativas.

Las variables macroscópicas o estadísticas que describen el estado de un sistema en equilibrio no son todas independientes; están relacionadas entre sí por

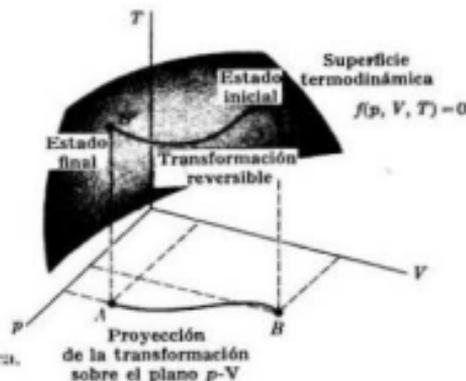


Fig. 11-3. Superficie termodinámica.

una expresión matemática llamada *ecuación de estado*, que es característica de la estructura física del sistema. Por ejemplo, la ecuación de estado de un gas ideal (ver sección 12.2) es

$$pV = nRT, \quad (11.16)$$

donde n es el número de moles y R es la constante de los gases definida en la ec. (10.43). Uno de los problemas más importantes de la física estadística es deducir la ecuación de estado para diferentes clases de sustancias, ya que un

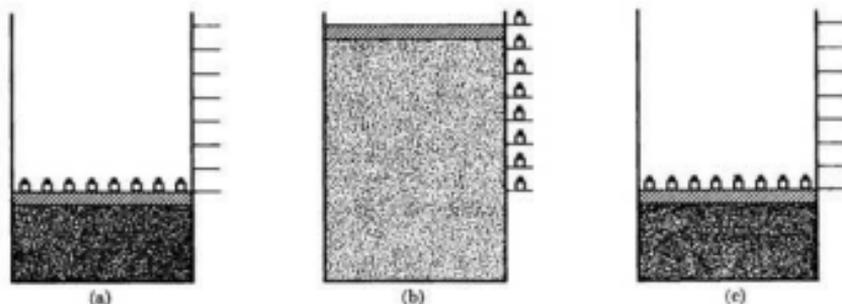


Fig. 11-4. Expansión y compresión reversible de un gas.

conocimiento de esta ecuación es de inmensa importancia tanto teórica como práctica.

Designemos la ecuación de estado de una sustancia homogénea por $f(p, V, T) = 0$. Podemos representar esta función por una superficie llamada *superficie termodinámica*, usando una terna de ejes designados p , V y T (fig. 11-3). Un estado particular de equilibrio de un sistema, caracterizado por ciertos valores de p , V , y T está representado por un punto S sobre la superficie. Si el sistema experimenta un proceso o transformación, eventualmente pasa a otro estado de equilibrio S' , también sobre la superficie. En general, los estados intermedios ocupados en la transformación $S \rightarrow S'$ no son estados de equilibrio y no pueden estar representados por puntos sobre la superficie

$$f(p, V, T) = 0.$$

Sin embargo, si la transformación ocurre muy lentamente (desenvolviéndose por etapas infinitesimales, de modo que en cada etapa el sistema se aparte sólo levemente de su estado de equilibrio), podemos suponer razonablemente que en cada instante el sistema está en equilibrio estadístico. Una transformación de esta clase se dice *reversible*.

Podemos usar la expansión de un gas para ilustrar una transformación reversible. Supongámonos que el pistón de la fig. 11-4 se mantiene en posición mediante gran número de pesas todas muy pequeñas, como se indica en la fig. 11-4(a). En el equilibrio, la presión del gas encerrado es igual a la presión debida a las pesas más la presión atmosférica. Si quitamos una de las pesas, deslizándola a un lado sobre la plataforma, la presión externa disminuye en una pequeña cantidad y el equilibrio del gas se perturba ligeramente. El gas experimenta entonces una pequeña expansión hasta que el equilibrio se restaura (rápidamente). Cuando se repite el proceso un número de veces, el gas eventualmente se expande hasta el volumen que se muestra en (b) y las pesas, que previamente estaban sobre el pistón, están almacenadas como se indica. Puesto que el proceso ha ocurrido muy lentamente, suponemos que el gas ha permanecido continuamente en equilibrio estadístico y que la expansión ha sido reversible. Para que el gas vuelva

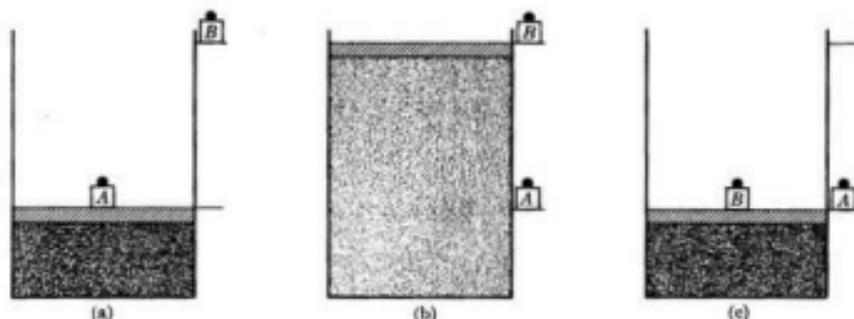


Fig. 11-5. Expansión y compresión irreversible de un gas.

a su estado inicial, todo lo que tenemos que hacer es colocar de nuevo sobre el pistón, en orden inverso, las mismas pesas que le habíamos quitado. Al final, el gas está en su estado inicial, habiendo completado un ciclo, sin haberse producido cambios en el medio que lo rodea. En otras palabras, *en un ciclo enteramente compuesto de transformaciones reversibles, es posible arreglar las cosas de modo tal que no se produzcan cambios observables ni en el sistema ni en el medio que lo rodea.*

Por otra parte, un proceso irreversible ocurre cuando el sistema se aleja del estado de equilibrio. Durante un proceso tal, las cantidades estadísticas, como presión y temperatura, no están definidas. Eventualmente, al final del proceso, el sistema alcanza de nuevo el equilibrio en un estado diferente caracterizado por una presión y una temperatura determinadas. En general, los procesos irreversibles ocurren con gran rapidez. Usaremos nuevamente la expansión de un gas para ilustrar un proceso irreversible. En la fig. 11-5(a) se encuentra el gas como estaba en la fig. 11-4(a), pero con todas las pesas reunidas en una sola, que designamos con A. Obsérvese que hay además una pesa B en el nivel superior. Si se quita la pesa A, la presión externa disminuye inmediatamente y el gas se expande de un modo rápido, con una gran turbulencia en su movimiento molecular; es decir, que el proceso es irreversible. Durante el proceso las velocidades moleculares no siguen la ley de distribución de Maxwell-Boltzmann. Finalmente el pistón se detiene en una cierta posición y eventualmente se restaura el equilibrio a una temperatura y presión bien definidas, como se indica en la fig. 11-5(b). Para hacer volver el gas a su estado inicial, podemos colocar la pesa B encima del pistón, con lo cual éste baja y hace que sobre el gas se efectúe un proceso que puede o no repetir, inversamente, el anterior. Al final, cuando se restablece el equilibrio una vez más, el gas está de nuevo en su estado inicial, como se ilustra en la fig. 11-5(c); el gas ha completado un ciclo. Empero, ha tenido lugar un cambio en el medio ambiente. La pesa B, que estaba inicialmente en el extremo superior está ahora en el fondo. Luego: *en un ciclo compuesto, parcial o totalmente, de transformaciones irreversibles, el sistema retorna a su estado inicial, pero se produce un cambio finito medible en el medio ambiente.*

Es claro que una transformación reversible se puede representar por una línea sobre la superficie termodinámica $f(p, V, T) = 0$, uniendo el estado inicial S con el final S' , pero un proceso irreversible no puede ser representado de este modo.

Los tres parámetros p , V y T no son independientes, ya que están relacionados por la ecuación de estado $f(p, V, T) = 0$. Por consiguiente, en general, sólo es necesario usar dos coordenadas para representar un proceso determinado. Es frecuente usar, especialmente para los gases, un diagrama p - V . Por ejemplo, en la fig. 11-6 se ha representado en un diagrama p - V , una transformación reversible desde el estado A con presión p_1 y volumen V_1 al estado B con presión p_2 y volumen V_2 . En cada instante, la temperatura se obtiene de la ecuación de estado. Este diagrama es especialmente útil para procesos con gases, porque estos procesos guardan una íntima relación con el trabajo hecho por el gas. Recordando la ec. (11.7), observamos que $p dV$ es el área de una franja de ancho dV

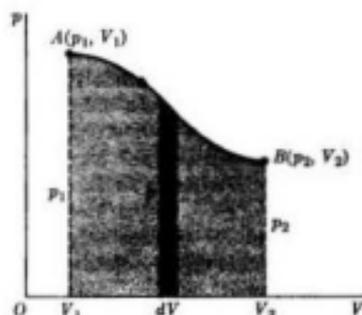


Fig. 11-6. Diagrama de un proceso reversible en el plano p - V . El área sombreada representa el trabajo realizado por el sistema.

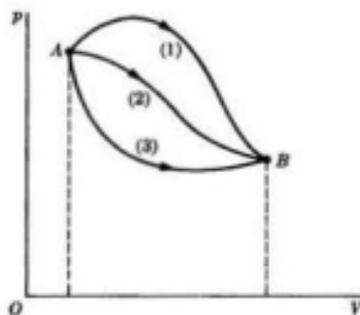


Fig. 11-7. El trabajo realizado al pasar del estado A al B depende del proceso que sigue el sistema.

y altura p , y, en consecuencia, el trabajo hecho por el sistema al pasar desde A hasta B por medio de un cierto proceso está dado por

$$W_{A \rightarrow B} = \int_{V_1}^{V_2} p dV.$$

En la fig. 11-6, el trabajo realizado correspondiente a la transformación es entonces el área bajo la curva AB . Esto nos ayuda a comprender lo dicho en la sección 11.5 acerca de que el trabajo depende del proceso. En la fig. 11-7 se indica varios procesos, correspondientes a las curvas (1), (2) y (3), todos los cuales llevan a un sistema del estado A al B . Como el área bajo cada curva es diferente, el trabajo hecho en cada proceso es también diferente. Los estados inicial y final son los mismos para los tres procesos y, por lo tanto, el cambio $\Delta U = U_A - U_B$ de la energía interna es el mismo en cada caso. Por consiguiente, el calor correspondiente a cada proceso, dado por $Q = \Delta U + W$, será diferente. Si el proceso

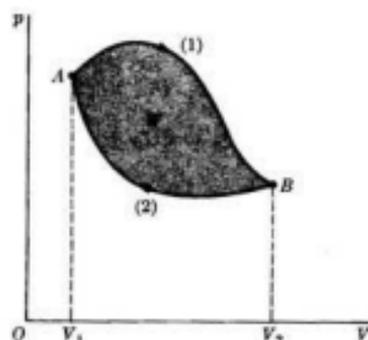
es irreversible no se puede representar en un diagrama p - V y el cálculo del trabajo se hace más difícil.

Consideremos a continuación un ciclo, en el cual el sistema va desde A hasta B (fig. 11-8) a través del proceso (1) y regresa desde B hasta A según el proceso (2). Al pasar de A a B , el sistema realiza un trabajo igual al área bajo la curva (1). Retornando de B a A el sistema realiza un trabajo igual al valor *negativo* del área bajo la curva (2) porque el trabajo se hace sobre el sistema. El trabajo neto W hecho por el sistema durante el ciclo es el área sombreada encerrada por la curva representativa del ciclo; esto es

$$W_{\text{ciclo}} = \oint p \, dV = \text{área bajo (1)} - \text{área bajo (2)} = \text{área encerrada por } A(1)B(2)A.$$

Como se indicó en la sección 11.5, las máquinas térmicas efectúan trabajo a expensas del calor absorbido en un proceso cíclico. Si el proceso es reversible, el trabajo hecho por el ciclo se puede calcular una vez que se conozca el diagrama p - V del ciclo. Este trabajo también es igual al calor neto absorbido por el sistema durante el ciclo.

Fig. 11-8. Ciclo. El trabajo hecho por el sistema que describe el ciclo en sentido horario es igual al área encerrada por el ciclo en un diagrama p - V .



11.7 Procesos especiales

Consideremos algunos procesos especiales, limitándonos al caso en el cual el trabajo se debe a la expansión solamente. Entonces la ec. (11.15) es válida para un proceso infinitesimal. Esto es, $dU = dQ - p \, dV$. Una *transformación isocórica* es aquella en la cual el volumen permanece constante. Luego $dV = 0$ y la ec. (11.15) se reduce a

$$dU_V = dQ_V, \quad V = \text{const}, \quad (11.17)$$

donde el subíndice V se usa para recalcar que esta ecuación es válida sólo a volumen constante. Para una transformación finita obtenemos, integrando la ec. (11.17) (o de la ec. 11.12 con $W = 0$),

$$U - U_0 = Q_V, \quad V = \text{const}.$$

De modo que en una transformación isocórica el cambio de energía interna es igual al calor absorbido, lo cual era de esperar, ya que no hay trabajo externo.

Introduzcamos ahora el concepto *capacidad calorífica a volumen constante* C_V , que es igual al calor absorbido por un mol de la sustancia por unidad de variación de temperatura, a volumen constante. Luego, podemos usar la ec. (11.17) y obtener

$$C_V = \frac{1}{N} \frac{dQ_V}{dT} = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V, \quad (11.18)$$

donde N es el número de moles en el sistema. Para calcular $\partial U/\partial T$, debemos indicar que V es constante, ya que podemos también cambiar la temperatura de otro modo, con lo cual resulta un cambio diferente de la energía interna. En general, la capacidad calorífica C_V no es constante, sino que varía con la temperatura. Es una cantidad macroscópica o estadística importante, ya que es una característica de cada sustancia.

Una *transformación isobárica* es aquella en la cual la presión permanece constante. Entonces $dp = 0$ y podemos sustituir $p dV$ por $d(pV)$. Introduciendo esta relación en la ec. (11.15), tenemos

$$dU = dQ_p - d(pV)_p, \quad p = \text{const.},$$

donde el subíndice p sirve para dar énfasis que la ecuación es válida a presión constante solamente. Por lo tanto

$$dQ_p = dU_p + d(pV)_p = d(U + pV)_p = dH_p, \quad p = \text{const.}, \quad (11.19)$$

donde la cantidad

$$H = U + pV \quad (11.20)$$

se denomina *entalpía* del sistema. Para una transformación finita, tenemos, integrando la ec. (11.19),

$$H - H_0 = Q_p, \quad p = \text{const.} \quad (11.21)$$

Luego, en una transformación isobárica, el cambio de entalpía es igual al calor absorbido. El trabajo hecho en una transformación isobárica es, de acuerdo a la ec. (11.9),

$$W_p = p(V - V_0). \quad (11.22)$$

La *capacidad calorífica a presión constante* C_p se define como el calor absorbido por un mol de la sustancia por unidad de variación de temperatura cuando la presión permanece constante. Por lo tanto

$$C_p = \frac{1}{N} \frac{dQ_p}{dT} = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p. \quad (11.23)$$

Observar que ambas capacidades calóricas C_p y C_v se expresan en $\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$ en el sistema MKSC de unidades. Sin embargo, se usa por costumbre la unidad equivalente $\text{cal } ^\circ\text{C}^{-1} \text{mol}^{-1}$. La capacidad calórica media del agua a presión atmosférica constante es $18,00 \text{ cal } ^\circ\text{C}^{-1} \text{mol}^{-1}$. En un principio la caloría fue definida como la energía necesaria para elevar la temperatura de un gramo de agua ($1/18 \text{ mol}$) en $1 ^\circ\text{C}$ a presión constante.

Una *transformación isotérmica* es aquella en la cual la temperatura no cambia. Para un gas ideal, cuya energía interna $U = \frac{3}{2}NRT$ depende solamente de la temperatura, la energía interna no cambia en un proceso isotérmico; esto es, $dU_T = 0$. Por lo tanto, la ec. (11.14) da

$$dQ_T = dW_T \quad \text{ó} \quad Q_T = W_T, \quad \text{sólo para un gas ideal.}$$

Esta relación, repetimos, es válida *solamente* para transformaciones isotérmicas de un gas ideal.

Una *transformación adiabática* es aquella en la cual el sistema ni absorbe ni da calor. Entonces $dQ_a = 0$ y la ec. (11.14) da

$$dU_a = -dW_a, \quad (11.24)$$

donde el subíndice a significa adiabática. La expresión (11.24) indica que en una transformación adiabática el trabajo se realiza a expensas de la energía interna del sistema. Luego, la temperatura de un gas ideal (y de muchas sustancias) debe disminuir durante una expansión adiabática y aumentar durante una compresión adiabática.

11.8 Entropía y la segunda ley de la termodinámica

En el capítulo 10 obtuvimos la partición de equilibrio de un sistema, la cual depende de las propiedades de los componentes del sistema y corresponde a la distribución más probable de las moléculas del mismo entre los diferentes estados de energía disponibles. En tales condiciones P (o $\ln P$) es máximo. Si el sistema, aunque aislado, *no* está en equilibrio, podemos suponer que está en una partición (o distribución) de menor probabilidad que la máxima o de equilibrio. A su debido tiempo, el sistema evolucionará a causa de las interacciones entre sus componentes o moléculas, hasta alcanzar la partición de máxima probabilidad. En este instante el sistema llega al equilibrio estadístico y no son de esperar aumentos posteriores de P (o de $\ln P$), a menos que se perturbe el sistema por medio de una acción externa.

Para describir esta tendencia natural hacia el equilibrio estadístico por evolución hacia la partición de máxima probabilidad, se inventó el importante concepto de *entropía*, S . La entropía se define por

$$S = k \ln P, \quad (11.25)$$

donde la constante de Boltzmann se introduce por conveniencia en la expresión de futuras relaciones matemáticas. De este modo, *la entropía de un sistema es*

proporcional al logaritmo de la probabilidad P de la partición correspondiente al estado del sistema. Esta definición de entropía se aplica a cualquier partición o estado, sea de equilibrio o no; esto contrasta con la temperatura, que se define sólo para particiones o estados de equilibrio. La definición precedente significa además que la entropía de un sistema es una propiedad del estado del mismo y por consiguiente

cuando un sistema pasa de un estado a otro la variación de su entropía es independiente de los procesos realizados,

ya que este cambio está determinado por las probabilidades de las particiones inicial y final. Es evidente que para estados de equilibrio, la entropía se puede expresar en función de las variables macroscópicas que definen el estado. Una transformación reversible de un sistema, aislado o no, en la cual la entropía del sistema no varía, se denomina transformación *isoentrópica*.

Cuando tenemos dos sistemas con probabilidades P_1 y P_2 , la probabilidad total de la partición resultante de la combinación de los dos sistemas es $P = P_1 P_2$. Luego, $\ln P = \ln P_1 + \ln P_2$ y $S = k \ln P = k \ln P_1 + k \ln P_2 = S_1 + S_2$. Vemos así que la entropía es una cantidad aditiva. Esta es una de las razones por las cuales el concepto de entropía es más fácil de manipular que el de probabilidad.

Teniendo en cuenta nuestra definición de entropía y recordando (sección 10.2) que el estado de equilibrio estadístico corresponde a la partición más probable, concluimos que la entropía de un sistema aislado en equilibrio estadístico tiene el valor máximo compatible con las condiciones físicas del sistema. En consecuencia, los procesos que pueden ocurrir en un sistema aislado después de alcanzar el equilibrio estadístico son sólo aquellos compatibles con el requisito de que la entropía no cambie, esto es, $dS = 0$. Estos procesos son evidentemente reversibles porque el sistema aislado está en equilibrio. Por otra parte, *si un sistema aislado no está en equilibrio, evolucionará naturalmente en la dirección en la cual su entropía aumenta*, ya que éstos son los procesos que conducen el sistema hacia el estado de máxima probabilidad o de equilibrio estadístico. Así, los procesos que es más probable que ocurran en un sistema aislado son aquellos para los cuales

$$dS \geq 0; \quad (11.26)$$

valiendo la desigualdad cuando el sistema no está inicialmente en equilibrio y los procesos son irreversibles.

Podemos entonces enunciar la *segunda ley de la termodinámica* como sigue:

En un sistema aislado los procesos que pueden ocurrir con mayor probabilidad son aquellos en los cuales la entropía aumenta o permanece constante.

Se debe interpretar este enunciado en sentido estadístico, ya que, en un caso particular y debido a las fluctuaciones en la distribución molecular, la entropía de un sistema aislado puede disminuir, pero cuanto mayor es la disminución, menor es la probabilidad de que ocurra. Luego, la variación de entropía durante

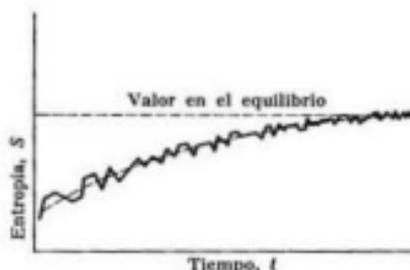


Fig. 11-9. Variación de la entropía de un sistema aislado durante su evolución hacia el equilibrio.

la evolución del sistema hacia el equilibrio se puede representar por la línea irregular de la fig. 11-9.

La segunda ley de la termodinámica expresa el hecho bien conocido de que en un sistema aislado hay una tendencia o dirección bien definida de ocurrencia del proceso, y esta tendencia está determinada por la dirección en que aumenta la entropía.

Los fenómenos de transporte, tales como la difusión molecular y la conducción térmica, son buenos ejemplos de procesos que siempre tienen lugar en una dirección. En ambos se puede verificar que la entropía del sistema aumenta. La difusión tiene lugar en la dirección en la cual la concentración tiende a igualarse, resultando un sistema homogéneo. El proceso inverso, el cambio espontáneo de un sistema homogéneo en uno no homogéneo, que corresponde a una disminución de la entropía, nunca ha sido observado. Por ejemplo, si una gota de tinta se coloca en el punto *A* en el interior de un vaso lleno de agua (fig. 11-10a), las moléculas de tinta se esparcen por toda el agua y después de algún tiempo, ésta está coloreada uniformemente (fig. 11-10c). En este proceso la entropía del sistema ha aumentado. Sin embargo, si en un instante dado fueran invertidas exactamente las velocidades de todas las moléculas, eventualmente toda la tinta retornaría al punto *A*, con lo cual resultaría una disminución de entropía. Pero esto es evidentemente un fenómeno extremadamente improbable, y hasta ahora nunca ha sido observado. Por otra parte, puede haber pequeñas fluctuaciones en la concentración de las moléculas de tinta en diferentes lugares, aún después que se ha alcanzado el equilibrio. Pero estas fluctuaciones no son observables en la mayoría de los casos.

Si un sistema no está aislado, su entropía puede disminuir debido a la interacción con otros sistemas, cuya entropía debe, desde luego, cambiar también. Pero la cantidad total de cambios de entropía de todos los sistemas involucrados en el proceso debe estar de acuerdo con la ec. (11.26), siendo $dS = 0$ para un proceso reversible y $dS > 0$ para uno irreversible.

Por ejemplo, si una combinación de dos sistemas está aislada y la entropía total es $S = S_1 + S_2$, los procesos que ocurran en este sistema combinado deben satisfacer

$$dS = dS_1 + dS_2 \geq 0.$$

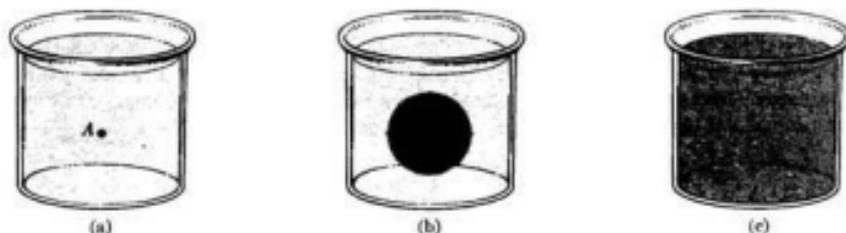


Fig. 11-10. Difusión de una gota de tinta en agua. Proceso irreversible.

La entropía de uno de los componentes puede disminuir durante un proceso, pero el cambio neto de entropía del sistema total debe ser positivo o cero.

La gran importancia de la segunda ley de la termodinámica, tal como se expresa en la ec. (11.26), es que indica aquellos procesos que tienen mayor probabilidad de ocurrir en el universo como un todo. Por consiguiente hay muchos procesos que podrían ocurrir, ya que cumplen con otras leyes tales como la conservación de la energía. Empero, es muy improbable que ocurran, porque violarían la segunda ley, o sea la exigencia (11.26).

EJEMPLO 11.3. Hallar la entropía de un sistema en equilibrio estadístico y que obedece a la estadística de Maxwell-Boltzmann.

Solución: Recordando la expresión (10.13) para $\ln P$ en la estadística de Maxwell-Boltzmann y que $N = \sum_i n_i$, tenemos

$$\begin{aligned} S &= k \ln P = k \left[\sum_i n_i \ln g_i - \sum_i n_i \ln n_i + \sum_i n_i \right] \\ &= -k \sum_i n_i \ln (n_i/g_i) + kN. \end{aligned} \quad (11.27)$$

Pero según la ec. (10.23) tenemos

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-E_i/kT}.$$

Tomando el logaritmo de esta ecuación, obtenemos

$$\ln \frac{n_i}{g_i} = -\frac{E_i}{kT} - \ln \frac{Z}{N}.$$

Luego, la ec. (11.27) se convierte en

$$\begin{aligned} S &= k \left[\sum_i n_i \frac{E_i}{kT} + \sum_i n_i \ln \frac{Z}{N} + \sum_i n_i \right] \\ &= \frac{1}{T} \left(\sum_i n_i E_i \right) + k \left(\sum_i n_i \right) \ln \frac{Z}{N} + kN. \end{aligned}$$

Si recordamos ahora las ecs. (10.1) y (10.2), obtenemos finalmente

$$S = \frac{U}{T} + kN \ln \frac{Z}{N} + kN = \frac{U}{T} + k \ln \frac{Z^N}{N!}. \quad (11.28)$$

EJEMPLO 11.4. Entropía de un gas ideal en equilibrio estadístico.

Solución: Sabemos que para un gas ideal es $U = \frac{3}{2}kNT$, y de la ec. (10.40) obtenemos la función de partición de un gas ideal

$$Z = \frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3}$$

Haciendo la sustitución en la ec. (11.28), tenemos

$$S = \frac{3}{2}kN + kN \ln \frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3 N}$$

Este resultado se conoce como *ecuación de Sackur-Tetrode* y también se puede escribir en la forma

$$S = kN \ln (vT^{3/2}) + S_0, \quad (11.29)$$

donde $v = V/N$ es el volumen por molécula y todas las cantidades que no son variables se han incluido en S_0 , esto es,

$$S_0 = \frac{3}{2}kN + kN \ln \frac{(2\pi mk)^{3/2}}{h^3}$$

EJEMPLO 11.5. Cambio de entropía de un gas ideal durante una expansión libre.

Solución: Cuando un recipiente que contiene un gas se conecta con otro vacío, el gas experimenta una *expansión libre*. Tal proceso es irreversible, y el equilibrio se destruye durante un cierto tiempo hasta que se alcanza el estado final. Esto constituye, también, un ejemplo de la unidireccionalidad de los procesos irreversibles

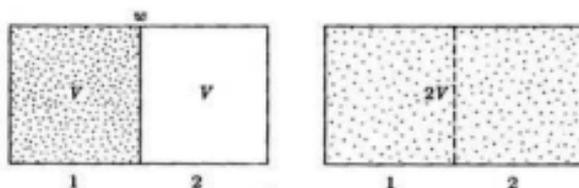


Figura 11-11

porque, como observamos en la fig. 11-11, si el gas está inicialmente en el recipiente 1 y por algún mecanismo (tal como quitar la pared w) se le permite expandirse libremente dentro del recipiente 2, en un breve intervalo de tiempo las moléculas del gas se han distribuido en los dos volúmenes combinados 1 + 2. Empero, nadie esperaría que después de un cierto tiempo y como consecuencia del movimiento molecular, todas las moléculas del gas aparecieran concentradas en el recipiente 1. Este proceso es posible pero *altamente* improbable. Luego, el proceso de expansión libre $V \rightarrow 2V$ ocurre en la naturaleza, pero el proceso inverso no. De acuerdo con la segunda ley de la termodinámica, el primero debe corresponder a un aumento en la entropía del gas y el segundo a una disminución.

Procedamos ahora a calcular el cambio de entropía. La entropía del gas en el primer estado es

$$S_1 = kN \ln (vT^{3/2}) + S_0$$

Una vez que se restablece el equilibrio y el volumen se duplica, la entropía es

$$S_2 = kN \ln(2vT^{3/2}) + S_0.$$

La temperatura no ha variado porque la energía cinética media de las moléculas del gas ideal no ha cambiado. Las moléculas se mueven ahora en un espacio mayor. El cambio de entropía en el proceso es por consiguiente

$$S = S_2 - S_1 = kN \ln 2 > 0. \quad (11.30)$$

De modo que el proceso (irreversible), que es uno de los que ciertamente ocurren en la naturaleza, produce un aumento en la entropía del gas.

Sin embargo, el proceso inverso, en el cual se supone que el gas ocupa inicialmente todo el recipiente (el volumen $2V$), y que después de un cierto tiempo ocupa solamente el volumen V de la izquierda, corresponde a una disminución de entropía, es decir,

$$\Delta S' = S_1 - S_2 = -kN \ln 2 < 0. \quad (11.31)$$

En consecuencia, este proceso, aunque posible, es muy improbable que suceda naturalmente si el gas está aislado. Es cierto que podemos comprimir el gas isotérmicamente reduciendo su volumen de $2V$ a V , con la correspondiente disminución de entropía igual al valor dado por la ec. (11.31). Pero esto requiere una acción externa y entonces es necesario tomar en consideración los cambios externos de entropía para obtener el cambio *total* de entropía del universo.

Es instructivo estudiar la misma situación desde un punto de vista probabilístico. Según la definición (11.25), tenemos que

$$S_2 - S_1 = k \ln P_2 - k \ln P_1 = k \ln \frac{P_2}{P_1}.$$

Comparando esta ecuación con la ec. (11.30), tenemos

$$\ln \frac{P_2}{P_1} = N \ln 2 = \ln 2^N \quad \text{ó} \quad \frac{P_2}{P_1} = 2^N.$$

En general, el número N de moléculas del gas es muy grande y, en consecuencia, P_2 es mucho mayor que P_1 . Esto explica la rapidez con la cual el gas se expande libremente hasta el volumen $2V$. Para el proceso inverso, $2V \rightarrow V$, obtenemos $P_1/P_2 = 2^{-N}$, que es una cantidad extremadamente pequeña porque el número N de moléculas que hay usualmente en cualquier muestra del gas es muy grande. Por consiguiente, es extremadamente improbable (aunque posible) que en un cierto instante todas las moléculas del gas aparezcan, a consecuencia de sus interacciones, concentradas otra vez en la región V de la izquierda. Desde luego que para un pequeño número de moléculas ($N = 1$ ó 2 , por ejemplo), tenemos $P_1/P_2 = \frac{1}{2}$ ó $\frac{1}{4}$, y es posible observar "todas" las moléculas (una o dos) del lado izquierdo en un breve intervalo de tiempo. Pero entonces, los métodos estadísticos son, desde luego, innecesarios, carecen de significado, y podría ser posible calcular los instantes exactos en los cuales la partícula o las dos partículas estarán de un lado o de otro.

11.9 Entropía y calor

Ahora debemos ver cómo está relacionada la entropía con las otras cantidades termodinámicas introducidas previamente. Supongamos que un sistema en equilibrio estadístico experimenta una transformación infinitesimal como consecuencia de su interacción con el medio que lo rodea. El resultado de la interacción

es un cambio de los números de partición n_i y de las de energías E_i de los estados posibles. Como $U = \sum_i n_i E_i$, tenemos que

$$dU = \sum_i E_i dn_i + \sum_i n_i dE_i. \quad (11.32)$$

Esta ecuación es válida sea o no reversible el proceso. Sin embargo, en esta sección nos limitaremos sólo a las transformaciones *reversibles*, de modo que en todo momento el sistema está esencialmente en equilibrio estadístico. El proceso debe ser entonces lo suficientemente lento como para que en cada instante la distribución de las moléculas pueda ajustarse a la correspondiente partición más probable.

Examinando la ec. (11.32), observamos que la primera suma, $\sum_i E_i dn_i$, corresponde a un cambio de energía interna debido a la redistribución de las moléculas entre los niveles de energía disponibles, mientras que la segunda suma, $\sum_i n_i dE_i$, corresponde a un cambio en la energía interna debido a una variación en los niveles de energía. Vamos a examinar este segundo término primero. En la sección 2.5 discutimos los estados estacionarios de una partícula en una caja de potencial unidimensional de ancho a , y encontramos que los niveles de energía están dados por

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}.$$

Si se cambia el ancho a en la cantidad da , los niveles de energía experimentan un cambio correspondiente dE_n , como se indica en la fig. 11-12. Un cambio similar en los niveles de energía sucederá también en una caja de potencial tridimensional de cualquier forma. De modo que, para el caso de la expansión de un gas, el cambio de energía $\sum_i n_i dE_i$ se debe al cambio en las dimensiones o sea en el volumen del recipiente y, por lo tanto, corresponde a lo que hemos llamado trabajo. Recordando la ec. (11.14), $dU = dQ - dW$, concluimos que el trabajo hecho por el sistema es

$$dW = - \sum_i n_i dE_i. \quad (11.33)$$

La ec. (11.33) da el trabajo hecho por el sistema en función del cambio de los niveles de energía, que resulta, por ejemplo, de un cambio de volumen. Esto coloca la definición estadística de trabajo hecho por un sistema sobre bases más firmes de lo que fuera nuestra definición preliminar, dada en la sección 11.3. Introduciendo las ecs. (11.32) y (11.33) en $dU = dQ - dW$, concluimos que debemos escribir

$$dQ = \sum_i E_i dn_i \quad (11.34)$$

para el calor absorbido por el sistema. Esto es, la cantidad estadística que hemos definido como calor es un cambio de energía del sistema debido a la redistribución de las moléculas entre los niveles de energía, resultantes de los intercambios de

energía con el medio; este resultado está esencialmente de acuerdo con nuestra definición previa de calor dada en la sección 11.4.

Cuando el proceso es *reversible*, hay una relación importante entre el cambio de entropía, el calor absorbido y la temperatura absoluta. Esta relación es

$$dS = \frac{dQ}{T}, \quad \text{para procesos reversibles solamente,} \quad (11.35)$$

y es consecuencia directa de las definiciones (11.25) para la entropía y (11.34) para el calor absorbido. En el ejemplo 11.6 se da la prueba. La relación (11.35) indica que la entropía se expresa en J K^{-1} o en cal K^{-1} , lo cual estaba implícito

en nuestra definición (11.25), en vista de las unidades de k .

De la ec. (11.35) tenemos $dQ = T dS$, que puede incorporarse en la ec. (11.14), dando, para un proceso reversible

$$dU = T dS - dW. \quad (11.36)$$

Cuando se hace sólo trabajo por expansión, la relación anterior se convierte en

$$dU = T dS - p dV, \quad (11.37)$$

que expresa el cambio de energía interna durante un proceso reversible en términos de los cambios de entropía y volumen. Insistimos en que la ec. (11.14) es universalmente válida, mientras que las ecs. (11.36) y (11.37) se pueden usar solamente para procesos reversibles.

De la ec. (11.37) resulta, si el volumen es constante, $dU_V = T dS_V$ o sea

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_V = k \frac{\partial}{\partial U} (\ln P)_V.$$

Se puede demostrar que, en general, P es una función creciente de la energía del sistema, es decir, que cuanto mayor es la energía, mayor es la probabilidad P de partición, en tanto el volumen permanezca constante. Por consiguiente,

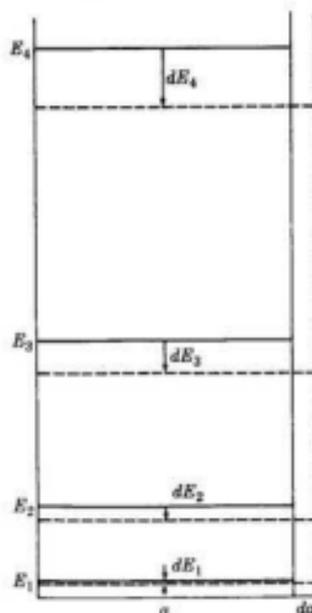


Fig. 11-12. Variación de los niveles de energía cuando se cambia el ancho de la caja.

te, para estos sistemas la temperatura absoluta T es una cantidad positiva. Por esa razón el valor $T = 0$ se llama cero absoluto, ya que en tales casos no puede haber ninguna temperatura inferior a ese valor.

Históricamente, el concepto de entropía se desarrolló en física en orden opuesto al de nuestra discusión. La conveniencia de la relación dQ/T en varios cálculos termodinámicos fue reconocida por Kelvin, Clausius y otros a mediados del siglo XIX. En 1865 Clausius introdujo el nombre de *entropía* para designar una

cantidad cuya *variación* durante el proceso reversible fuera dado por la ec. (11.35); esto es, $dS = dQ/T$. La relación entre entropía, como la definió Clausius, y la probabilidad de una partición, como la dada por la ec. (11.25), $S = k \ln P$, fue establecida primero por Ludwig Boltzmann en 1877. Una vez que se reconoció como más fundamental el enfoque molecular de los procesos termodinámicos, la definición de entropía dada por Boltzmann se hizo más relevante, desde el punto de vista teórico, que la dada por Clausius.

Nota sobre el signo de la temperatura absoluta.

Podemos analizar la variación de la probabilidad P con la energía total U a volumen constante de un modo intuitivo, como sigue: supongamos que el sistema de partículas está encerrado en una caja de volumen fijo. Entonces los posibles niveles de energía también son fijos. En consecuencia, si se quiere aumentar la energía del sistema, se debe llevar algunas partículas de los niveles inferiores a los superiores. Supongamos que para una energía total dada, los números de ocupación de la partición son n_1, n_2, n_3, \dots , donde $n_1 > n_2 > n_3, \dots$ si el sistema está en equilibrio. Para simplificar supongamos también que $g_1 = g_2 = g_3 = \dots = 1$. La probabilidad de esta partición de equilibrio es entonces

$$P = \frac{1}{n_1! n_2! n_3! \dots}$$

Supongamos ahora que se aumenta la energía total U del sistema y que este aumento de energía se realiza llevando una partícula desde el nivel E_1 hasta el nivel E_2 . La probabilidad de la nueva partición es entonces

$$P' = \frac{1}{(n_1 - 1)! n_2! (n_2 + 1)! \dots}$$

por lo tanto

$$\frac{P'}{P} = \frac{n_1}{n_2 + 1}$$

Si n_1 es mayor que n_2 al menos en dos unidades (en general, n_1 es mucho mayor que n_2), tenemos que P' es mayor que P . Por lo tanto, concluimos en general, que a volumen constante P aumenta con la energía U . Desde luego, es posible que en ciertas circunstancias la probabilidad de partición no cambie, o aun que disminuya cuando la energía total aumente. En particular, cuando las partículas de un sistema sólo tienen un número limitado (finito) de estados accesibles, se puede demostrar que P puede ser una función decreciente de la energía para ciertos intervalos de la misma. Esto daría lugar a una temperatura absoluta negativa para esas energías (ver el problema 11.17).

EJEMPLO 11.6. Deducción de la ec. (11.35) utilizando la relación entre el cambio de entropía y el calor absorbido por un sistema en una transformación reversible.

Solución: Supongamos que nuestro sistema sigue la estadística de Maxwell-Boltzmann, lo cual es una hipótesis de validez muy amplia. Entonces la entropía de un estado de equilibrio está dada por la ec. (11.28), esto es,

$$S = \frac{U}{T} + kN \ln \frac{Z}{N} + kN.$$

Para una transformación reversible infinitesimal en la cual el número total de partículas no varía

$$dS = \frac{dU}{T} - \frac{U}{T^2} dT + kN \frac{dZ}{Z}, \quad (11.38)$$

ya que $d(\ln Z) = dZ/Z$. Recordando la definición (10.22) de la función de partición en la estadística de Maxwell-Boltzmann, $Z = \sum_i g_i e^{-E_i/kT}$, tenemos que

$$dZ = - \sum_i \frac{dE_i}{kT} g_i e^{-E_i/kT} + \sum_i \frac{E_i}{kT^2} g_i e^{-E_i/kT} dT.$$

Por lo tanto, usando la ec. (10.25), podemos escribir

$$\begin{aligned} kN \frac{dZ}{Z} &= - \frac{1}{T} \sum_i \frac{N}{Z} g_i e^{-E_i/kT} dE_i + \frac{1}{T^2} \sum_i \frac{N}{Z} g_i e^{-E_i/kT} E_i dT \\ &= - \frac{1}{T} \sum_i n_i dE_i + \frac{1}{T^2} \sum_i n_i E_i dT \\ &= \frac{dW}{T} + \frac{U}{T^2} dT. \end{aligned} \quad (11.39)$$

Para obtener el último resultado hemos usado las ecs. (10.2) y (11.33). Sustituyendo la ec. (11.39) en la ec. (11.38), obtenemos

$$dS = \frac{dU}{T} + \frac{dW}{T} = \frac{dU + dW}{T}.$$

Entonces, como según la ec. (11.14) tenemos $dU + dW = dQ$, obtenemos finalmente

$$dS = \frac{dQ}{T},$$

que es la expresión (11.35), que relaciona el cambio de entropía y el calor absorbido. Debemos tener presente que la ec. (11.35) es válida solamente para un proceso reversible en vista de que en nuestra deducción usamos la función de partición en el equilibrio.

11.10 Estudio de procesos mediante la entropía

Cuando un sistema pasa de un estado 1 a un estado 2 por medio de una transformación reversible, tenemos según la ec. (11.35) que

$$S_2 - S_1 = \int_1^2 \frac{dQ}{T} \quad (11.40)$$

da el cambio de entropía. Cuando el sistema pasa del estado 1 al estado 2 la integral del segundo miembro es independiente de la transformación reversible realizada, porque la entropía depende solamente del estado del sistema. Luego, $\Delta S = S_2 - S_1$ depende sólo de los estados inicial y final, pero no del proceso.

En el caso de una transformación reversible isotérmica, T es constante y la ec. (11.40) se convierte en

$$S_2 - S_1 = \frac{1}{T} \int_1^2 dQ = \frac{Q}{T} \quad \text{ó} \quad Q = T(S_2 - S_1),$$

para procesos isotérmicos solamente. (11.41)

Por lo tanto, el cambio $S_2 - S_1$ es positivo o negativo, según que el calor sea absorbido o cedido por el sistema, puesto que T es positivo. Como para una transformación adiabática reversible $dQ_a = 0$, la ec. (11.40) da

$$S_2 - S_1 = 0 \quad \text{ó} \quad S = \text{const.} \quad (11.42)$$

Luego, las transformaciones adiabáticas reversibles son a entropía constante, y por esa razón son también isoentrópicas. Observar, empero, que una transformación adiabática irreversible no es necesariamente isoentrópica.

De la ec. (11.35) obtenemos también que

$$Q = \int_1^2 T dS \quad (11.43)$$

da el calor absorbido al pasar del estado 1 al estado 2 por medio de una transformación reversible; esta integral depende de la transformación particular. En efecto, la transformación reversible se puede representar por una línea en un diagrama en el cual la ordenada corresponda a la temperatura T y la abscisa a la entropía S , como en la fig. 11-13. Entonces Q es el área bajo la curva entre S_1 y S_2 . Si la transformación es un ciclo tal como $A(1)B(2)A$, fig. (11-14), el cambio de entropía es nulo, $S_2 - S_1 = 0$, ya que retornamos al estado inicial, y

$$\Delta S = \oint \frac{dQ}{T} = 0, \quad \text{ciclo reversible,} \quad (11.44)$$

mientras que el calor neto absorbido por el sistema durante el ciclo es

$$Q = \oint T dS = \text{área encerrada por el ciclo en coordenadas } (T, S) \\ = \text{trabajo hecho por el sistema durante el ciclo.} \quad (11.45)$$

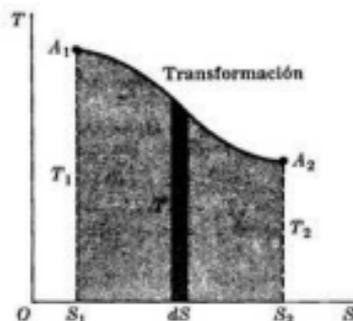


Fig. 11-13. Diagrama de un proceso reversible en el plano T - S . El calor absorbido durante el proceso está dado por el área sombreada.

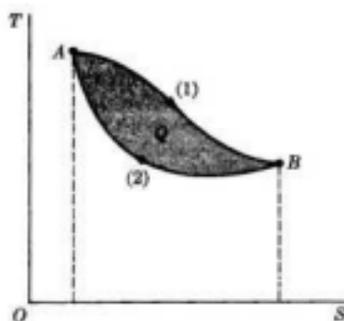


Fig. 11-14. Ciclo. El calor absorbido por el sistema al describir el ciclo en sentido horario es igual al área encerrada por el ciclo en un diagrama T - S .

Esta relación es de gran importancia en los cálculos termodinámicos. El estudiante debe darse cuenta que la entropía es una variable que se puede usar para describir un proceso del mismo modo que la presión, el volumen o la temperatura.

EJEMPLO 11.7. Eficiencia térmica de una máquina que opera por medio del ciclo de Carnot.

Solución: El ciclo de Carnot es un ciclo compuesto de dos transformaciones isotérmicas y dos adiabáticas reversibles. Cualquiera sea la clase de sustancia que se use, se representa por el rectángulo $ABCD$ de la fig. 11-15, donde AB y CD son las transformaciones isotérmicas y BC y DA las adiabáticas o isoentrópicas. El ciclo está descrito en sentido horario, como lo indican las flechas. Designemos las temperaturas de los dos procesos isotérmicos por T_1 y T_2 , con $T_1 > T_2$. Durante el proceso isotérmico AB , realizado a la temperatura mayor T_1 , la entropía aumenta y el sistema absorbe una cantidad de calor Q_1 ; durante el proceso isotérmico CD realizado a la temperatura menor T_2 , la entropía disminuye y se cede una cantidad de calor Q_2 .

Durante las dos transformaciones adiabáticas la entropía permanece constante y no hay intercambio de calor con el medio. Los cambios de entropía durante cada transformación son, según las ecuaciones (11.41) y (11.42),

$$\begin{aligned}\Delta S_{AB} &= Q_1/T_1, & \text{isotérmica, se absorbe calor,} \\ \Delta S_{BC} &= 0, & \text{adiabática,} \\ \Delta S_{CD} &= -Q_2/T_2, & \text{isotérmica, se cede calor,} \\ \Delta S_{DA} &= 0, & \text{adiabática.}\end{aligned}$$

El cambio neto de entropía en el ciclo es nulo, y

$$\Delta S_{\text{ciclo}} = \frac{Q_1}{T_1} - \frac{Q_2}{T_2} = 0$$

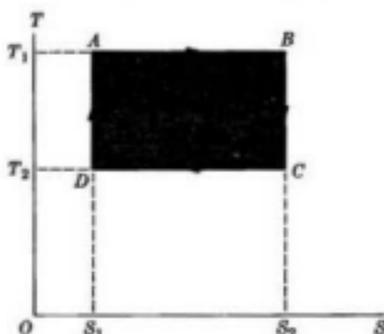


Fig. 11-15. Ciclo de Carnot en un diagrama T - S .

$$\frac{Q_1}{T_1} = \frac{Q_2}{T_2} \quad (11.46)$$

que da la relación entre el calor absorbido y el cedido y las correspondientes temperaturas. La ec. (11.46) es válida para cualquier sustancia que experimente un ciclo de Carnot, sea la sustancia un gas ideal o no, ya que no hemos hecho hipótesis especiales acerca de la estructura interna de la sustancia. En el caso de un gas, el ciclo se cumple por medio de expansiones y compresiones.

El calor neto absorbido por el sistema durante el ciclo es $Q = Q_1 - Q_2$, que también es igual al trabajo W hecho por el sistema durante el ciclo. De acuerdo a la ec. (11.45), podemos escribir

$$W = Q = \text{área del rectángulo } ABCD = (T_1 - T_2)(S_2 - S_1).$$

Por otra parte,

$$Q_1 = T_1 \Delta S_{AB} = T_1(S_2 - S_1).$$

Por consiguiente, la eficiencia de una máquina térmica que opera según el ciclo de Carnot (definida como el cociente entre el trabajo realizado y el calor absorbido a la temperatura mayor, por ciclo) es

$$E = \frac{W}{Q_1} = \frac{(T_1 - T_2)(S_2 - S_1)}{T_1(S_2 - S_1)} = \frac{T_1 - T_2}{T_1} \quad (11.47)$$

Vemos así que la eficiencia de una máquina térmica que opera según un ciclo reversible de Carnot es independiente de la sustancia y sólo depende de las temperaturas a las cuales opera. Este resultado se denomina comúnmente *teorema de Carnot*.

La ec. (11.47) muestra además que la temperatura absoluta debe ser una cantidad positiva. La razón es que si T_2 fuese negativa, entonces la eficiencia sería mayor que uno ($\delta > 100\%$), lo cual es incompatible con la conservación de la energía. Además de su importancia en el diseño de máquinas térmicas, el teorema de Carnot muestra que una máquina térmica reversible se puede usar como termómetro. Para este fin es necesario que dicha máquina opere entre una temperatura patrón y la temperatura que se va a determinar. Midiendo la eficiencia de la máquina y aplicando la ec. (11.47), se puede encontrar la temperatura desconocida.

EJEMPLO 11.8. Discusión del enfriamiento por desmagnetización adiabática.

Solución: Una de las técnicas más importantes usadas para enfriar una sustancia hasta temperaturas del orden de 10^{-8} K es el método conocido como *desmagnetización adiabática*. Sólo haremos una discusión cualitativa, sacando a relucir las ideas físicas involucradas y omitiendo en este ejemplo la discusión matemática detallada.

La entropía de una sustancia aumenta con la temperatura más o menos del modo que indica la curva (1) de la fig. 11-16. Si la sustancia es paramagnética y se aplica un campo magnético, se produce un efecto de ordenamiento que tiende a orientar los momentos magnéticos de las moléculas según la dirección del campo magnético. Esto trae como consecuencia una disminución de la entropía, como indica la curva (2) de la fig. 11-16, ya que la acción del campo magnético hace disminuir el desorden molecular.

Supongamos ahora que la sustancia está inicialmente en el estado A sin campo magnético presente, y que se aplica isotérmicamente un campo magnético. La sustancia experimenta la transformación AB. Luego anulamos adiabáticamente el campo magnético. Si el proceso es reversible la entropía no cambia y el sistema experimenta la transformación BC, finalizando en el punto C de la curva (1), que corresponde a una temperatura T_2 , mucho menor que la temperatura inicial T_1 . Repitiendo el proceso varias veces es posible alcanzar temperaturas muy bajas.

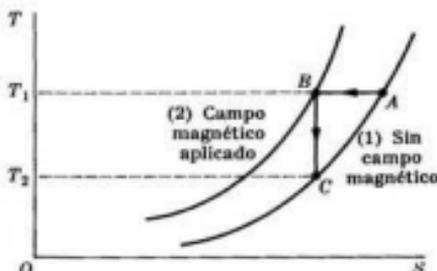


Fig. 11-16. Desmagnetización adiabática.

Bibliografía

1. "The Microscopic Interpretation of Entropy", D. Frisch, *Am. J. Phys.* **34**, 1171 (1966)
2. "Irreversibility in Simple Systems", A. Hobson, *Am. J. Phys.* **34**, 411 (1966)
3. "A Hundred Years of Entropy", M. Dutta, *Physics Today*, enero de 1968, pág. 75
4. "Concepts of Classical Thermodynamics", A. Buchdahl, *Am. J. Phys.* **28**, 196 (1960)
5. *Statistical Thermodynamics*, E. Schrödinger. Cambridge University Press, Cambridge, 1963, caps. 3, 4 y 5

6. *Statistical Physics*, G. Wannier. John Wiley, New York, 1966, parte I
7. *Fundamentals of Statistical Thermodynamics*, R. Sonntag y G. Van Wylen. John Wiley, New York, 1966, cap. 4
8. *The Feynman Lectures on Physics*, vol. I, R. Feynman, R. Leighton y M. Sands. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1963, caps. 44, 45 y 46
9. *A Source Book in Physics*, W. Magie. Harvard University Press, Cambridge, Mass., 1963, pág. 220 (Carnot), pág. 228 (Clausius), pág. 236 (Kelvin), pág. 262 (Boltzmann)

Problemas

11.1 Se mantiene un gas a presión constante de 20 atm mientras se expande desde un volumen de $5 \times 10^{-2} \text{ m}^3$ hasta uno de $9 \times 10^{-2} \text{ m}^3$. ¿Qué cantidad de energía calórica se debe suministrar al gas: (a) para mantener su energía interna constante? (b) para aumentar su energía interna en la misma cantidad que el trabajo realizado? Expresar los resultados en calorías y en joules.

11.2 Un gas, inicialmente a una presión de 4 atm y un volumen de $4 \times 10^{-2} \text{ m}^3$, se expande de modo que se verifica la relación $pV = \text{const}$. En tales condiciones la temperatura, y por lo tanto la energía interna del gas, permanecen constantes. Calcular el trabajo realizado y el calor absorbido cuando el volumen se duplica.

11.3 Cuando un sistema se lleva del estado A al estado B a lo largo de la trayectoria ACB (ver fig. 11-17), el sistema absorbe 80 J de calor y hace 30 J de trabajo. (a) Si el trabajo realizado es 10 J. ¿Cuánto calor absorbe el sistema a lo largo del camino ADB? (b) El sistema regresa del estado B al

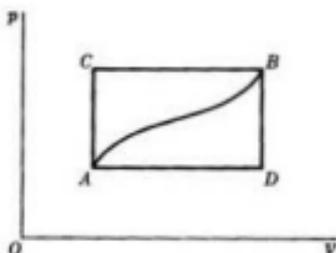


Figura 11-17

estado A según la trayectoria curva. El trabajo realizado sobre el sistema es 20 J. ¿Absorbe o libera calor el sistema? ¿Cuánto? (c) Si $U_A = 0$ y $U_D = -40 \text{ J}$, determinar el calor absorbido en los procesos AD y AB.

11.4 Un gas experimenta el ciclo que muestra la fig. 11-18. El ciclo se repite 100 veces por minuto. Determinar la potencia generada. Los datos son: en A la presión $p = 30 \text{ atm}$ y el volumen $V = 2$ litros; en B la presión es 10 atm y el volumen 8 litros.

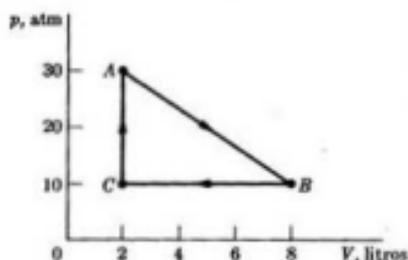


Figura 11-18

11.5 Sobre una misma hoja de papel hacer el gráfico de las líneas que describen transformaciones isocóricas de un gas ideal para tres volúmenes diferentes. Repetirlo para transformaciones isobáricas a tres presiones diferentes y para transformaciones isotérmicas a tres temperaturas diferentes.

11.6 Probar que el trabajo realizado por un gas ideal durante una expansión isotérmica es

$$W_T = nRT \ln V_2/V_1 = nRT \ln p_1/p_2$$

¿Qué cantidad de calor se absorbe durante el proceso? [Sugerencia: Usar la ec. (11.16).]

11.7 La capacidad calórica de la mayoría de las sustancias (excepto a temperaturas muy bajas) se puede expresar satisfactoriamente por la fórmula empírica

$$C_p = a + 2bT - cT^{-2},$$

donde a , b y c son constantes y T es la temperatura absoluta. (a) Calcular, en función de a , b y c , el calor necesario para elevar la temperatura de un mol de la sustancia de T_1 a T_2 , a presión constante. (b) Hallar la capacidad calórica media entre las temperaturas T_1 y T_2 . (c) Para el magnesio los valores de las constantes son $a = 25,7 \times 10^3$, $b = 3,13$ y $c = 3,27 \times 10^8$ cuando C_p se expresa en $\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$. Calcular la capacidad calórica del magnesio a 300 K y la capacidad calórica media entre 200 K y 400 K.

11.8 El coeficiente de expansión cúbica a presión constante se define mediante

$$\beta = (1/V) (\partial V / \partial T)_p,$$

y el módulo de elasticidad de volumen a temperatura constante mediante

$$\kappa = - (1/V) (\partial V / \partial p)_T.$$

Probar que

$$(\partial \beta / \partial p)_T = - (\partial \kappa / \partial T)_p.$$

11.9 Un gas a la temperatura T que tiene N moléculas, ocupa un recipiente de volumen V_1 separado por una pared removible de otro recipiente vacío de volumen V_2 . Cuando se quita la pared el gas ocupa el volumen total $V_1 + V_2$. Probar que (a) la temperatura del gas permanece constante y (b) el cambio de entropía es $\Delta S = kN \ln(1 + V_2/V_1)$. (c) Verificar que ΔS es positivo.

11.10 Consideremos dos muestras de gases diferentes, designados a y b , ambos a la misma temperatura T , compuestos de N_a y N_b moléculas respectivamente, y ocupando recipientes adyacentes de volúmenes V_1 y V_2 , separados por una pared removible. Cuando ésta se quita y ambos gases se mezclan, tenemos que las N_a moléculas del gas a y las N_b del

gas b ocupan el volumen $V_1 + V_2$. Mostrar que (a) la temperatura permanece constante y (b) el cambio de entropía es $\Delta S = kN_a \ln(1 + V_2/V_1) + kN_b \ln(1 + V_1/V_2)$. Verificar que ΔS es positivo.

11.11 Consideremos dos muestras del mismo gas, ambas a la temperatura T , compuestas de N_1 y N_2 moléculas respectivamente, y ocupando recipientes adyacentes de volúmenes V_1 y V_2 separados por una pared removible. Cuando se quita la pared, tenemos una muestra del gas compuesta de $N_1 + N_2$ moléculas ocupando el volumen $V_1 + V_2$. Demostrar que (a) la temperatura permanece constante y (b) el cambio de entropía es

$$\Delta S = kN_1 \ln \left[\frac{(V_1 + V_2)N_1}{(N_1 + N_2)V_1} \right] + kN_2 \ln \left[\frac{(V_1 + V_2)N_2}{(N_1 + N_2)V_2} \right].$$

(c) Demostrar también que si los dos gases hubieran estado inicialmente a la misma presión, el cambio de entropía hubiera sido nulo. ¿Por qué?

11.12 La energía libre de Helmholtz se define por $F = U - TS$. Probar que

$$F = -kNT [\ln(Z/N) + 1].$$

Hallar F para un gas ideal. Probar además que el parámetro α definido en la ec. (10.11) es igual a $-F/kNT$.

11.13 Refiriéndose al sistema descrito en el problema 10.33, probar (a) que la capacidad calórica del sistema se puede escribir en la forma $C_p = C_{v, tr} + C_{v, int}$, y (b) que la entropía del sistema se puede escribir en la forma $S = S_{tr} + S_{int}$, donde

$$S_{tr} = \frac{U_{tr}}{T} + kN \ln \frac{Z_{tr}}{N} + kN,$$

$$S_{int} = \frac{U_{int}}{T} + kN \ln Z_{int}.$$

Esto se aplica, por ejemplo, para calcular la capacidad calórica de un gas paramagnético colocado en un campo magnético, con

$$S_{mag} = U_{mag}/T + kN \ln Z_{mag}.$$

11.14 Un sistema se compone de partículas cuyos grados de libertad internos corresponden a estados de energía $0, \epsilon, 2\epsilon, \dots, n\epsilon, \dots$ donde n varía de cero a infinito. Hallar la entropía y la capacidad calórica debidas a los grados de libertad internos del sistema. [Sugerencia: Referirse a los problemas 10.6 y 11.13.]

11.15 Un sistema se compone de partículas que, debido a los grados de libertad internos, pueden existir solamente en uno o en otro de los dos estados de energía $-\epsilon$ y $+\epsilon$, además de la energía cinética de traslación de las partículas. Hallar la entropía y la capacidad calórica (a volumen constante) del sistema debidas a los grados de libertad internos de las partículas, en función de la temperatura del sistema. Hacer el gráfico de ambas cantidades en función de la temperatura absoluta del sistema. [Sugerencia: Ver el problema 11.13.] Aplicar el resultado al cálculo de la entropía magnética y de la capacidad calórica magnética de los electrones en un campo magnético.

11.16 Un sistema compuesto de N moléculas, cada una con un momentum angular j y una razón giromagnética g , se coloca en un campo magnético \mathcal{B} . Mostrar que la entropía debida al campo magnético cuando se alcanza el equilibrio es

$$S_m = -kN/z \left[\left(1 + \frac{1}{2j} \right) \coth(j + \frac{1}{2})x - \frac{1}{2j} \coth \frac{1}{2}x + \ln \frac{\sinh(j + \frac{1}{2})x}{\sinh \frac{1}{2}x} \right],$$

donde $x = g\mu_B \mathcal{B}/kT$. Calcular también la capacidad calórica a volumen constante.

11.17 El número de partículas de un sistema es N . Las partículas sólo pueden estar en uno u otro de los dos estados con energía $-\epsilon$ y $+\epsilon$, pero no tienen ninguna energía cinética traslacional. Si la energía total del sistema es U , probar que la temperatura absoluta está dada por

$$\frac{1}{T} = \frac{k}{2\epsilon} \ln \frac{N - U/\epsilon}{N + U/\epsilon}.$$

Verificar que la temperatura absoluta es positiva (negativa) si U es negativa (positiva). Esta situación se aplica, por ejemplo, a un conjunto de partículas (electrones) de espín $\frac{1}{2}$ cuando están colocadas en un campo magnético y sólo se considera la energía de interacción del espín con el campo magnético. [Sugerencia: mostrar primero que

$$\ln P = N \ln 2 - \frac{1}{2}(N + U/\epsilon) \ln(N + U/\epsilon) - \frac{1}{2}(N - U/\epsilon) \ln(N - U/\epsilon);$$

hacer luego el gráfico de $\ln P$ en función de U . Observar que U varía entre $-N\epsilon$ y $N\epsilon$.]

11.18 Las moléculas de oxígeno tienen un espín igual a 1, por lo que el oxígeno es un gas paramagnético. Determinar la función de partición de espín del oxígeno colocado en un campo magnético \mathcal{B} . Obtener la energía del gas, su momento magnético medio, su entropía de espín y su capacidad calórica a volumen constante debidos al campo magnético.

11.19 Mostrar que el cambio de entropía de una sustancia calentada reversiblemente a presión constante (suponiendo que el calor específico permanece constante) es

$$S_2 - S_1 = nC_p \ln(T_2/T_1).$$

Aplicar el resultado a 1 kg de agua calentado desde la temperatura ambiente (298 K) hasta el punto de ebullición normal (373 K).

11.20 Cuando una sustancia experimenta un cambio de fase (fusión, vaporización, sublimación, etc., o el inverso), se absorbe (o libera) calor a temperatura constante. Para el agua, el calor de fusión es 1440 cal mol⁻¹ y el calor de vaporización es 9720 cal mol⁻¹. Calcular el cambio de entropía de un mol de agua si se calienta reversiblemente desde -20°C hasta 150°C a la presión constante de 1 atm. La capacidad calórica del hielo es 9,0 cal K⁻¹ y la capacidad calórica del vapor a presión constante es 8,6 cal K⁻¹ mol⁻¹.

11.21 Si ξ es una función de las variables x, y , se tiene

$$d\xi = (\partial\xi/\partial x)_y dx + (\partial\xi/\partial y)_x dy.$$

Verificar que conforme a la ec. (11.37) tenemos que

$$T = (\partial U / \partial S)_V$$

y

$$p = -(\partial U / \partial V)_S.$$

Escribir las expresiones correspondientes que se obtiene diferenciando (a) $U = U + pV$, (b) $F = U - TS$ (llamada *energía libre de Helmholtz*), y (c) $G = U + pV - TS$ (llamada *energía libre de Gibbs*).

11.22 Si $d\xi = X dX + Y dY$ es un diferencial exacto de modo que $X = (\partial \xi / \partial x)_y$ y $Y = (\partial \xi / \partial y)_x$, tenemos que $(\partial X / \partial y)_x = (\partial Y / \partial x)_y$. Dadas las funciones termodinámicas (a) U , (b) $H = U + pV$, (c) $F = U - TS$ y (d) $G = U + pV - TS$, determinar las relaciones del tipo enunciado que se deducen de esas funciones; las mismas se denominan *relaciones de Maxwell*. [Sugerencia: Ver el problema anterior.]

11.23 Algunas cantidades termodinámicas son proporcionales al número de partículas (o a la masa del sistema) y otras son independientes del número de partículas. Las del primer tipo se denominan *extensivas* y las del segundo *intensivas*. Determinar cuáles de las siguientes cantidades pertenecen a uno u otro tipo: U , W , Q , p , V , T , S , H , $(\partial H / \partial p)_S$, $(\partial H / \partial S)_p$, C_p , C_v , $F = U - TS$ y $G = U + pV - TS$.

11.24 Probar que $C_p - C_v = \beta^2 TV / \kappa$. [Sugerencia: Expresar primero dS en función de dT y dV . Luego mostrar que

$$(\partial U / \partial V)_T + p = T(\partial p / \partial T)_V.$$

La definición de β y de κ está en el problema 11.8].

11.25 Si p es la presión a la cual dos fases de una sustancia existen en equilibrio a la temperatura T , y V_1 y V_2 son los volúmenes de 1 mol de dicha sustancia en cada fase, probar que

$$L = T \left(\frac{dp}{dT} \right) (V_2 - V_1),$$

donde L es el calor molar de cambio de fase, es decir, el calor absorbido cuando un mol de la sustancia pasa de una fase a otra. Esta expresión se denomina

ecuación de Clapeyron. [Sugerencia: usar la relación

$$(\partial S / \partial V)_T = (\partial p / \partial T)_V,$$

deducida en el problema 11.22.]

11.26 Un mol de un gas ideal a 25°C y 1 atm se calienta a presión constante hasta que su volumen se triplica. Calcular (a) ΔU , (b) W , (c) Q , (d) ΔS , (e) ΔH , (f) ΔF , (g) ΔG . La definición de F y G está en el problema 11.21.

11.27 Calcular el cambio de entropía, de entalpía y de energía interna de un mol de agua cuando se funde a la temperatura de 0°C y a la presión de 1 atm. La densidad del hielo es $0,9 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ y la del agua $1,0 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$. El calor de fusión del agua es 1440 cal mol⁻¹.

11.28 (a) Se pone en contacto 1 kg de agua a 0°C con un cuerpo muy grande a 100°C. Cuando el agua ha alcanzado 100°C, ¿cuál ha sido el cambio de entropía del agua? ¿Cuál el del cuerpo? ¿Cuál el del universo? (b) Si el agua se hubiera calentado de 0°C a 100°C poniéndola primero en contacto con un cuerpo grande a 50°C y después con otro cuerpo también grande a 100°C, ¿cuál hubiera sido el cambio de entropía del agua y el del universo? (c) Explicar cómo se podría calentar el agua de 0°C a 100°C sin que cambie la entropía del universo.

11.29 Un cuerpo de capacidad calórica C_{p1} y que contiene N_1 moles a la temperatura T_1 se coloca en contacto térmico con otro cuerpo de capacidad calórica C_{p2} que contiene N_2 moles a la temperatura T_2 . El único proceso que puede ocurrir es un intercambio de calor. ¿Es reversible o irreversible el proceso? (a) Demostrar que cuando se alcanza el equilibrio térmico la temperatura común es

$$T = \frac{N_1 C_{p1} T_1 + N_2 C_{p2} T_2}{N_1 C_{p1} + N_2 C_{p2}}.$$

Verificar que T es una temperatura comprendida entre T_1 y T_2 . (b) Probar que el cambio total de entropía es

$$\Delta S = N_1 C_{p1} \ln \frac{T}{T_1} + N_2 C_{p2} \ln \frac{T}{T_2}.$$

Verificar además que ΔS es positivo. [Sugerencia: para la última demostración suponer que T_1 es menor que T_2 , de modo que las tres temperaturas estén en el orden $T_1 < T < T_2$. Luego sumar y restar a la expresión anterior de ΔS la cantidad $n_1 C_p \ln (T/T_1)$.]

11.30 Se vacía 100 g de agua a 90°C en un recipiente de aluminio de 0,3 kg inicialmente a la temperatura ambiente (25°C). Calcular el cambio de entropía del aluminio, el del agua y el de todo el sistema después que se ha alcanzado el equilibrio. ¿Es reversible o irreversible el proceso?

11.31 Se mezcla un líquido a temperatura T_1 con una cantidad igual del mismo líquido a temperatura T_2 . El sistema está aislado térmicamente. Probar que el cambio de entropía del universo es

$$\Delta S = 2nC_p \ln \frac{T_1 + T_2}{2T_1 T_2},$$

y mostrar que este cambio es necesariamente positivo.

11.32 Calcular W , Q , ΔU , ΔH y ΔS , cuando un mol de vapor de agua a 100°C se condensa por medio de una compresión isotérmica a la presión de 1 atm. El calor de vaporización del agua es 9720 cal mol⁻¹ y la densidad del vapor de agua en tales condiciones es 1,686 kg m⁻³.

11.33 Un litro de un gas ideal a 300 K y a la presión de 15 atm se expande isotérmicamente hasta un volumen de 10 litros. Calcular W , Q , ΔU , ΔH y ΔS .

11.34 Un mol de nitrobenzeno



se vaporiza a 210°C y a la presión de 1 atm. El calor de vaporización es 9730 cal mol⁻¹. Calcular (a) Q , (b) W , (c) ΔH , (d) ΔU , (e) ΔS , (f) ΔF y (g) ΔG .

11.35 La densidad de energía κ de la radiación de un cuerpo negro es función de la temperatura solamente (recordar la ec. 1.8). Además la presión ejercida por una radiación isotrópica sobre una superficie perfectamente absorbente es $\frac{1}{3}\kappa$. Por medio de la ec. (11.37), mostrar que κ es proporcional a T^4 , que es la ley de Stefan-Boltzmann (ejemplo 1.4). [Sugerencia: Escribir $U = \kappa V$ en la ec. (11.37) y observar que $d\kappa = (d\kappa/dT) dT$; aplicar luego las propiedades de un diferencial exacto, como en el problema 11.21.]

11.36 Mostrar que para un ciclo reversible en el cual sólo hay trabajo hecho por expansión,

$$\oint \frac{dW}{p} = 0.$$

Observar la similitud de esta ecuación con la ec. (11.44).

PROPIEDADES TERMICAS DE LOS GASES

12.1 Introducción

12.2 Ecuación de estado de un gas ideal

12.3 Ecuación de estado para los gases reales

12.4 Capacidades calóricas de un gas ideal monoatómico

12.5 Capacidades calóricas de un gas ideal poliatómico

12.6 Principio de equipartición de la energía

12.1 Introducción

En los dos capítulos precedentes hemos sentado las bases para una discusión de las propiedades generales macroscópicas de la materia: las propiedades mecánicas, eléctricas, térmicas y químicas de la materia o de agregados de muchos átomos o moléculas. Podemos enfocar la discusión de estas propiedades según dos puntos de vista opuestos. El *enfoque experimental* que exige mediciones extensivas en el laboratorio y tabulación de propiedades tales como densidad, calor específico, conductividades eléctricas y térmica, viscosidad, módulos de elasticidad, tensión superficial, dilatación térmica, velocidades de reacción química, etc., y la dependencia empírica de estas cantidades de factores externos tales como presión y temperatura, campos eléctricos y magnéticos aplicados, etc. Este ha sido el procedimiento tradicional para aquellos interesados primariamente en un conocimiento de esas propiedades para aplicaciones específicas. El otro enfoque es el *teórico*, que consiste en la evaluación de las propiedades macroscópicas de la materia en términos de la estructura atómica y molecular y en términos de las interacciones entre átomos y moléculas. Aunque estas interacciones son esencialmente electromagnéticas, se hace algunas hipótesis simplificativas de naturaleza mayormente fenomenológica (tales como una energía potencial intermolecular razonable). En el tratamiento teórico es preciso usar métodos estadísticos, debido al gran número de partículas involucradas.

En este capítulo ilustraremos el procedimiento teórico resolviendo algunos problemas representativos relacionados con las propiedades térmicas de los gases. La extensión de los métodos de este capítulo a otros estados de la materia o a tópicos especiales pertenecientes a la ingeniería, a la química física y a la física aplicada, no se discutirán en este texto.

12.2 Ecuación de estado de un gas ideal

El más simple de todos los sistemas de partículas es un gas ideal; en esta sección obtendremos su ecuación de estado. En el ejemplo 11.6 dedujimos la ec. (11.39), esto es,

$$kN \frac{dZ}{Z} = \frac{dW}{T} + \frac{U}{T^2} dT. \quad (12.1)$$

Esta ecuación relaciona el cambio de la función de partición con el trabajo realizado por el sistema y la variación de su temperatura. Para el caso de un gas, en el cual el único trabajo es el de expansión, tenemos $dW = p dV$. Además $d(\ln Z) = dZ/Z$. Luego, podemos escribir de nuevo la ec. (12.1) en la forma

$$kN d(\ln Z) = \frac{p dV}{T} + \frac{U dT}{T^2}.$$

Si la temperatura es constante, $dT = 0$; despejando p , tenemos

$$p = kNT \left[\frac{\partial(\ln Z)}{\partial V} \right]_T. \quad (12.2)$$

donde el subíndice T indica que la temperatura permanece constante. La ec. (12.2) relaciona la presión de un sistema con su temperatura T , su volumen V y la estructura interna del mismo, a través de Z . Por consiguiente, dicha ecuación es una relación de la forma $f(p, V, T) = 0$. En consecuencia, podemos llamar *ecuación de estado del sistema* a la ec. (12.2).

Para un gas ideal, la función de partición está dada por la ec. (10.40),

$$Z = \frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3}, \quad (12.3)$$

que sustituida en la ec. (12.2), da

$$p = \frac{kNT}{V}. \quad (12.4)$$

La ec. (12.4) es la *ecuación de estado de un gas ideal*. Esta ecuación se escribe algunas veces en la forma

$$pV = kNT, \quad (12.5)$$

o sea, como $R = kN_A = kN/n$, donde $n = N/N_A$ es el número de moles del gas y N_A es el número de Avogadro,

$$pV = nRT. \quad (12.6)$$

Podemos deducir esta ecuación por otros modos, quizá más directos. En uno de los métodos se calcula la presión del gas analizando en cuánto varía el momento de las moléculas al chocar con las paredes del recipiente que las contiene. En otro método se usa el teorema virial para probar que la ec. (12.5) da la presión de un gas cuando se desprecian las fuerzas intermoleculares.* El hecho de que llegamos al mismo resultado en todas las deducciones demuestra la compatibilidad de nuestros métodos.

Nota sobre la medición de la temperatura. En la sección 10.4 asociamos la temperatura de un sistema de partículas con la energía media de una de ellas. En la ec. (10.41), $E_z = \frac{3}{2}kT$, fuimos más específicos acerca de la relación entre la temperatura de un gas ideal y la energía cinética media de sus moléculas. Empero, debemos considerar ahora dos aspectos importantes: primero, en la ecuación definitoria (10.23) introdujimos dos cantidades nuevas, T (temperatura absoluta) y k (constante de Boltzmann) y debemos decidir cómo se va a medir estas cantidades independientemente. Segundo, todos los seres humanos tenemos un concepto intuitivo de temperatura basado en experiencias sensoriales, como lo reflejan nuestras sensaciones de calor y de frío. Todos estamos acostumbrados a medir la temperatura en función de un número dado por un instrumento llamado *termómetro*. Por consiguiente, debemos correlacionar nuestra definición estadística de temperatura con la noción intuitiva.

Consideremos una masa M de un gas que contiene N moléculas. Si despreciamos el efecto de las fuerzas intermoleculares, la ecuación de estado está dada por la ec. (12.5), esto es, $pV = kNT$. Supongamos que ponemos el gas en equilibrio térmico

* Ver por ejemplo, el primer volumen de esta serie, *Física: Mecánica*, sección 9.13 y ejemplo 9.16.

mico con algún otro sistema físico que suponemos pueda ser mantenido a temperatura fija. El sistema puede ser una mezcla de hielo y agua en equilibrio a la presión normal de 1 atm. La temperatura de equilibrio de este sistema se denomina punto normal de fusión del agua. Medimos la presión y el volumen del gas a esta temperatura fija y obtenemos los valores p_0 y v_0 , respectivamente. A continuación decidimos asignar un valor T_0 conveniente (pero arbitrario) a la temperatura fija, que es también la temperatura del gas. En consecuencia, podemos escribir $p_0 V_0 = kNT_0$, lo cual fija automáticamente el valor de la constante de Boltzmann, $k = p_0 V_0 / NT_0$, ya que podemos obtener N si conocemos la masa de cada molécula.

Para determinar la temperatura del gas cuando su presión es p y su volumen V , de modo que se satisfaga $pV = kNT$, eliminamos simplemente el factor kN usando los valores normales y obtenemos

$$T = T_0(pV/p_0V_0),$$

que da T en función de nuestra temperatura de referencia normal T_0 y otras cantidades medibles. De este modo nuestra masa de gas se ha convertido en un *termómetro de gas*. Si el volumen del gas se mantiene constante e igual a V_0 , tenemos $T = T_0(p/p_0)$, resultando un *termómetro de gas a volumen constante*. En lugar de gases podemos usar otras sustancias como termómetro, tales como líquidos o metales cuyas dimensiones (volumen o longitud) cambien con la temperatura. En otros termómetros se usa conductores eléctricos (tales como alambres de platino) cuya resistencia varía con la temperatura. Como la ecuación de estado de estas sustancias es más complicada, en la práctica calibramos estos termómetros comparándolos con uno de gas. En este caso el termómetro coincide con el de gas sólo en los puntos de calibración. Como la propiedad escogida puede no variar linealmente con la temperatura del gas, habrá ligeras discrepancias a temperaturas intermedias.

Podemos escoger el valor de T_0 basándonos en otros puntos de vista. Por ejemplo, tomar otro proceso que ocurra a una temperatura fija, tal como el punto de ebullición del agua a la presión normal de 1 atm, que se denomina punto normal de ebullición del agua. Luego podemos decidir que la temperatura de este segundo punto de referencia es 100 unidades o grados mayor que T_0 , escogido como punto normal de congelamiento del agua. Si p_1 y V_1 son la presión y el volumen del gas a esta nueva temperatura, tenemos que $p_1 V_1 = kN(T_0 + 100)$. Despejando kN de la ecuación $p_0 V_0 = kNT_0$ y sustituyéndolo en la ecuación anterior, encontramos

$$T_0 = 100p_0 V_0 / (p_1 V_1 - p_0 V_0),$$

de la cual podemos obtener un valor numérico para T_0 en esta escala arbitrariamente elegida. El resultado que se obtiene para T_0 en este tipo de experimento (y otros más que se han realizado empleando diferentes técnicas) es $T_0 = 273,15$. Cada una de las unidades se llama *kelvin*, y se designa por K. Actualmente, se prefiere asignar simplemente, por definición, el valor 273,15 K a la temperatura del punto normal de fusión del agua. El valor de la constante de Boltzmann resulta entonces $k = 1,3805 \times 10^{-23}$ J K⁻¹.

Es importante comprender que la técnica para medir temperaturas que hemos explicado se basa en la aproximación de gas ideal. Si usamos gases diferentes, los resultados no son los mismos, ya que el efecto de las fuerzas intermoleculares es distinto para cada gas, como aparece en la ec. (12.7) de la próxima sección. Generalmente se usa hidrógeno o helio. Es más conveniente tener una escala de temperatura independiente de la sustancia que se use para medir. Esto se puede llevar a efecto usando una máquina térmica reversible operando en un ciclo de Carnot (ver el ejemplo 11.7). Entonces, el rendimiento de la máquina es independiente de la sustancia que en ella se use y está dado por la ecuación (11.47), $E = (T_1 - T_2)/T_1$. Si T_2 es nuestra temperatura normal T_0 y T_1 es la temperatura T que se va a medir, tenemos

$$E = \frac{T - T_0}{T}.$$

En consecuencia si medimos E , obtenemos T . Experimentalmente se ha encontrado $E = 100/373$ para una máquina térmica que opera entre los puntos normales de ebullición y de congelamiento del agua. Si tomamos $T - T_0 = 100$ para la diferencia entre esas dos temperaturas, obtenemos otra vez $T_0 = 273$ K. La temperatura obtenida usando una máquina reversible se denomina *temperatura termodinámica*. Este método fue propuesto por Kelvin. Joule y Kelvin hicieron experimentos cuidadosos para comparar la temperatura medida por un termómetro de gas a volumen constante con la temperatura termodinámica.

12.3 Ecuación de estado para los gases reales

Al tratar gases reales, debemos tomar en consideración las fuerzas intermoleculares y las dimensiones finitas de las moléculas. Las fuerzas intermoleculares son de alcance bastante corto y disminuyen rápidamente con la distancia entre moléculas. Por consiguiente, la presión de un gas real será tanto más cercana a la del gas ideal, ec. (12.4), cuanto menor sea el número de moléculas por unidad de volumen, es decir, cuanto menor sea N/V . Esto sugiere que expresemos la presión de un gas real en términos de la serie

$$p = \frac{nRT}{V} + \frac{n^2A}{V^2} + \frac{n^3B}{V^3} + \frac{n^4C}{V^4} + \dots \quad (12.7)$$

de potencias de n/V . Podemos considerar la ec. (12.7) como la *ecuación de estado de un gas real*. A, B, C, \dots son cantidades características de cada gas, llamados segundo, tercer, etc. *coeficiente virial*. Estos coeficientes son funciones de la temperatura y dependen de la intensidad de las fuerzas moleculares. Midiendo p a temperaturas y volúmenes diferentes, podemos obtener los coeficientes viriales $A(T), B(T), \dots$ experimentalmente. Sin embargo, para hallar un indicio de la correlación entre los coeficientes viriales y las fuerzas intermoleculares, debemos obtener ciertas relaciones teóricas. Una posibilidad es usar el *teorema virial*, que se deduce en los textos de mecánica.* Aplicado a los gases, este teorema da

$$pV = nRT + \frac{1}{3} \left(\sum_{\substack{\text{Todos} \\ \text{los pares}}} \mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} \right), \quad (12.8)$$

donde \mathbf{F}_{ij} es la fuerza que la molécula j ejerce sobre la i , \mathbf{r}_{ij} es el vector de posición de la molécula i con respecto a la molécula j , y la suma se extiende a todos los pares de moléculas. Comparando la ec. (12.8) con la ec. (12.7), obtenemos

$$\frac{1}{3} \left(\sum_{\substack{\text{Todos} \\ \text{los pares}}} \mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} \right) = n \left(\frac{nA}{V} + \frac{n^2B}{V^2} + \frac{n^3C}{V^3} + \dots \right), \quad (12.9)$$

la que en principio nos permite correlacionar los coeficientes viriales A, B, C, \dots con las fuerzas intermoleculares. Los métodos de la mecánica estadística permiten

* Ver, por ejemplo, el primer volumen de esta serie, *Física: Mecánica*, sección 9.12.

un cálculo más directo de esos coeficientes, como veremos inmediatamente. Sin embargo, omitiremos algunas deducciones debido a que la mecánica estadística de los sistemas compuestos de partículas en interacción es más compleja que la de los sistemas de partículas no interactuantes.

Introduzcamos la cantidad $\mathcal{Z} = Z^N/N!$, llamada *gran función de partición* de un sistema de partículas no interactuantes. Luego, teniendo en cuenta que

$$\ln \mathcal{Z} = \ln (Z^N/N!) = N \ln Z - \ln N!,$$

podemos también escribir la ecuación de estado (12.2) en la forma

$$p = kT \left[\frac{\partial}{\partial V} (\ln \mathcal{Z}) \right]_T. \quad (12.10)$$

Para un gas ideal, usando la ec. (12.3), tenemos

$$\mathcal{Z}_{\text{Gas ideal}} = \frac{1}{N!} \left[\frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \right]^N. \quad (12.11)$$

Al considerar gases reales, y por consiguiente tratar moléculas que interactúan entre sí, debemos extender los métodos de la mecánica estadística explicados en el capítulo 10 para incluir la energía potencial interna $E_p = \sum_{\text{Todos los pares}} E_{pij}$. No podemos entrar en los detalles matemáticos de esta extensión; es suficiente indicar que en el caso de un gas real, la gran función de partición \mathcal{Z} tiene la forma

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{N!} \left[\frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \right]^N \int \int \dots \int_{\text{Todas las moléculas}} e^{-E_{pij}/kT} dV_1 dV_2 \dots dV_N, \quad (12.12)$$

donde las N integrales de volumen corresponden una a cada molécula. Esta expresión de apariencia impresionante, es en realidad una simple extensión de la función de partición de un gas ideal, porque para un gas ideal debemos hacer $E_p = 0$ y entonces $e^{-E_{pij}/kT} = 1$. Luego, la integral múltiple se convierte en

$$\int \int \dots \int_{\text{Todas las moléculas}} dV_1 dV_2 \dots dV_N = V \cdot V \cdot V \dots = V^N, \quad (12.13)$$

ya que cada molécula puede encontrarse en todo el volumen disponible. Entonces la ec. (12.12) toma la forma

$$\mathcal{Z}_{\text{Gas ideal}} = \frac{1}{N!} \left[\frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \right]^N V^N = \frac{1}{N!} \left[\frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \right]^N,$$

que coincide con la ec. (12.11).

Ahora bien, volviendo a la ec. (12.12), podemos escribir la energía potencial en la forma

$$E_p = \sum_{\substack{\text{Todos} \\ \text{los pares}}} E_{pij}$$

y usar una expresión razonable para la energía potencial intermolecular. Una vez conocida E_p es posible en principio calcular \mathcal{Z} . Aplicando la ec. (12.10) podemos obtener la presión p y desarrollar el resultado en potencias inversas del volumen V . De esta manera queda establecida una relación entre la energía potencial intermolecular E_{pij} y los coeficientes viriales A, B, \dots . La determinación experimental de estos coeficientes es muy útil para obtener la forma del potencial intermolecular E_{pij} que permita calcular los citados coeficientes correctamente. En lo que resta de esta sección ilustraremos algunas de estas técnicas.

Consideremos la integral múltiple de la ec. (12.12); esto es

$$I = \int \int \dots \int_{\text{Todas las moléculas}} e^{-E_{pij}/kT} dV_1 dV_2 \dots dV_N,$$

donde la suma

$$E_p = \sum_{\substack{\text{Todos} \\ \text{los pares}}} E_{pij}$$

contiene $\frac{1}{2}N(N-1)$ términos, que es el número total de pares de moléculas diferentes. Teniendo en cuenta que

$$e^{(x+y+z+\dots)} = e^x \cdot e^y \cdot e^z \dots,$$

tenemos

$$e^{-E_{pij}/kT} = \prod_{\substack{\text{Todos} \\ \text{los pares}}} e^{-E_{pij}/kT},$$

donde el símbolo \prod significa producto de todos los términos que aparecen. Los factores exponenciales son prácticamente iguales a 1 cuando los E_{pij} son muy pequeños y esto es lo que ocurre realmente (excepto cuando las moléculas están muy cerca unas de otras), debido al corto alcance de las fuerzas intermoleculares (ver fig. 12-1). Luego, usando el desarrollo $e^{-x} = 1 - x + \frac{1}{2}x^2 - \dots$, podemos escribir

$$e^{-E_{pij}/kT} = 1 - \frac{E_{pij}}{kT} + \frac{1}{2} \left(\frac{E_{pij}}{kT} \right)^2 \dots = 1 + f_{ij}, \quad (12.14)$$

donde la cantidad f_{ij} es muy pequeña, excepto cuando las dos moléculas están muy juntas. Por lo tanto

$$e^{-E_p/kT} = \prod_{\substack{\text{Todos} \\ \text{los pares}}} (1 + f_{ij}) = 1 + \sum_{\substack{\text{Todos} \\ \text{los pares}}} f_{ij} + \dots$$

Los términos que se han omitido contienen los productos de 2, 3, \dots f_{ij} y los despreciamos, aunque en un estudio más detallado deben ser considerados. Con

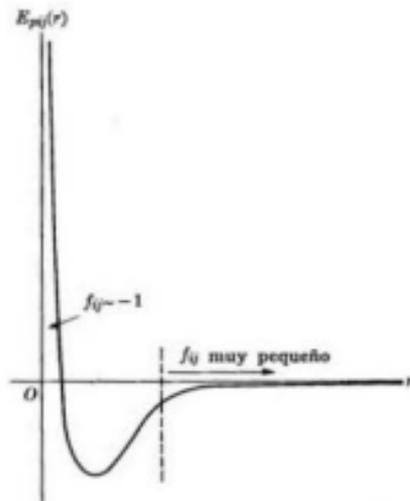


Fig. 12-1. Energía potencial intermolecular.

esta aproximación la integral I se puede escribir en la forma

$$I = \underbrace{\int \int \dots \int}_{\text{Todas las moléculas}} \left(1 + \sum_{\substack{\text{Todos} \\ \text{los pares}}} f_{ij} + \dots \right) dV_1 dV_2 \dots dV_N.$$

Después de la integración el término que contiene el factor 1 da, evidentemente, V^N de conformidad con el resultado obtenido en la ec. (12.13) para un gas ideal. Los términos que siguen dan entonces la contribución de las fuerzas intermoleculares. Los $\frac{1}{2}N(N-1)$ términos de la suma son todos iguales porque f_{ij} tiene la misma forma para todos los pares de moléculas. Luego, su contribución se puede escribir en la forma

$$\frac{1}{2}N(N-1)V^{N-2} \int_1 \int_2 f_{12} dV_1 dV_2 \quad (12.15)$$

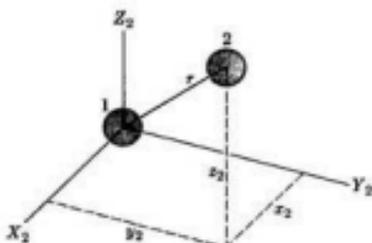


Figura 12-2

donde hemos escogido el par de moléculas 1 y 2, y el factor V^{N-2} resulta de la integral de volumen correspondiente a las restantes $N-2$ moléculas. Para calcular la integral doble, podemos primero tomar el origen de coordenadas en la

molécula 1 y efectuar la integral sobre dV_2 (fig. 12-2). Designando con r la distancia entre 1 y 2 podemos entonces escribir

$$\int_1 \int_2 f_{12}(r) dV_1 dV_2 = \int_1 \left\{ \int_2 f_{12}(r) 4\pi r^2 dr \right\} dV_1$$

donde hemos usado $dV_2 = 4\pi r^2 dr$ para el elemento de volumen, debido a la simetría esférica del problema. La integral

$$\beta = \int_0^\infty f_{12}(r) 4\pi r^2 dr \quad (12.16)$$

es independiente de la posición de la molécula 1 (en tanto ésta no esté cerca de las paredes del recipiente) y por consiguiente

$$\int_1 \int_2 f_{12}(r) dV_1 dV_2 = \int_1 \beta dV_1 = \beta \int dV_1 = \beta V.$$

Reemplazando $\frac{1}{2}N(N-1)$ por $\frac{1}{2}N^2$, que es una aproximación válida cuando N es muy grande, tenemos entonces la ec. (12.15) en la forma $\frac{1}{2}N^2 V^{N-1} \beta$, y podemos escribir la integral I en la forma

$$I = V^N + \frac{1}{2}N^2 V^{N-1} \beta = V^N \left(1 + \frac{N^2 \beta}{2V} \right).$$

Sin embargo, si se toma en cuenta los términos sucesivos del desarrollo de $e^{-E_p/kT}$, el resultado que se obtiene para I es

$$I = V^N \left(1 + \frac{N\beta}{2V} \right)^N.$$

En el resultado hallado previamente aparecen precisamente los dos primeros términos del desarrollo del binomio contenido en esta última expresión. La gran función de partición del gas real, ec. (12.12), está ahora dada por la expresión

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{N!} \left[\frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \right]^N \left(1 + \frac{N\beta}{2V} \right)^N \quad (12.17)$$

con una aproximación de primer orden. Esta ecuación se debe comparar con la ec. (12.11) para un gas ideal. El último factor de la ec. (12.17) es la contribución de las fuerzas intermoleculares a la gran función de partición.

Para obtener la ecuación de estado de un gas real, usamos la ec. (12.10). De la expresión (12.17) para \mathcal{Z} resulta

$$\ln \mathcal{Z} = N \ln V + N \ln \left(1 + \frac{N\beta}{2V} \right) + F(T),$$

donde en $F(T)$ incluimos los términos restantes que son constantes o que dependen de la temperatura, los cuales no afectan la derivada en la ec. (12.10). Aproximemos ahora el segundo término, usando $\ln(1+x) \sim x$ en la hipótesis de que $x (= N\beta/2V)$ es pequeño en comparación con la unidad (la cantidad $N\beta/2V$ es del orden de 10^{-4} a temperatura y presión normales). Luego,

$$\ln \mathcal{Z} = N \ln V + \frac{N^2\beta}{2V} + F(T).$$

Por lo tanto

$$\left[\frac{\partial}{\partial V} (\ln \mathcal{Z}) \right]_T = \frac{N}{V} - \frac{N^2\beta}{2V^2}$$

que sustituida en la ec. (12.10), da

$$p = kT \left[\frac{N}{V} - \frac{N^2\beta}{2V^2} \right] = \frac{kNT}{V} - \frac{kTN^2\beta}{2V^2}.$$

Pero recordando que $N = nN_A$ y $R = kN_A$, podemos escribir

$$p = \frac{nRT}{V} - \frac{n^2RTN_A\beta}{2V^2}, \quad (12.18)$$

que constituye la forma virial de la ecuación de estado del gas real, en el primer orden de aproximación. Observemos que en la ec. (12.18) hemos obtenido sólo dos términos; lo cual es consecuencia del tipo de aproximación hecho en el

cálculo de \mathcal{Z} . Al tomar en consideración los términos despreciados resulta el desarrollo virial completo. Comparando la ec. (12.18) con la (12.17), vemos que el segundo coeficiente virial en nuestra aproximación es

$$A(T) = -\frac{1}{3}RTN_A\beta, \quad (12.19)$$

que relaciona directamente la interacción molecular (identificada por β) y el coeficiente virial $A(T)$ (determinado experimentalmente). Esta es la conexión entre la interacción molecular y los coeficientes viriales a que hacíamos referencia anteriormente.

No llevaremos nuestra discusión más adelante; lo que hemos dicho es suficiente para indicar el método de enfoque del problema de la ecuación de estado de un gas real y, en general, de cualquier sistema compuesto de partículas en interacción. Para los líquidos y los sólidos la situación es más compleja y no será discutida en este texto.

EJEMPLO 12.1. Calcular el segundo coeficiente virial en el caso de un gas compuesto de esferas rígidas de radio r_0 no interactuantes.

Solución: Este es un gas real que no está enteramente de acuerdo con la realidad porque se supone que no existen fuerzas intermoleculares hasta tanto los centros de las moléculas no estén a una distancia igual a $2r_0$, estableciéndose una fuerte repulsión en ese instante. De este modo la energía potencial intermolecular es $E_{p12} = 0$ para $r > 2r_0$ y $E_{p12} = \infty$ para $r < 2r_0$, en consecuencia $f_{12} = 0$ para $r > 2r_0$ y $f_{12} = -1$ para $r < 2r_0$. Este potencial de "carozo rígido", como comúnmente se le llama, está representado en la fig. 12-3. Decimos que esta energía potencial no está de acuerdo con la realidad porque no puede producir condensación, ya que carece de mínimo y por consiguiente no hay separación estable entre las moléculas. Empero, nos suministra un modelo simple con el cual verificar nuestras ideas físicas sin complicaciones matemáticas innecesarias. Introduciendo los valores de f_{12} en la ec. (12.16), obtenemos

$$\beta = \int_0^{2r_0} (-1)4\pi r^2 dr = -\frac{4}{3}\pi(2r_0)^3 = -\frac{32\pi r_0^3}{3}.$$

Cuando sustituimos este valor en la ec. (12.19), el segundo coeficiente virial se convierte en

$$A = RTN_A \left(\frac{16\pi r_0^3}{3} \right) = RTb,$$

donde $b = N_A(16\pi r_0^3/3)$ es cuatro veces el volumen de las moléculas que hay en un mol. Entonces la ecuación de estado de un gas compuesto de esferas rígidas es, en primer orden de aproximación,

$$p = \frac{nRT}{V} + \frac{n^2RTb}{V^2}.$$

EJEMPLO 12.2. Extender el resultado del ejemplo anterior al caso en el cual las fuerzas intermoleculares son de atracción pero muy débiles, excepto para $r < 2r_0$, donde se establece una repulsión fuerte, haciendo que las moléculas se comporten como esferas rígidas casi impenetrables.

Solución: Como una extensión lógica del cálculo ejecutado en el ejemplo anterior, podemos introducir fuerzas intermoleculares de atracción bastante débiles, para $r > 2r_0$, como se ilustra en la fig. 12-4. Entonces podemos continuar con la hipótesis de $f_{12} = -1$ para $r < 2r_0$. Pero conforme a la ec. (12.14), si E_{p12}/kT es pequeño

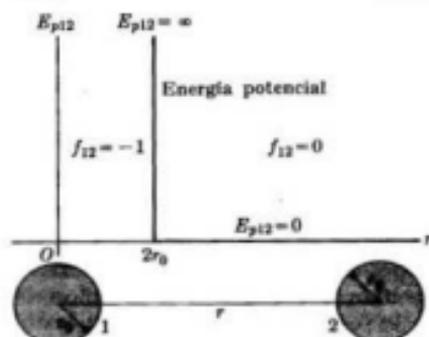


Fig. 12-3. Energía potencial intermolecular de carozo rígido. No hay atracción a ninguna distancia.

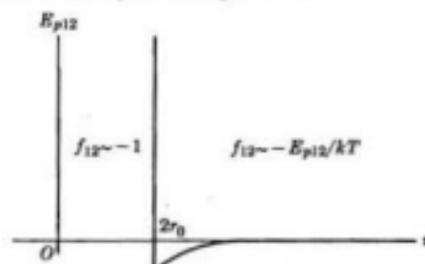


Fig. 12-4. Energía potencial intermolecular con un carozo rígido y atracción débil a mayores distancias.

comparado con la unidad, podemos escribir $f_{12} = -E_{p12}/kT$ para $r > 2r_0$. Por consiguiente, la ec. (12.16) da

$$\beta = \int_0^{2r_0} (-1)4\pi r^2 dr + \int_{2r_0}^{\infty} (-E_{p12}/kT)4\pi r^2 dr = -\frac{32\pi r_0^3}{3} + \frac{\alpha}{kT},$$

donde

$$\alpha = \int_{2r_0}^{\infty} (-E_{p12})4\pi r^2 dr$$

es una cantidad positiva, ya que E_{p12} es negativa (ver fig. 12-4) para $r > 2r_0$. Sustituyendo en la ec. (12.19), usando nuestra definición previa de b y haciendo $a = -\frac{1}{2}N_A^2 \alpha$, obtenemos $A = RTb - a$ para el segundo coeficiente virial. En primer orden de aproximación la ecuación de estado es entonces, usando la ec. (12.7),

$$p = \frac{nRT}{V} + \frac{n^2(RTb - a)}{V^2} + \dots \quad (12.20)$$

Muchos gases reales satisfacen con buena aproximación esta ecuación, especialmente si los valores de n/V son pequeños. Los coeficientes a y b se denominan *constantes de van der Waals*. En la tabla 12-1 aparecen sus valores para varios gases reales.

TABLA 12-1 Constantes de van der Waals

Sustancia	a , $N \text{ m}^4 \text{ kg}^{-2} \text{ mol}^{-2}$	b , $\text{m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
Helio	$3,446 \times 10^8$	0,02370
Hidrógeno	24,68	0,02661
Neón	21,28	0,01709
Nitrógeno	140,4	0,03913
Oxígeno	137,4	0,03183
Amoniaco	421,2	0,03707
Dióxido de carbono	362,8	0,04267
Dióxido de azufre	678,1	0,05636
Agua	551,9	0,03049

12.4 Capacidades calóricas de un gas ideal monoatómico

En la sección 11.7 definimos las capacidades calóricas a volumen constante y a presión constante de una sustancia mediante

$$C_V = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V, \quad C_p = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p, \quad (12.21)$$

donde $H = U + pV$ es la entalpía de la sustancia. Además de la importancia que tienen como coeficientes en varios cálculos prácticos, el cálculo teórico de las capacidades calóricas de una sustancia suministra un medio de verificar la exactitud del modelo escogido para describir la sustancia. En esta sección calcularemos las capacidades calóricas de un gas ideal, y la comparación de estos valores con los observados para los gases reales nos permitirá concluir hasta qué punto el modelo de gas ideal es una buena aproximación.

Consideremos primero un gas ideal monoatómico. La energía interna de tal gas es sólo energía cinética de traslación y está dada por $U = \frac{3}{2}NRT$. Usando la ec. (12.21), obtenemos

$$\begin{aligned} C_V &= \frac{3}{2}R = 12,4715 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \\ &= 2,9807 \text{ cal mol}^{-1} \text{ C}^{-1}. \end{aligned} \quad (12.22)$$

Teniendo en cuenta la ec. (12.6), ($pV = NRT$), obtenemos para la entalpía de un gas ideal:

$$H = U + pV = \frac{5}{2}NRT.$$

La ec. (12.21) da entonces

$$\begin{aligned} C_p &= \frac{5}{2}R = 20,7858 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \\ &= 4,9678 \text{ cal mol}^{-1} \text{ C}^{-1}. \end{aligned} \quad (12.23)$$

Por consiguiente, todos los gases ideales monoatómicos tienen las mismas capacidades calóricas, independientemente de la estructura de los átomos. Podemos observar que según los resultados anteriores,

$$C_p - C_V = R, \quad (12.24)$$

de modo que C_p es mayor que C_V en la cantidad R . La razón de esto es que C_V está relacionado solamente con la variación de la energía interna, mientras que C_p incluye, además, el trabajo de expansión del gas cuando su temperatura aumenta 1 grado a presión constante, que es igual a R . En efecto, cuando la presión del gas es constante, $p dV = N R dT$, y si el aumento de temperatura es un grado, el trabajo realizado es

$$W_p = \int p dV = \int_T^{T+1} N R dT = N R.$$

En consecuencia, el trabajo por mol hecho por el gas es R . Por esta prueba vemos que la ec. (12.24) es válida para todos los gases ideales, sean o no monoatómicos.

Otra relación entre las capacidades calóricas de un gas ideal monoatómico es

$$\gamma = C_p/C_V = \frac{5}{3} = 1,667. \quad (12.25)$$

La mayoría de los gases monoatómicos siguen esta relación con mucha aproximación, como se muestra en la tabla 12-3 (al final de este capítulo).

EJEMPLO 12.3. Ecuación de estado de un gas ideal en función de la presión, el volumen y la entropía.

Solución: Como la entropía es una propiedad del estado de un gas, se puede usar como una variable para definir el estado de un gas lo mismo que la presión, el volumen o la temperatura. De la ecuación de estado, $pV = nRT$ resulta

$$\ln p + \ln V = \ln nR + \ln T.$$

Por diferenciación se obtiene

$$\frac{dp}{p} + \frac{dV}{V} = \frac{dT}{T}. \quad (12.26)$$

Para el caso de un gas ideal, en el cual la energía interna depende solamente de la temperatura, tenemos que $dU = nC_V dT$. Luego, la primera ley de la termodinámica, ec. (11.37), $dU = T dS - p dV$, da

$$nC_V dT = T dS - p dV,$$

de la cual (dividiendo por T y usando la ecuación de estado) obtenemos

$$nC_V \frac{dT}{T} = dS - nR \frac{dV}{V}. \quad (12.27)$$

Eliminando dT/T con las ecs. (12.26) y (12.27) y usando la relación $C_p - C_V = R$, tenemos

$$\frac{dp}{p} + \gamma \frac{dV}{V} = \frac{dS}{nC_V},$$

donde $\gamma = C_p/C_V$. Integrando, se obtiene

$$\ln p + \gamma \ln V = \frac{S}{nC_V} + \ln(\text{const})$$

o también

$$pV^\gamma = (\text{const})e^{S/nC_V}, \quad (12.28)$$

que es la ecuación de estado de un gas ideal en función de p , V y S . Si una transformación es adiabática y reversible (esto es, si es isoentrópica), la ecuación se reduce a

$$pV^\gamma = \text{const}. \quad (12.29)$$

Esta ecuación tiene muchas aplicaciones en los procesos que ocurren en gases.

12.5 Capacidades calóricas de un gas ideal poliatómico

Cuando el gas ideal no es monoatómico, debemos tomar en cuenta la estructura de las moléculas para calcular las capacidades calóricas. La energía de una molécula poliatómica está compuesta de tres términos: energía de traslación, energía

de rotación y energía de vibración; esto es,*

$$E_{\text{molécula}} = E_{\text{tr}} + E_{\text{rot}} + E_{\text{vib}} \quad (12.30)$$

Ignoraremos la energía electrónica de las moléculas porque ésta rara vez participa de la excitación térmica del gas. La excitación electrónica requiere una energía del orden de 1 eV al menos; esta energía es aproximadamente 40 veces mayor que la energía cinética térmica media a temperatura ambiente (298 K) y, por lo tanto, se necesita una temperatura del orden de 10^4 K para producir un número apreciable de moléculas en estados electrónicos excitados (ver el ejemplo 10.4). Desde luego, a estas temperaturas la mayoría de las moléculas del gas se disocian por choques.

Por otra parte, la energía cinética rotacional de las moléculas poliatómicas es del orden de 10^{-4} eV y, por lo tanto, las moléculas pueden ser fácilmente llevadas a niveles rotacionales excitados, aun a temperaturas bajas en comparación con la temperatura ambiente. Las energías vibracionales están en el intervalo 10^{-2} eV a 10^{-1} eV y, por lo tanto, a temperatura ambiente se puede encontrar moléculas en unos pocos estados vibracionales excitados de baja energía.

Para calcular la contribución de los movimientos internos a las capacidades caloríficas de un gas poliatómico, debemos primero (usando métodos estadísticos) hallar la distribución de las moléculas del gas en los estados rotacionales y vibracionales. Limitémosnos al caso más simple de un gas diatómico. La energía cinética rotacional de una molécula diatómica es, de acuerdo a la ec. (5.12),

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}$$

donde I es el momento de inercia de la molécula respecto a un eje perpendicular que pasa por el centro de masa y l determina el momentum angular de la molécula respecto al centro de masa. Como se explicó en la sección 5.7 el momentum angular puede tener $2l + 1$ orientaciones diferentes, todos con la misma energía, de modo que el factor g_l usado en la ec. (10.23) es $2l + 1$. En el equilibrio, la distribución de las moléculas entre los estados rotacionales disponibles es entonces, usando la estadística de Maxwell-Boltzmann,

$$n_{\text{rot}} = \frac{N}{Z_{\text{rot}}} (2l+1) e^{-\hbar^2 l(l+1)/2IkT} = \frac{N}{Z_{\text{rot}}} (2l+1) e^{-R(l+1)\Theta_r/T}, \quad (12.31)$$

donde $\Theta_r = \hbar^2/2Ik$ se denomina *temperatura característica de rotación*. En la tabla 12-2 aparecen los valores de Θ_r para unos pocos gases diatómicos. Observando esta tabla, podemos ver que aun para el hidrógeno estos valores son muy pequeños comparados con la temperatura ambiente. Los valores de n_{rot} están

* Supondremos para simplificar que las tres energías son aditivas. Empero, estrictamente hablando, hay algunos términos cruzados entre las energías rotacional y vibracional.

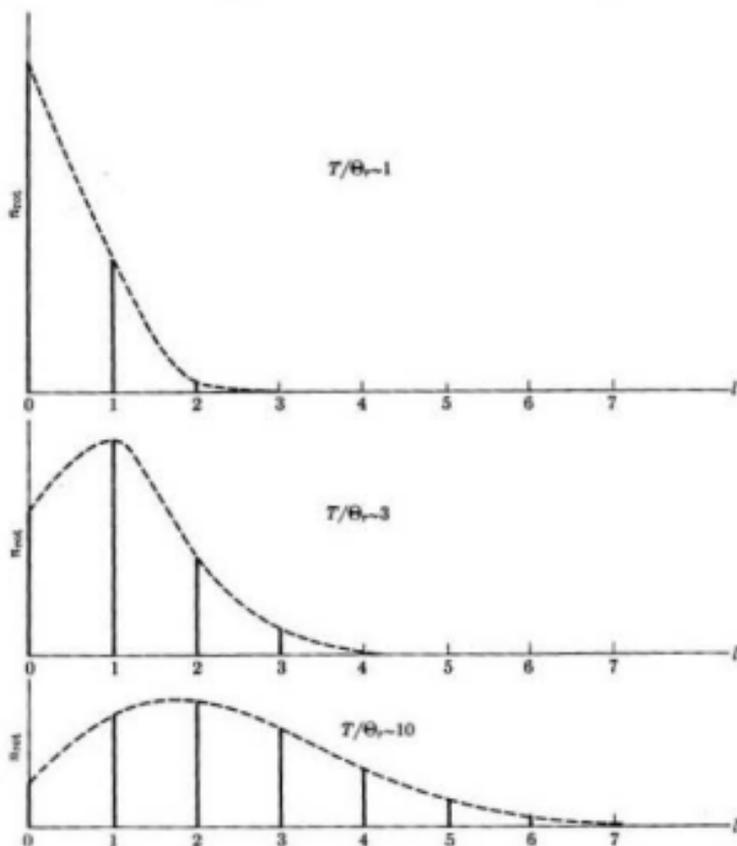


Fig. 12-5. Ocupación de los niveles rotacionales en un gas diatómico para tres valores de T/Θ_r .

ilustrados en la fig. 12-5 para tres valores de T/Θ_r . A medida que T aumenta, el número de moléculas en estados rotacionales excitados también aumenta.

La función de partición rotacional Z_{rot} es, de acuerdo a la definición general, ec. (10.22):

$$Z_{rot} = \sum_l (2l + 1) e^{-l(l+1)\Theta_r/T} \quad (12.32)$$

Una vez calculada la función de partición rotacional Z_{rot} , podemos obtener la energía rotacional U_{rot} del gas usando la ec. (10.24):

$$U_{rot} = kNT^2 \frac{d}{dT} (\ln Z_{rot}). \quad (12.33)$$

TABLA 12-2 Temperaturas características de rotación y de vibración de moléculas diatómicas

Sustancia	Θ_r , K	Θ_v , K
Hidrógeno	85,5	6140
Monóxido de carbono	2,77	3120
Oxígeno	2,09	2260
Cloro	0,347	810
Bromo	0,117	470
Sodio	0,224	230
Potasio	0,081	140

La energía interna total del gas es

$$U = U_{tr} + U_{rot} = \frac{3}{2}NRT + U_{rot} \quad (12.34)$$

ya que $U_{tr} = \frac{3}{2}NRT$. Para obtener la capacidad calórica C_V a volumen constante, sustituimos la ec. (12.34) en la ec. (12.21). La capacidad calórica aumenta gradualmente con la temperatura, como se ilustra en la fig. 12-6, debido a que se necesita energía no sólo para aumentar la energía de traslación de las moléculas,

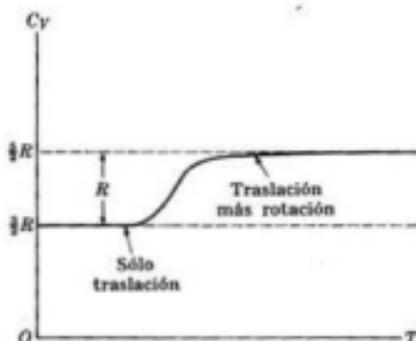


Fig. 12-6. Variación de la capacidad calórica a volumen constante de un gas diatómico debida a la excitación de los niveles rotacionales.

sino también para aumentar su energía de rotación llevando más moléculas a niveles rotacionales excitados. La fig. 12-6 indica que, a temperaturas altas respecto a Θ_r , C_V se mantiene prácticamente igual a $\frac{3}{2}R$. Podemos explicar esto como sigue: a temperaturas mucho más altas respecto a Θ_r (de modo que Θ_r/T es muy pequeño), un gran número de estados rotacionales están ocupados. Además, el espaciamiento de los niveles rotacionales se hace muy pequeño comparado con la energía térmica, y podemos calcular Z_{rot} reemplazando la suma de la ec. (12.32) por una integración. Además sustituimos $2l + 1$ por $2l$ y $l(l + 1)$ por l^2 . Entonces,

$$Z_{rot} = \int_0^{\infty} 2l e^{-(\Theta_r/T)l^2} dl = T/\Theta_r$$

Luego, $\ln Z_{\text{rot}} = \ln T - \ln \Theta_r$, y la ec. (12.33) da

$$U_{\text{rot}} = kNT = \mathcal{N}RT, \quad (12.35)$$

ya que $kN = \mathcal{N}R$. Por lo tanto, la energía total para $T \gg \Theta_r$ es

$$U = U_{\text{tr}} + U_{\text{rot}} = \frac{5}{2}\mathcal{N}RT + \mathcal{N}RT = \frac{7}{2}\mathcal{N}RT. \quad (12.36)$$

Sustituyendo la ec. (12.36) en la ec. (12.21), obtenemos

$$C_V = \frac{7}{2}R. \quad (12.37)$$

Así, a temperaturas altas comparadas con Θ_r , la energía cinética rotacional de una molécula diatómica contribuye en una cantidad R a la capacidad calórica a volumen constante de un gas diatómico ideal. El mismo resultado es cierto para los gases compuestos de moléculas poliatómicas lineales.

Calculemos ahora la energía vibracional de un gas diatómico ideal. Supongamos que las vibraciones son armónicas simples; entonces, los niveles de energía vibracional, de acuerdo a la ec. (5.16), están dados por $E_{\text{vib}} = (v + \frac{1}{2})h\omega$. Por consiguiente, si usamos nuevamente la estadística de Maxwell-Boltzmann con $g_1 = 1$, que corresponde a este caso, la ocupación de los niveles vibracionales es

$$n_{\text{vib}} = \frac{N}{Z_{\text{vib}}} e^{-(v+1/2)h\omega/kT} = \frac{N}{Z_{\text{vib}}} e^{-(v+1/2)\Theta_v/T}, \quad (12.38)$$

donde $\Theta_v = h\omega/k$ se denomina *temperatura característica de vibración*. Su valor se da en la tabla 12-2 para algunas moléculas diatómicas. Observar que en todos los casos Θ_v es mayor que Θ_r . También en la mayoría de los casos Θ_v es mayor que la temperatura ambiente. La fig. 12-7 muestra los valores de n_{vib} para tres valores de T/Θ_v . A medida que T aumenta, el número de moléculas en los niveles vibracionales excitados también aumenta; pero debido a que $\Theta_v > \Theta_r$, los niveles vibracionales más bajos comienzan a estar apreciablemente poblados a temperaturas a las cuales muchos niveles rotacionales están ya ocupados. En algunos casos las moléculas se disocian a energías más bajas que aquellas a las cuales los niveles vibracionales más altos contribuyen apreciablemente a la energía interna.

La función de partición vibracional Z_{vib} es

$$Z_{\text{vib}} = \sum_v e^{-(v+1/2)\Theta_v/T} = e^{-\Theta_v/2T} \left(\sum_v e^{-v\Theta_v/T} \right). \quad (12.39)$$

Usando la expresión para la suma de una progresión geométrica infinita decreciente,

$$\sum x^n = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots = \frac{1}{1-x}, \quad \text{para } x < 1,$$

y observando que en nuestro caso $x = e^{-\Theta_v/T}$, tenemos para la función de partición vibracional

$$Z_{\text{vib}} = \frac{e^{-\Theta_v/2T}}{1 - e^{-\Theta_v/T}}. \quad (12.40)$$

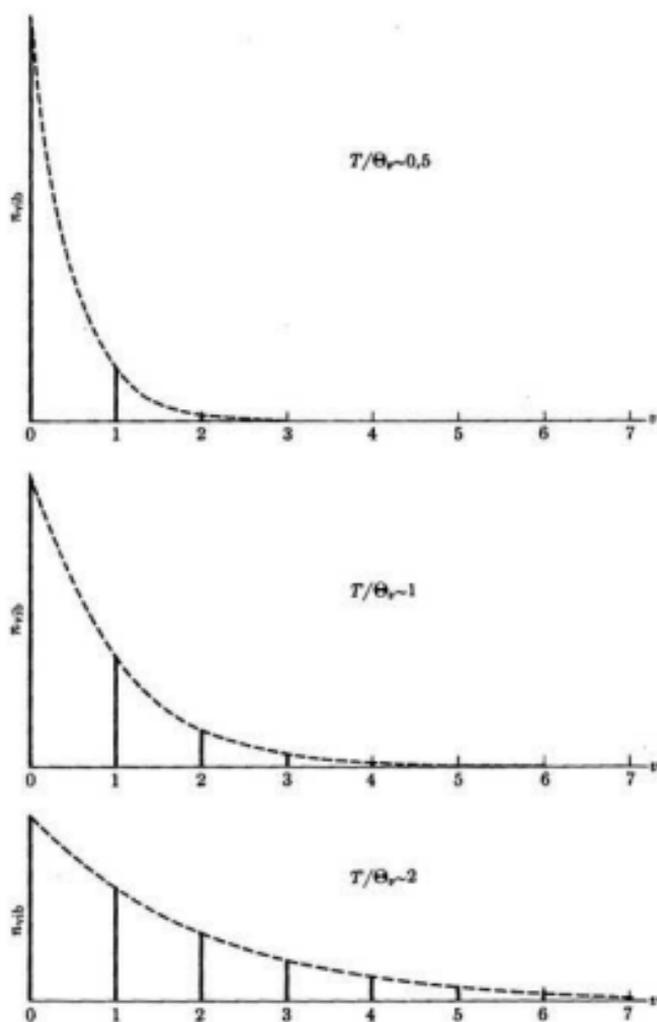


Fig. 12-7. Ocupación de los niveles vibracionales en un gas diatómico para tres valores de T/Θ_v .

De este resultado obtenemos

$$\ln Z_{\text{vib}} = -\Theta_v/2T - \ln(1 - e^{-\Theta_v/T})$$

y también

$$\frac{d}{dT} (\ln Z_{\text{vib}}) = \frac{\Theta_v}{2T^2} + \frac{\Theta_v/T^2}{e^{\Theta_v/T} - 1}.$$

Empleando la ec. (10.24), se obtiene la siguiente expresión para la energía vibracional del gas:

$$U_{\text{vib}} = kNT^2 \frac{d}{dT} (\ln Z_{\text{vib}}) = \frac{1}{2}kN\Theta_v + \frac{kN\Theta_v}{e^{\Theta_v/T} - 1}. \quad (12.41)$$

Recordando de la sección 5.8 que $\frac{1}{2}k\Theta_v = \frac{1}{2}h\nu_0$ es la energía vibracional de punto cero correspondiente a una molécula, reconocemos que el término $\frac{1}{2}kN\Theta_v$ es la energía total vibracional de punto cero que corresponde al gas. Esta energía constante, aunque puede tener un valor grande, no afecta ningún proceso en el cual estén involucradas solamente diferencias de energía. Para calcular la capacidad calórica a volumen constante, debemos agregar U_{vib} a $U_{\text{tr}} + U_{\text{rot}}$, y aplicar de nuevo la ec. (12.21). Para temperaturas altas, la cantidad Θ_v/T es muy pequeña; en consecuencia, usando la aproximación $e^x = 1 + x + \dots$ para x pequeño, podemos escribir

$$e^{\Theta_v/T} - 1 = \left(1 + \frac{\Theta_v}{T} + \dots\right) - 1 = \frac{\Theta_v}{T} + \dots, \quad (12.42)$$

de modo que la ecuación (12.41) se convierte en

$$U_{\text{vib}} = \frac{1}{2}kN\Theta_v + kNT = kNT(1 + \Theta_v/2T). \quad (12.43)$$

Entonces las vibraciones moleculares contribuyen a la energía interna en una cantidad cuyo valor, para temperaturas mayores que Θ_v , es

$$U_{\text{vib}} = kNT = NRT. \quad (12.44)$$

Esta energía resulta ser igual a la energía rotacional dada por la ec. (12.35). A temperaturas muy altas, el valor asintótico de la energía total es

$$U = U_{\text{tr}} + U_{\text{rot}} + U_{\text{vib}} = \frac{3}{2}NRT + NRT + NRT = \frac{7}{2}NRT,$$

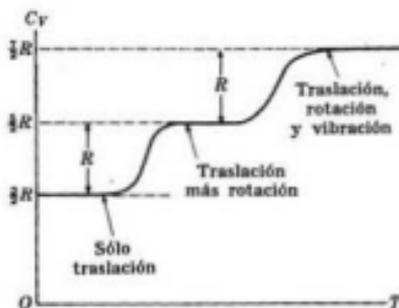
que corresponde a una capacidad calórica total

$$C_V = \frac{7}{2}R. \quad (12.45)$$

Comparando este valor con la ec. (12.37), concluimos que a temperaturas altas las vibraciones de las moléculas diatómicas contribuyen con una cantidad R al calor específico a volumen constante del gas diatómico.

La fig. 12-8 muestra la forma general en que varía C_V para un gas diatómico cuando la temperatura aumenta. Esta variación está bien confirmada por medidas experimentales.

Fig. 12-8. Variación de la capacidad calórica a volumen constante de un gas diatómico debida a la excitación de los niveles rotacionales y vibracionales.



12.6 Principio de equipartición de la energía

La energía cinética media de las moléculas de un gas ideal, debida a sus movimientos de traslación, es

$$\bar{E} = \frac{3}{2}kT. \quad (12.46)$$

Ahora bien, el movimiento de traslación está asociado con las tres coordenadas necesarias para fijar el centro de masa de la molécula. En virtud de la simetría del espacio, podemos entonces suponer que la energía cinética media correspondiente al movimiento según cada uno de los ejes de coordenadas es

$$\epsilon = \frac{1}{2}kT. \quad (12.47)$$

Por consiguiente, si un gas estuviera restringido de modo que sus moléculas se moviesen sólo en un plano con dos grados de libertad (dos coordenadas), sería de esperar que la energía cinética media de las moléculas fuera dos veces ϵ , o sea kT .

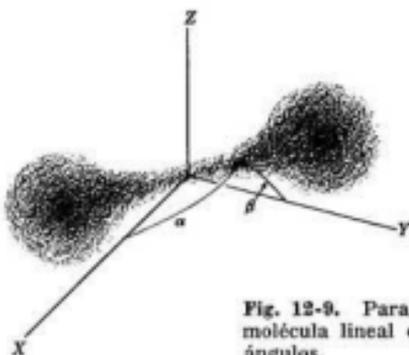


Fig. 12-9. Para fijar la orientación de una molécula lineal en el espacio se necesitan dos ángulos.

Consideremos ahora la rotación de una molécula diatómica (o una lineal). La orientación del eje de la molécula (fig. 12-9) está determinada por los ángulos α y β que forma con dos ejes de coordenadas cualesquiera, tales como X e Y . Entonces la rotación de una molécula diatómica (y en general de cualquier molécula lineal) tiene dos grados de libertad. Podemos así esperar, por extensión de la ec. (12.47) al movimiento rotacional de una molécula, que la energía cinética media de rotación de una molécula es

$$\bar{E}_{\text{rot}} = 2\epsilon = kT,$$

y que la energía total de rotación de un gas compuesto de moléculas diatómicas (o lineales) será

$$U_{\text{rot}} = N\bar{E}_{\text{rot}} = kNT = nRT.$$

Que está de acuerdo con el resultado dado en la ec. (12.35), la cual es válida para temperaturas altas con respecto a Θ_p .

Análogamente, el movimiento vibracional de una molécula diatómica tiene sólo un grado de libertad, y la energía vibracional media de tal molécula será $\epsilon = \frac{1}{2}kT$; sin embargo, en este tipo de movimiento tenemos tanto energía cinética como potencial y sus valores medios son iguales. En consecuencia la energía vibracional media de cada molécula es dos veces la energía cinética por grado de libertad, o sea

$$\bar{E}_{\text{vib}} = 2\epsilon = kT,$$

y la energía total de vibración del gas diatómico será

$$U_{\text{vib}} = N\bar{E}_{\text{vib}} = kNT = nRT$$

que de nuevo coincide con el resultado dado en la ec. (12.44), que es válida para temperaturas altas respecto a Θ_p .

Podemos entonces establecer una regla muy importante, llamada *principio de equipartición de la energía*:

A temperaturas suficientemente altas como para que kT sea grande respecto al espaciamiento de los niveles de energía asociados con un cierto grado de libertad de las moléculas, la energía molecular media por grado de libertad es $\frac{1}{2}kT$. (La energía vibracional contribuye con la cantidad de energía kT por grado de libertad vibracional debido a la energía potencial involucrada.)

Este principio nos ayudará a extender la discusión de la sección precedente a las moléculas poliatómicas. Consideremos una molécula poliatómica que tiene 3 grados de libertad para el movimiento de traslación y f grados de libertad internos para los movimientos de rotación y de vibración (contando dos grados por cada vibración). A temperaturas altas, la energía molecular media de un gas compuesto de estas moléculas está dada por

$$\bar{E} = (3 + f)\epsilon = \frac{3 + f}{2} kT,$$

y la energía total interna del gas está dada por

$$U = N\bar{E} = \frac{3 + f}{2} kNT = \frac{3 + f}{2} nRT.$$

A temperaturas altas, la capacidad calórica a volumen constante del gas tiende al valor

$$C_V = \frac{3 + f}{2} R. \quad (12.48)$$

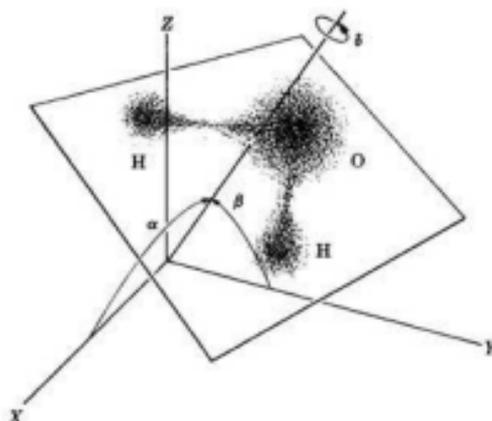


Fig. 12-10. Para fijar la orientación de una molécula no lineal, tal como el H_2O , se necesitan tres ángulos.

Ahora bien, según la ec. (12.24), $C_p - C_V = R$ o $C_p = C_V + R$, que es válida para todos los gases reales independientemente de su estructura molecular. Si usamos la ec. (12.48) para C_V , obtenemos

$$C_p = \frac{5 + f}{2} R. \quad (12.49)$$

El cociente $\gamma = C_p/C_V$ tiene entonces el valor

$$\gamma = \frac{C_p}{C_V} = \frac{5 + f}{3 + f}. \quad (12.50)$$

En estas fórmulas, f realmente corresponde sólo a aquellos grados de libertad para los cuales un gran número de estados excitados están ocupados a la temperatura dada. Luego, si T es mayor que θ_r pero menor que θ_v , f corresponde sólo a los grados de libertad rotacionales. Pero si T es mayor que θ_v , f corres-

TABLA 12-3 Relación entre las capacidades calóricas de algunos gases

Sustancia	γ	Sustancia	γ
Helio	1,659	Cloro	1,355
Neón	1,64	Sulfuro de hidrógeno	1,32
Argón	1,668	Vapor de agua	1,324
Hidrógeno	1,410	Amoníaco	1,310
Oxígeno	1,404	Dióxido de carbono	1,304
Nitrógeno	1,404	Etileno	1,255
Monóxido de carbono	1,404		

ponde a todos los grados de libertad. Para un gas monoatómico $f = 0$ y $\gamma = \frac{5}{3} = 1,67$ como se indicó previamente en la ec. (12.25). Para un gas diatómico (y en general para cualquier molécula lineal en el estado gaseoso), tenemos a temperatura ambiente (cuando sólo cuenta el movimiento rotacional), que $f = 2$ y $\gamma = \frac{7}{5} = 1,40$. Si la molécula no es lineal sino plana, como el agua (H_2O), o tridimensional, como el amoníaco (NH_3), hay tres grados de libertad rotacionales porque, además de los ángulos α y β que se necesitan para fijar los ejes (fig. 12-10), necesitamos el ángulo δ de rotación alrededor del eje. Luego $f = 3$ y $\gamma = \frac{8}{5} = 1,33$. Por lo tanto, la medición de γ puede suministrar información importante acerca de la estructura interna de una molécula. Por ejemplo, en la tabla 12-3, que da el valor de γ para varios gases, vemos que H_2O es plana y no lineal y que todos los gases nobles son monoatómicos ($f = 0$). La molécula de CO_2 es una excepción notable porque aunque es lineal, tiene $\gamma = 1,304$, cercano al valor de γ para una molécula plana. Sabemos que la molécula de CO_2 es lineal porque su momento dipolar eléctrico es nulo. La discrepancia aparente se atribuye a que el modo vibracional flectante en el CO_2 tiene una energía de vibración relativamente pequeña. Esta vibración agrega dos grados de libertad, por lo que el cociente entre las capacidades calóricas del CO_2 será cercano a $\frac{9}{7} = 1,285$.

Bibliografía

1. "The Definition of the Perfect Gas", P. Landsberg, *Am. J. Phys.* **29**, 695 (1961)
2. "Energy Equipartition: A Restatement", W. Lawless, *Am. J. Phys.* **32**, 686 (1964)
3. *Introduction to Chemical Physics*, J. Slater. McGraw-Hill, New York, 1964, caps. 9 y 12
4. *Statistical Physics*, G. Wannier. John Wiley, New York, 1966, parte I
5. *The Feynman Lectures on Physics*, vol. I, R. Feynman, R. Leighton y M. Sands. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1963, cap. 41
6. *Molecular Thermodynamics*, J. Fay. Addison-Wesley, Reading, Mass, 1965
7. *A Source Book in Physics*, W. Magie. Harvard University Press, Cambridge, Mass., 1963, pág. 247 (Bernoulli)

Problemas

12.1 Usando el desarrollo virial para la ecuación de estado de un gas en la forma dada por la ec. (12.20), calcular el trabajo realizado por un gas cuando se expande isotérmicamente desde el volumen V_1 al volumen V_2 . Aplicar el resultado a un mol de hidrógeno a 300 K cuando se expande desde un volumen de 3×10^{-2} m³ a un volumen de 5×10^{-2} m³. Comparar con el valor que se obtiene con la expresión para el gas ideal.

12.2 Una ecuación empírica propuesta por van der Waals para describir un gas real, es

$$\left(p + \frac{N^2a}{V^2}\right)(V - Nb) = nRT.$$

Escribir esta ecuación en la forma virial y compararla con la ec. (12-20).

12.3 La *temperatura de Boyle* de un gas real es aquella para la cual el segundo coeficiente virial es nulo. Probar que la temperatura de Boyle es igual a a/Rb . Calcular la temperatura de Boyle para algunos de los gases que aparecen en la tabla 12-1. [Observación: La temperatura de Boyle es aquella a la cual se puede considerar que un gas real obedece la ecuación del gas ideal, hasta el segundo orden de aproximación.]

12.4 El coeficiente de dilatación cúbica a presión constante de una sustancia se define por

$$\beta = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p.$$

Hallar β para (a) un gas ideal y (b) un gas real que obedece la ecuación de van der Waals dada en el problema 12.2.

12.5 El módulo de elasticidad de volumen a temperatura constante de una sustancia se define como

$$\kappa_T = - \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T.$$

Hallar κ_T para (a) un gas ideal y (b) un gas real que sigue la ecuación de van der Waals dada en el problema 12.2.

12.6 Una ecuación empírica de estado para gases reales, propuesta por Dieterici, es $p(V - Nb)e^{Na/VRT} = nRT$. Escri-

bir la ecuación en la forma virial y compararla con la ec. (12.20).

12.7 Expresar la ecuación de un proceso isoentrópico en un gas ideal en función de (a) la presión y la temperatura, (b) el volumen y la temperatura.

12.8 Mostrar que el trabajo realizado por un gas ideal durante una transformación isoentrópica (o adiabática reversible) es

$$nR(T_1 - T_2)/(\gamma - 1).$$

12.9 Comparar en un diagrama p - V las pendientes de las transformaciones isoentrópicas e isotérmicas de un gas ideal, en el mismo punto. De la comparación concluir que en una expansión isoentrópica de un gas ideal la temperatura disminuye. Explicar el porqué de esto.

12.10 Hacer el gráfico en un diagrama p - V de un ciclo de Carnot cuando la sustancia es un gas ideal. Probar que, si V_1 , V_2 , V_3 y V_4 son los volúmenes del gas al final de cada transformación, se tiene

$$V_2/V_1 = V_3/V_4.$$

12.11 Calcular el trabajo realizado por el gas durante cada una de las transformaciones que componen un ciclo de Carnot y mostrar que el trabajo neto realizado es

$$W = nR(T_2 - T_1) \ln V_2/V_1.$$

Verificar luego que se satisface la ec. (11.47). [Sugerencia: Usar el resultado del problema 12.10.]

12.12 El módulo de compresión adiabática se define como

$$\kappa_s = - \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_s.$$

Hallar κ_s para un gas ideal. La propagación de ondas elásticas en un gas es un proceso adiabático y la velocidad de propagación está dada por $v = \sqrt{\kappa_s/\rho}$, donde ρ es la densidad. Explicar cómo, midiendo v , se puede calcular γ . Mostrar que v depende sólo de la temperatura absoluta.

12.13 Un gas ideal a 300 K ocupa un volumen de $0,5 \text{ m}^3$ a una presión de 2 atm. El gas se expande adiabáticamente hasta que su volumen es $1,2 \text{ m}^3$. A continuación se lo comprime *isobáricamente* hasta que alcanza su volumen original. Finalmente se aumenta la presión *isocóricamente* hasta que el gas retorna a su estado inicial. (a) Representar gráficamente el proceso en un diagrama p - V . (b) Determinar la temperatura al final de cada transformación. (c) Hallar el trabajo realizado durante el ciclo. Tomar $\gamma = 1,4$.

12.14 Un gas ideal a 300 K ocupa un volumen de $0,5 \text{ m}^3$ a una presión de 2 atm. El gas se expande adiabáticamente hasta que su volumen es $1,2 \text{ m}^3$. A continuación se lo comprime isotérmicamente hasta que alcanza su volumen original. Finalmente se aumenta la presión isocóricamente hasta que el gas retorna a su estado inicial. (a) Representar gráficamente el proceso en un diagrama p - V . (b) Determinar la temperatura al final de la transformación adiabática. (c) Hallar el trabajo realizado durante el ciclo. Tomar $\gamma = 1,4$.

12.15 Un gas está inicialmente a $T_1 = -300 \text{ K}$, $p_1 = 3 \text{ atm}$ y $V_1 = 4 \text{ m}^3$. El gas se expande isotérmicamente hasta un volumen de 16 m^3 . Ésta es seguida por un proceso isocórico hasta una presión tal que una compresión adiabática lleva el gas a su estado original. Suponer que todos los procesos son reversibles: (a) representar el ciclo sobre diagramas p - V y T - S y señalar los valores numéricos en los puntos extremos de cada proceso. (b) Calcular el trabajo realizado y el cambio de entropía durante cada proceso y en todo el ciclo. Tomar $\gamma = 1,4$.

12.16 Estimar el error que se comete cuando al calcular Z_{rot} se reemplaza $2l + 1$ por $2l$ y $k(l + 1)$ por l^2 en la ec. (12.32).

12.17 Calcular el porcentaje de moléculas de un gas diatómico en los estados rotacionales fundamental ($l = 0$) y primero excitado ($l = 1$) a las temperaturas $T = \Theta_r$ y $T = 2\Theta_r$.

12.18 Comparar el número de moléculas de hidrógeno por mol en el segundo estado rotacional excitado ($l = 2$) con el número de moléculas de cloro por mol en el mismo estado excitado cuando la temperatura es de 300 K.

12.19 Comparar el número de moléculas de hidrógeno por mol en el segundo estado vibracional excitado ($v = 2$) con el número de moléculas de cloro en el mismo estado excitado cuando la temperatura es de 300 K.

12.20 Considerar un mol del gas CO. Calcular el número de moléculas en los tres primeros estados de energía vibracional a temperatura ambiente (300 K) y a 1000 K.

12.21 Demostrar que la capacidad calórica vibracional de un gas a volumen constante está dada por

$$C_{V, \text{vib}} = R \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2 \frac{e^{h\nu/kT}}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2}.$$

Hallar los valores límites para $T \ll \Theta_v$ y $T \gg \Theta_v$.

12.22 Usando el resultado del problema 11.13, probar que la entropía de un gas diatómico debida a las rotaciones moleculares es

$$S_{\text{rot}} = kN[1 + \ln(T/\Theta_r)].$$

[Nota: Se puede demostrar que debemos usar $T/2\Theta_r$ cuando la molécula es homonuclear; esto se debe a que los estados distinguibles se reducen a la mitad como resultado de la simetría de la molécula.]

12.23 Usando el resultado del problema 11.13, probar que la entropía de un gas diatómico debida a las vibraciones moleculares es

$$S_{\text{vib}} = kN[(\Theta_v/T)(e^{\Theta_v/T} - 1) - \ln(1 - e^{-\Theta_v/T})].$$

Verificar que para temperaturas bajas, S_{vib} tiende a cero, mientras que para temperaturas altas S_{vib} se aproxima al valor

$$kN[1 + \ln(T/\Theta_v)].$$

ESTADISTICA CUANTICA

- 13.1 *Introducción*
- 13.2 *Ley de distribución de Fermi-Dirac*
- 13.3 *Gas de electrones*
- 13.4 *Aplicación de la estadística de Fermi-Dirac a los electrones de los metales*
- 13.5 *Ley de distribución de Bose-Einstein*
- 13.6 *Gas de fotones*
- 13.7 *Capacidad calórica de los sólidos*
- 13.8 *Gas ideal en la estadística cuántica*
- 13.9 *Comparación de las tres estadísticas*

13.1 Introducción

En el capítulo 10 nos ocupamos de la estadística clásica, que se caracteriza por el método de cálculo de la probabilidad de una partición determinada indicado en la ec. (10.8), y por la ley de distribución de Maxwell-Boltzmann, ec. (10.9), para la partición más probable o de equilibrio. Al tratar la estadística clásica ignoramos cualquier consideración de simetría relacionada con la distribución de las partículas en los diferentes estados asociados con cada nivel de energía accesible a las partículas. Sin embargo, puede haber, como dijimos en el capítulo 4, ciertas restricciones en el número de modos diferentes en que un grupo de partículas se puede distribuir entre las funciones de onda disponible asociadas con cada estado de energía. Es evidente que estas restricciones de origen cuántico afectan la probabilidad de una partición determinada. La teoría que toma en cuenta estas consideraciones de simetría se denomina *estadística cuántica*. Hay dos clases de estadística cuántica. Una es para las partículas que obedecen el principio de exclusión y que están, por lo tanto, descritas por funciones de onda *antisimétricas*; se denomina *estadística de Fermi-Dirac* y las partículas se llaman *fermiones*. La segunda estadística es para partículas que no están restringidas por el principio de exclusión y están descritas por funciones de onda *simétricas*; se denomina *estadística de Bose-Einstein* y las partículas se llaman *bosones*. En las dos clases de estadística cuántica se supone que las partículas son idénticas e indistinguibles. La estadística clásica y las dos clases de estadística cuántica dan prácticamente los mismos resultados a temperaturas altas y densidades bajas.

En este capítulo trataremos brevemente ambas clases de estadística cuántica y las aplicaremos a algunos problemas físicos importantes.

13.2 Ley de distribución de Fermi-Dirac

Calculemos nuevamente la probabilidad de una partición de un sistema de partículas suponiendo que las mismas son *idénticas e indistinguibles*. Supongamos además que *las partículas obedecen el principio de exclusión* de modo que no puede haber dos partículas en el mismo estado dinámico y la función de onda del sistema completo debe ser antisimétrica. Las partículas que satisfacen estas condiciones se denominan *fermiones* en honor al físico norteamericano nacido en Italia Enrico Fermi (1901-1954), quien fue el primero en estudiar estos sistemas. Se ha encontrado experimentalmente que todas las partículas con espín $\frac{1}{2}$ son fermiones.

Para determinar los modos diferentes y distinguibles en que se puede disponer un sistema de fermiones para una partición dada, debemos revisar nuestra definición de la probabilidad intrínseca g_i . En la estadística cuántica, g_i está dada por los diferentes estados cuánticos que corresponden a una energía determinada, o sea por la degeneración del estado de energía. A cada estado cuántico corresponde una función de onda de las partículas. Estas funciones de onda están determinadas a su vez por cada uno de los juegos posibles de números cuánticos correspondientes a un nivel de energía dado. Por ejemplo, en el caso de par-

tículas de espín $\frac{1}{2}$ que no están en un campo magnético, cada una de las partículas puede estar en cada estado de energía con el espín para arriba o para abajo ($m_s = \pm \frac{1}{2}$) por lo que $g_i = 2$. En el movimiento en un campo central, la energía es independiente de la orientación del momentum angular orbital, lo cual introduce una degeneración $2l + 1$ que es el valor de g para ese estado de energía. Usamos este resultado en la sección 12.5 al discutir la función de partición rotacional de las moléculas. Si las partículas tienen espín, la degeneración total es $2(2l + 1)$. Si hay además varios estados de momentum angular compatibles con la misma energía, como en un campo coulombiano, resultan valores mayores de g_i . Como el principio de exclusión prohíbe que dos partículas estén en el mismo estado de energía con los mismos números cuánticos, *los g_i dan el número máximo de partículas (fermiones) que se puede acomodar en un nivel de energía sin violar el principio de exclusión.* Por lo tanto, en una partición determinada los valores de n_i no pueden exceder el correspondiente g_i de cada nivel de energía, es decir: $n_i \leq g_i$.

Para llenar un nivel de energía E_i con n_i partículas, notemos que se puede colocar la primera partícula en cualquiera de los g_i estados disponibles, o sea que le podemos asignar cualquiera de los g_i juegos disponibles de números cuánticos. Podemos entonces colocar la partícula en uno de los g_i modos diferentes. La segunda partícula puede ir a cualquiera de los $g_i - 1$ estados restantes. La tercera partícula va a cualquiera de los $g_i - 2$ estados restantes, y así sucesivamente hasta que se ha colocado las n_i partículas en el nivel de energía. El número total de modos diferentes de disponer las n_i partículas entre los g_i estados con energía E_i es entonces

$$g_i(g_i - 1)(g_i - 2) \dots (g_i - n_i + 1),$$

que se puede escribir en la forma

$$\frac{g_i!}{(g_i - n_i)!} \quad (13.1)$$

Hasta ahora sólo hemos tenido en cuenta el principio de exclusión. Si además las partículas son indistinguibles, no es posible notar ninguna diferencia si se redistribuye las n_i partículas entre los estados que ocupan el nivel de energía E_i (este número es $n_i!$, como vimos al estudiar la ley de distribución de Maxwell-Boltzmann). En consecuencia, podemos obtener el número total de arreglos diferentes y distinguibles de n_i partículas idénticas en g_i estados de energía E_i dividiendo la expresión (13.1) entre $n_i!$, resultando

$$\frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!} \quad (13.2)$$

Podemos hallar el número total de modos diferentes y distinguibles de obtener la partición n_1, n_2, n_3, \dots en los niveles de energía E_1, E_2, E_3, \dots multiplicando

entre sí todas las expresiones como la ec. (13.2) correspondientes a cada uno de los niveles de energía disponibles, obteniéndose para la probabilidad de partición:

$$P = \frac{g_1!}{n_1!(g_1 - n_1)!} \cdot \frac{g_2!}{n_2!(g_2 - n_2)!} \cdot \frac{g_3!}{n_3!(g_3 - n_3)!} \cdots$$

$$= \prod_i \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!} \quad (13.3)$$

Tal como con la ley de distribución de Maxwell-Boltzmann en el capítulo 10, debemos hallar la partición más probable calculando el máximo de $\ln P$. (Haremos esto en el ejemplo 13.1.) El resultado es que la partición más probable corresponde a los números

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta E_i} + 1}; \quad (13.4)$$

Esta expresión es la *ley de distribución de Fermi-Dirac*.

El parámetro β juega aquí el mismo papel que en la ley de distribución de Maxwell-Boltzmann, ec. (10.9). Por lo tanto, también aquí definimos la temperatura de un sistema de fermiones en equilibrio estadístico mediante la ec. (10.23), esto es:

$$kT = 1/\beta.$$

La cantidad α se determina imponiendo que $\sum_i n_i = N$. En la mayoría de los casos es una cantidad negativa. Sin embargo, se define usualmente ϵ_F que tiene dimensiones de energía, la cual está relacionada con α por la ecuación

$$\epsilon_F = -\alpha kT.$$

La ec. (13.4) se convierte entonces en

$$n_i = \frac{g_i}{e^{(E_i - \epsilon_F)/kT} + 1}. \quad (13.5)$$

La energía ϵ_F es positiva en la mayoría de los casos y juega un papel muy importante en las aplicaciones físicas; se la puede considerar prácticamente independiente de la temperatura. Observemos que según la ec. (13.5), para $T = 0$

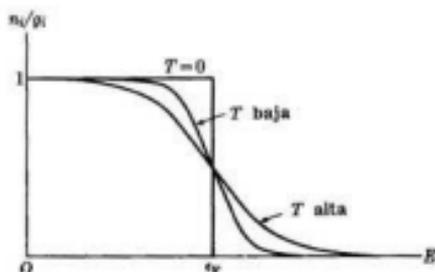


Fig. 13-1. Función de distribución n_i/g_i en la estadística de Fermi-Dirac para tres temperaturas.

todos los estados de energía hasta $E = \epsilon_F$ están completamente ocupados ($n_i = g_i$), mientras que los estados con $E > \epsilon_F$ están vacíos ($n_i = 0$). La razón de esto es que

$$\lim_{T \rightarrow 0} e^{(E_i - \epsilon_F)/kT} = \begin{cases} 0 & \text{para } E_i - \epsilon_F < 0, \\ \infty & \text{para } E_i - \epsilon_F > 0. \end{cases}$$

Esta situación está mostrada en la fig. 13-1, donde se ha representado la función de distribución n_i/g_i para diferentes temperaturas. Recordemos que en la estadística de Maxwell-Boltzmann, por el contrario, todas las partículas deben estar en el nivel fundamental de energía a $T = 0$. En la estadística de Fermi-Dirac, el principio de exclusión prohíbe esta acumulación en el nivel fundamental y a $T = 0$ las partículas ocupan los niveles más bajos de energía disponibles hasta la energía ϵ_F . Por lo tanto, la energía ϵ_F da una idea de la energía máxima de los fermiones del sistema, por lo que es equivalente a la energía de Fermi que introducimos en la sección 6.4 al tratar los electrones libres en los metales; le daremos entonces el mismo nombre aquí. A temperaturas más altas, los estados de energía mayor que ϵ_F comienzan a ser ocupados por transferencia de partículas provenientes de estados de energía más baja. Sin embargo, para temperaturas tales que $kT \ll \epsilon_F$, prácticamente sólo son afectados los niveles de energía cercana a ϵ_F . La razón es que todos los niveles bajos de energía están completamente ocupados y el principio de exclusión impide agregar más fermiones a los mismos. Luego, como muestran las curvas de la fig. 13-1, sólo los fermiones cuya energía está cercana de ϵ_F pueden pasar a estados desocupados más altos absorbiendo la energía kT relativamente pequeña. La temperatura Θ_F para la cual $k\Theta_F = \epsilon_F$ se denomina *temperatura de Fermi*.

EJEMPLO 13.1. Obtención de la ley de distribución de Fermi-Dirac.

Solución: Como en el caso de la estadística de Maxwell-Boltzmann (ejemplo 10.1), el problema consiste en encontrar el máximo de $\ln P$ sujeto a las condiciones $\sum_i n_i = N$ y $\sum_i n_i E_i = U$. Calculemos primeramente $\ln P$ usando la aproximación de Stirling $\ln x! = x \ln x - x$. Se tiene

$$\ln P = \sum_i [g_i \ln g_i - n_i \ln n_i - (g_i - n_i) \ln (g_i - n_i)].$$

Calculemos a continuación $-d(\ln P)$ e igualémoslo a cero para obtener el máximo de P :

$$-d(\ln P) = \sum_i [\ln n_i - \ln (g_i - n_i)] dn_i = 0. \quad (13.6)$$

Combinando la ec. (13.6) con las ecs. (10.15) y (10.17) (esto es, $\sum_i dn_i = 0$ y $\sum_i E_i dn_i = 0$), que también son válidas en este caso, multiplicadas respectivamente por los factores α y β (recordar el ejemplo 10.1), llegamos a

$$\ln n_i - \ln (g_i - n_i) + \alpha + \beta E_i = 0$$

o sea

$$\frac{n_i}{g_i - n_i} = e^{-\alpha - \beta E_i}.$$

Despejando n_i obtenemos finalmente la ec. (13.4).

13.3 Gas de electrones

El sistema de fermiones más característico es el de los electrones en un metal, ya que como vimos en el capítulo 4, los electrones obedecen el principio de exclusión. En el capítulo 6 consideramos los niveles de energía de los electrones de un metal y vimos que están agrupados en bandas. Las bandas más bajas están llenas de electrones a prácticamente todas las temperaturas por lo cual no las consideraremos. Pero la banda superior sólo está parcialmente llena de electrones hasta cierto nivel de energía. Fue sobre esta base que introdujimos el concepto de energía de Fermi en la sección 6.4.

Sólo debemos considerar la distribución de electrones en el intervalo continuo de niveles de la banda superior, llamada también banda de conducción. Colocaremos entonces el cero de la energía en el fondo de la banda de conducción. Supondremos también que los electrones se mueven libremente por el conductor en tanto su energía esté en esta banda superior de conducción, lo cual es una suposición razonable que se justificó plenamente en el capítulo 6. También, como el espectro de energía de los electrones en la banda es prácticamente continuo, debemos reemplazar g_l por $g(E) dE$ en la ec. (13.5), como hicimos anteriormente en el caso de un gas ideal. Luego, el número dn de electrones cuya energía está entre E y $E + dE$ es

$$dn = \frac{g(E) dE}{e^{(E-\epsilon_F)/kT} + 1}, \quad (13.7)$$

donde la energía E se mide desde el fondo de la banda de conducción y $g(E) dE$ da el número de estados que hay en el intervalo de energía entre E y $E + dE$. También aquí podemos usar la expresión (10.39) para $g(E)$, pero debemos multiplicarla por 2 para tener en cuenta las dos orientaciones posibles del espín de los electrones, cada una de las cuales da un estado diferente con la misma energía; se tiene:

$$g(E) dE = \frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3} E^{1/2} dE. \quad (13.8)$$

Sustituyendo la ec. (13.8) en la ec. (13.7), obtenemos la siguiente expresión para el número dn/dE de electrones libres por unidad de intervalo de energía:

$$\frac{dn}{dE} = \frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3} \frac{E^{1/2}}{e^{(E-\epsilon_F)/kT} + 1}. \quad (13.9)$$

Esta es la fórmula de Fermi-Dirac para la distribución de energía de los electrones libres o, en general de fermiones libres. Está representada en la fig. 13-2 para $T = 0$, para una temperatura baja y para una temperatura alta respecto a $\Theta_F = \epsilon_F/k$. En la sección 6.7 ya hemos considerado esta distribución en forma cualitativa, al tratar la conductividad eléctrica.

Se puede obtener la energía de Fermi en función de la temperatura exigiendo que la ec. (13.9), integrada sobre todas las energías, dé el número total N de electrones que hay en la banda de conducción. Suponiendo que ϵ_F es práctica-

mente independiente de T , se puede determinar N para $T = 0$. (Hicimos esto en la sección 6.4). El resultado es

$$\epsilon_F = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3N}{\pi V} \right)^{2/3}. \quad (13.10)$$

Podemos entonces obtener la energía de Fermi de los electrones en un metal si conocemos el número N/V de electrones de conducción por unidad de volumen. La tabla 13.1 da los valores de ϵ_F y de la temperatura de Fermi Θ_F para diversos metales.

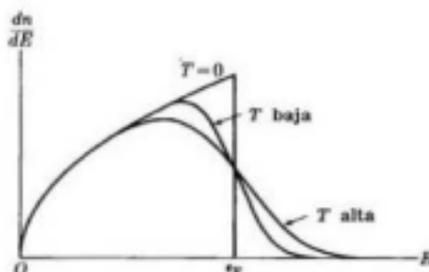


Fig. 13-2. Distribución de energía de un sistema de fermiones para tres temperaturas.

TABLA 13-1 Energía de Fermi y temperatura de Fermi de diversos metales

Metal	ϵ_F , eV	Θ_F , K
Li	4,72	$5,5 \times 10^4$
Na	3,12	3,7
K	2,14	2,4
Cu	7,04	8,2
Ag	5,51	6,4
Au	5,54	6,4

EJEMPLO 13.2. Determinar la energía total de un grupo de N fermiones a temperatura muy baja.

Solución: La energía total U está dada por

$$U = \int E \, dn = \int E \frac{dn}{dE} \, dE.$$

Como la temperatura es muy baja, podemos usar (con buena aproximación) el valor de dn/dT para $T = 0$, que es simplemente $g(E)$. Luego:

$$\frac{dn}{dE} = \frac{8\pi V(2m^2)^{3/2}}{h^3} E^{1/2}.$$

También, integramos sólo entre 0 y ϵ_F . Luego:

$$U = \frac{8\pi V(2m^2)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\epsilon_F} E^{3/2} \, dE = \frac{16\pi V(2m^2)^{3/2}}{5h^3} \epsilon_F^{5/2}.$$

Utilizando la ec. (13.10), podemos escribir esta expresión en la forma

$$U = \frac{1}{2} N \epsilon_F,$$

que es la energía mínima de un sistema de N fermiones. La energía media por partícula es

$$E = \frac{U}{N} = \frac{1}{2} \epsilon_F.$$

EJEMPLO 13.3. Determinar la energía cinética de los nucleones de un núcleo suponiendo que hay dos sistemas de fermiones (neutrones y protones) a temperatura muy baja.

Solución: Podemos usar la ec. (13.10) para eliminar ϵ_F en la expresión de U obtenida en el ejemplo precedente, resultando

$$U = \frac{3}{40} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{2/3} \frac{h^2}{m} \frac{N^{5/3}}{V^{2/3}}.$$

En el caso nuclear tenemos dos clases de partículas, neutrones y protones, siendo N y Z su número total y V el volumen común. Luego, despreciando la pequeña diferencia de masa entre las dos partículas, la energía cinética total es

$$U_i = \frac{3}{40} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{2/3} \frac{h^2}{m} \frac{N^{5/3} + Z^{5/3}}{V^{2/3}}.$$

Pero [recordar la ec. (7.2)] el volumen nuclear es $V = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi r_0^3 A$. Por lo tanto,

$$U_i = \frac{3}{40} \left(\frac{9}{4\pi^2} \right)^{2/3} \frac{h^2}{m r_0^2} \frac{N^{5/3} + Z^{5/3}}{A^{2/3}} = c \frac{N^{5/3} + Z^{5/3}}{A^{2/3}},$$

donde

$$c = \frac{3}{40} \left(\frac{9}{4\pi^2} \right)^{2/3} \frac{h^2}{m r_0^2} \sim 3,74 \times 10^{-12} \text{ J} = 23,4 \text{ MeV}.$$

Sabemos que $A = N + Z$. Llamando $D = N - Z$, tenemos

$$N = \frac{1}{2}(A + D) \quad \text{y} \quad Z = \frac{1}{2}(A - D),$$

de modo que

$$N = \frac{1}{2}A \left(1 + \frac{D}{A} \right) \quad \text{y} \quad Z = \frac{1}{2}A \left(1 - \frac{D}{A} \right).$$

Sustituyendo estos valores en la expresión de U , obtenemos

$$U_i = 2^{-5/3} c A \left\{ \left(1 + \frac{D}{A} \right)^{5/3} + \left(1 - \frac{D}{A} \right)^{5/3} \right\}.$$

Empleando el desarrollo binomial $(1+x)^n = 1 + nx + \frac{1}{2}n(n-1)x^2 + \dots$, y teniendo presente que D/A es en general pequeño respecto a la unidad, obtenemos

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{D}{A} \right)^{5/3} &= 1 + \frac{5}{3} \frac{D}{A} + \frac{5}{9} \frac{D^2}{A^2} + \dots, \\ \left(1 - \frac{D}{A} \right)^{5/3} &= 1 - \frac{5}{3} \frac{D}{A} + \frac{5}{9} \frac{D^2}{A^2} - \dots \end{aligned}$$

Luego, en el orden de aproximación que hemos elegido:

$$U_4 = 2^{-2n} cA \left\{ 1 + \frac{5}{9} \frac{D^2}{A^2} + \dots \right\} = \\ = 2^{-2n} cA + (2^{-2n} c) \frac{5}{9} \frac{(N-Z)^2}{A} + \dots$$

El primer término da una energía proporcional al número total de partículas, mientras que el segundo da una contribución proporcional al cuadrado de la diferencia $N - Z$. Recordando el tratamiento hecho en la sección 7.5, vemos que el primer término está incluido en el término proporcional a A en la fórmula de la energía total, ec. (7.11), mientras que el segundo corresponde a $a_4(N - Z)^2/A$, por lo que

$$a_4 = \frac{1}{4}(2^{-2n}c) = 8,33 \text{ MeV.}$$

Este valor es aproximadamente un tercio del resultado empírico para a^4 . El desacuerdo no debe sorprender teniendo en cuenta lo burdo del modelo utilizado.

13.4 Aplicación de la estadística de Fermi-Dirac a los electrones de los metales

Consideraremos ahora algunos efectos físicos en los metales, efectos que son explicables en términos de la estadística de Fermi-Dirac aplicada a los electrones libres de los metales. En la fig. 13-3 está representada la energía potencial de un electrón dentro de un metal y en su superficie. Cerca de la superficie la energía potencial está dada por la curva AB . A temperatura normal la banda de conducción está esencialmente llena de electrones sólo hasta la energía de Fermi ϵ_F , como muestra la curva de distribución en la parte (b). Para extraer un electrón del metal es por lo tanto necesario darle por lo menos la energía designada con $\epsilon\phi$ en la fig. 13-3. Esto es lo que ocurre, por ejemplo, en el efecto fotoeléctrico (estudiado en la sección 1.4), en el cual sólo se emiten fotoelectrones si $h\nu > \epsilon\phi$. La cantidad $\epsilon\phi$ se denomina *energía de arranque* del metal. A tem-

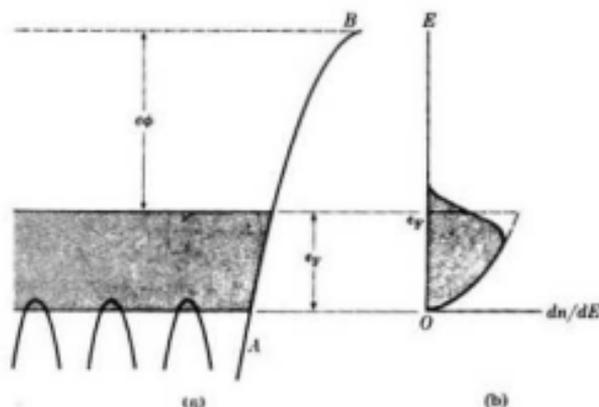


Fig. 13-3. Banda de conducción de un metal a temperatura ambiente.

peraturas altas, sin embargo, la ocupación de estados electrónicos se extiende a energías bien por encima de ϵ_F . Si la temperatura es suficientemente alta, algunos electrones adquieren energías mayores que $\epsilon_F + e\phi$ y escapan del metal. Este proceso se denomina *emisión termoiónica* y es fundamental para el funcionamiento de las válvulas electrónicas.

Utilizando la ley de distribución de Fermi-Dirac para calcular el número de electrones que llegan a la superficie del metal con energía suficiente y con una

TABLA 13-2 Valores de la energía de arranque $e\phi$ y de la constante termoiónica A , obtenidos experimentalmente usando la ec. (13.11)

Metal	$e\phi$, eV	A , $A \text{ cm}^{-2} \text{ K}^{-2}$
Cs	1,8	120
Cr	4,4	48
W	4,5	75
Pt	6,2	32
Ta	4,1	55
Ni	4,6	30
Ca	3,2	60
Th	3,4	60
Mo	4,3	60

dirección de movimiento apropiada para escapar, podemos obtener la densidad de corriente termoeléctrica j que sale de la superficie del metal en función de la temperatura del mismo. El resultado es

$$j = \frac{4\pi m_0}{h^3} (kT)^2 e^{-e\phi/kT} = AT^2 e^{-e\phi/kT}, \quad (13.11)$$

que se denomina *ecuación de Richardson-Dushman*. Esta ecuación no se sigue rigurosamente por varias razones. En primer lugar, la emisión electrónica es muy sensible a las condiciones de la superficie y a la orientación de ésta respecto a la red cristalina del metal. Además, a medida que la temperatura aumenta,

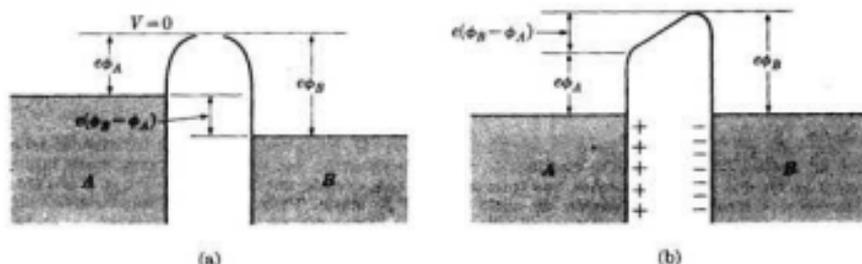


Fig. 13-4. Origen de la diferencia de potencial de contacto.

la energía de arranque varía debido al aumento del número de electrones que tienen una energía más alta que el nivel de Fermi. La tabla 13-2 da algunos valores experimentales de $e\phi$ y de A para diversos metales. La estadística de Maxwell-Boltzmann da una dependencia diferente de la temperatura, por lo que la emisión termiónica es una prueba indirecta de que los electrones siguen la estadística de Fermi-Dirac.

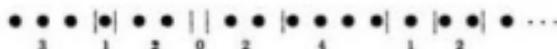
Otra ilustración de la existencia de una energía de Fermi en los metales es la *diferencia de potencial de contacto* entre dos metales. Supongamos que tenemos dos metales A y B que no están conectados eléctricamente (fig. 13-4a). En ausencia de cualquier campo eléctrico externo, la energía potencial de un electrón es cero fuera de los metales y los respectivos niveles de Fermi están a las energías $e\phi_A$ y $e\phi_B$ por debajo de la energía potencial fuera de los metales. Supongamos que ϕ_B es mayor que ϕ_A . Luego, cuando los metales no están conectados, el nivel de Fermi de A está más alto que el de B . Cuando se conecta eléctricamente los dos metales (fig. 13-4b), los electrones más energéticos de A fluirán o se difundirán hacia B , llenando los niveles que están por encima del nivel de Fermi original de B y vaciando los niveles superiores de la banda de conducción de A . Se alcanza el equilibrio cuando se igualan los niveles ocupados superiores de las bandas de conducción de A y B . Por lo tanto, el metal A , que tiene energía de arranque menor se carga positivamente y el metal B , que tiene energía de arranque mayor, se carga negativamente. Esto da lugar a una diferencia de potencial entre los dos metales que es esencialmente igual a $\phi_B - \phi_A$, de acuerdo con el valor experimental. La línea llena de la fig. 13-4(b) indica la energía potencial de un electrón cuando se mueve de un metal al otro a través del espacio entre ellos, después de alcanzado el equilibrio.

13.5 Ley de distribución de Bose-Einstein

La experiencia ha mostrado que hay sistemas compuestos de partículas *idénticas* e *indistinguibles* que no están restringidas por el principio de exclusión. En estos sistemas no hay límite para el número de partículas que pueden estar en el mismo estado cuántico. La función de onda que describe un sistema de partículas de este tipo debe ser simétrica. Las partículas que satisfacen estos requisitos se denominan *bosones* en honor al físico hindú S. N. Bose (1894-), que fue el primero en investigar la estadística de esta clase de partículas. Se encuentra experimentalmente que todas las partículas con espín entero (0 ó 1) son bosones. Los núcleos de helio y los mesones son por lo tanto ejemplos de bosones; los gases ^4He y H_2 también obedecen la estadística de Bose-Einstein.*

* Se puede ver fácilmente que un núcleo tal como el ^4He , compuesto de cuatro fermiones, debe ser un bosón. Consideremos la función de onda que describe dos núcleos de helio. Para intercambiar los dos núcleos tenemos que intercambiar todos los fermiones. Cada vez que intercambiamos dos fermiones la función de onda cambia de signo. Pero como hay cuatro pares de fermiones en el sistema, el intercambio de todos los fermiones no cambia la función de onda. Es decir que la función de onda del sistema es simétrica en los dos núcleos, aunque sea antisimétrica en cada par de fermiones. Este razonamiento se aplica a cualquier sistema en el cual las "partículas" (núcleos, moléculas, etc.) están compuestas de un número par de fermiones. Esas "partículas" se comportan entonces como bosones.

En la estadística de Bose-Einstein, como en la de Fermi-Dirac, los g_i dan la degeneración de cada nivel de energía. Para determinar los modos diferentes y distinguibles en que se puede distribuir un sistema de bosones para producir una partición dada, debemos calcular primero el número de arreglos distinguibles de n_i partículas en los g_i estados correspondientes al nivel de energía E_i que dan lugar a funciones de onda simétricas. Este número de arreglos es igual al número de modos en que se puede distribuir n_i objetos idénticos en g_i cajas, sin limitar el número de objetos que se puede poner en cada caja. Para obtener este número procedemos como sigue: supongamos que colocamos las n_i partículas en una fila y las distribuimos en los g_i estados cuánticos disponibles colocando $g_i - 1$ divisiones en lugares apropiados, como se muestra a continuación para un caso particular:



El número total de arreglos posibles de partículas y divisiones es igual al número de permutaciones de $n_i + g_i - 1$ objetos en fila, que es $(n_i + g_i - 1)!$. Pero como las partículas son idénticas e indistinguibles, todas las permutaciones que difieren sólo en el orden de las partículas son iguales. Tenemos entonces que dividir el número anterior entre $n_i!$. Además, todas las permutaciones de las divisiones dan el mismo estado físico, por lo que también tenemos que dividir entre $(g_i - 1)!$. El número total de arreglos distinguibles de las n_i partículas en los g_i estados tiene entonces el valor

$$\frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!} \quad (13.12)$$

Obtenemos el número total de modos diferentes distinguibles de formar la partición n_1, n_2, n_3, \dots entre los niveles de energía E_1, E_2, E_3, \dots como lo hicimos antes, es decir, multiplicando todas las expresiones como la ec. (13.12) correspondientes a cada uno de los niveles de energía disponibles, resultando la siguiente probabilidad de partición:

$$\begin{aligned}
 P &= \frac{(n_1 + g_1 - 1)!}{n_1!(g_1 - 1)!} \cdot \frac{(n_2 + g_2 - 1)!}{n_2!(g_2 - 1)!} \cdot \frac{(n_3 + g_3 - 1)!}{n_3!(g_3 - 1)!} \dots \\
 &= \prod_i \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!} \quad (13.13)
 \end{aligned}$$

El paso siguiente es hallar la partición más probable calculando el máximo de $\ln P$. (Haremos esto en el ejemplo 13.4.) El resultado es que la partición más probable corresponde a los números

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\epsilon + \beta \epsilon_i} - 1} \quad (13.14)$$

esta expresión es la *ley de distribución de Bose-Einstein*.

El parámetro β juega aquí el mismo papel que en las leyes de distribución de Maxwell-Boltzmann y de Fermi-Dirac. Por lo tanto, también aquí definimos la temperatura de un sistema de bosones en equilibrio mediante la ec. (10.23), esto es:

$$kT = 1/\beta.$$

La ec. (13.14) se convierte entonces en

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + E_i/kT} - 1}. \quad (13.15)$$

La constante α se determina como antes imponiendo que $\sum_i n_i = N$; contrariamente a lo que ocurre en la estadística de Fermi-Dirac, no tiene un significado especial en la estadística de Bose-Einstein. Como los n_i no pueden ser negativos, α debe ser positiva.



Fig. 13-5. Función de distribución n_i/g_i en la estadística de Bose-Einstein para dos temperaturas.

La distribución de bosones sigue la tendencia indicada en la fig. 13-5, en la cual se ha representado la función de distribución n_i/g_i para dos temperaturas. La distribución de Bose-Einstein tiende a acentuar los niveles bajos de energía más que la distribución de Maxwell-Boltzmann debido al signo negativo en el denominador.

EJEMPLO 13.4. Obtención de la ley de distribución de Bose-Einstein.

Solución: Como en los dos casos anteriores (ejemplos 10.1 y 13.1), este problema consiste en hallar el máximo de $\ln P$ sujeto a las condiciones $\sum_i n_i = N$ y $\sum_i n_i E_i = U$. Calculamos primero $\ln P$ mediante la fórmula de Stirling, obteniendo

$$\ln P = \sum_i [(n_i + g_i - 1) \ln (n_i + g_i - 1) - n_i \ln n_i - (g_i - 1) \ln (g_i - 1)].$$

Luego obtenemos el máximo de P haciendo $d(\ln P)$ igual a cero. El resultado es

$$-d(\ln P) = \sum_i [-\ln(n_i + g_i - 1) + \ln n_i] dn_i = 0. \quad (13.16)$$

El paso siguiente es sumar a la ec. (13.16) las ecs. (10.15) y (10.17) (esto es, $\sum_i dn_i = 0$ y $\sum_i E_i dn_i = 0$), que expresan la conservación del número de partículas y de la energía, multiplicadas respectivamente por α y β (recordar el ejemplo 10-1). Se obtiene

$$-\ln(n_i + g_i - 1) + \ln n_i + \alpha + \beta E_i = 0.$$

Si suponemos que $n_i + g_i$ es muy grande respecto a 1, podemos despreñar el 1 en el primer término de la ecuación anterior por lo que tenemos

$$\ln \frac{n_i}{n_i + g_i} = -\alpha - \beta E_i \quad \text{ó} \quad \frac{n_i}{n_i + g_i} = e^{-\alpha - \beta E_i}.$$

Despejando n_i obtenemos la ec. (13.14).

13.6 Gas de fotones

El análisis de la radiación electromagnética encerrada en una cavidad y en equilibrio térmico con los átomos de las paredes de la misma es quizá la aplicación más importante de la estadística de Bose-Einstein. Como dijimos en la sección 1.3, dicha radiación se denomina *radiación de cuerpo negro*. Los átomos de las paredes de la cavidad absorben y re-emiten radiación continuamente hasta que se alcanza el equilibrio cuando la tasa de emisión y la de absorción son iguales. En el equilibrio, el espectro de la radiación electromagnética encerrada tiene una distribución de energía bien definida; esto es: a cada frecuencia corresponde una intensidad de radiación de cuerpo negro que depende únicamente de la temperatura de las paredes y es independiente del material con que están hechas.

Vimos en la sección 1.9 que cuando la radiación electromagnética interactúa con la materia se comporta como si estuviera compuesta de "partículas" llamadas fotones, que tienen momentum h/λ y energía $h\nu$, donde λ es la longitud de onda y ν la frecuencia de la radiación. Podemos suponer entonces que la radiación de cuerpo negro se comporta como un *gas de fotones*. Se supone que los fotones no interactúan entre sí; sólo lo hacen con los átomos de las paredes. Como los fotones no son distinguibles y nada impide que muchos fotones tengan la misma energía (las experiencias indican que a cada frecuencia se puede aumentar sin límite la intensidad de la radiación), se puede considerar que los fotones son bosones que obedecen, por tanto, la estadística de Bose-Einstein.

En este caso, empero, hay que tener en cuenta una situación característica. *El número de fotones no es constante*, ya que los átomos de las paredes de la cavidad pueden absorberlos o emitirlos. En consecuencia, hay que dejar de lado la condición (10.15), $\sum_i dn_i = 0$, lo cual significa que el parámetro α no es necesario. Debemos poner entonces $\alpha = 0$ en la ec. (13.15) y por lo tanto $n_i = g_i / (e^{\beta E_i / kT} - 1)$. Además se puede considerar que el espectro de energía de los fotones es continuo si la cavidad es grande respecto a la longitud de onda promedio de la radiación,

ya que entonces la diferencia de energía entre dos valores de energía o longitudes de onda sucesivos es extremadamente pequeña (recordar la fig. 2-10).

En estas condiciones debemos escribir la ec. (13.15) reemplazando g_i por $g(E) dE$ o sea

$$dn = \frac{g(E) dE}{e^{E/kT} - 1}. \quad (13.17)$$

Como la energía de los fotones está relacionada con la frecuencia por $E = h\nu$, podemos introducir una función $g(\nu)$ tal que $g(E) dE = g(\nu) d\nu$, donde $g(\nu) d\nu$ da el número de modos de oscilación comprendidos en el intervalo de frecuencia $d\nu$ correspondiente al intervalo de energía dE . Ya obtuvimos anteriormente, ec. (2.20), el número de modos de oscilación para el caso de ondas encerradas en una cavidad de volumen V , pero debemos multiplicarlo por 2 para tener en cuenta las dos direcciones independientes de polarización, ya que las ondas electromagnéticas son transversales. Por lo tanto, el número de estados que hay en la radiación de cuerpo negro con frecuencia entre ν y $\nu + d\nu$ o con energía entre E y $E + dE$ es

$$g(E) dE = g(\nu) d\nu = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu. \quad (13.18)$$

En consecuencia, podemos escribir la ec. (13.17) en la forma

$$dn = \frac{8\pi V}{c^3} \frac{\nu^2 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad (13.19)$$

La energía correspondiente a dn fotones en el intervalo de frecuencia $d\nu$ es $(h\nu) dn$ y la energía por unidad de volumen es $(h\nu) dn/V$. Finalmente, se define la densidad de energía $\varepsilon(\nu)$ de la radiación de cuerpo negro mediante

$$\varepsilon(\nu) = \frac{h\nu}{V} \frac{dn}{d\nu},$$

de modo que $\varepsilon(\nu) d\nu$ da la energía por unidad de volumen correspondiente a la radiación de frecuencia entre ν y $\nu + d\nu$. En virtud de la ec. (13.19), esta densidad de energía está dada por

$$\varepsilon(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad (13.20)$$

Esta es la célebre *ley de radiación de Planck* que enunciamos sin demostración en la ec. (1.8) y que está representada en la fig. 1-5 para diversas temperaturas. El acuerdo entre la ec. (13.20) y los hechos experimentales constituyen un fundamento sólido para la hipótesis de que la radiación está compuesta de fotones que obedecen la estadística de Bose-Einstein. Recordamos al estudiante que fue el problema de la radiación de cuerpo negro lo que obligó a Planck a suponer que cuando la radiación interactúa con la materia es absorbida o emitida en cuantos de energía iguales a $h\nu$. Sin embargo, la deducción original de Planck

no es correcta porque por un lado supuso que los átomos de las paredes de la cavidad actúan como osciladores de energía $E = nh\nu$ en vez de $E = (n + \frac{1}{2})h\nu$, y por otro usó la estadística de Maxwell-Boltzmann. Es sorprendente que su resultado haya sido correcto. Si se incluye la energía $\frac{1}{2}h\nu$ de punto cero en los cálculos de Planck, la expresión resultante es incorrecta. El problema tuvo que esperar varios años hasta que se halló una demostración satisfactoria como la dada en el texto.

EJEMPLO 13.5. Discusión de las transiciones radiativas espontáneas e inducidas.

Solución: En la sección 1.7 explicamos que un sistema que se encuentra en un nivel excitado de energía puede pasar espontáneamente a un nivel de energía más bajo o, si hay radiación presente de la frecuencia apropiada, puede ser inducido (estimulado) a pasar a ese nivel más bajo con emisión de radiación.

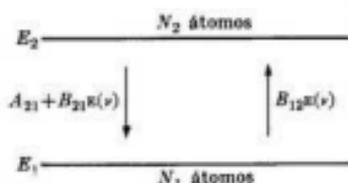


Fig. 13-6. Transiciones inducidas y espontáneas.

Consideremos dos niveles de energía E_1 y E_2 ocupados respectivamente por N_1 y N_2 átomos (fig. 13-6). Los fotones correspondientes a las transiciones entre estos dos niveles deben tener una energía $h\nu = E_2 - E_1$. Los átomos que están en el nivel E_2 pueden pasar espontáneamente al nivel E_1 . Llamemos A_{21} a la correspondiente probabilidad por unidad de tiempo de transición espontánea por emisión. Si hay radiación presente de frecuencia ν y su densidad de energía es $\epsilon(\nu)$, se produce transiciones de E_1 a E_2 por absorción. Es natural suponer que el número de estas transiciones por unidad de tiempo es proporcional a la densidad de energía $\epsilon(\nu)$; es decir, la probabilidad por unidad de tiempo de transición inducida por absorción es $B_{12}\epsilon(\nu)$, donde B_{12} es la probabilidad de transición por unidad de tiempo y por unidad de intensidad de la radiación. Pero como la radiación interactúa con los átomos excitados que están en el nivel E_2 , también produce transiciones de E_2 a E_1 por emisión con una probabilidad por unidad de tiempo de transición inducida por emisión $B_{21}\epsilon(\nu)$. Luego la probabilidad total por unidad de tiempo de transición por emisión del nivel E_2 al E_1 es $A_{21} + B_{21}\epsilon(\nu)$. Si hay N_2 átomos en el nivel E_2 , el número de átomos que pasa por unidad de tiempo de E_2 a E_1 es $[A_{21} + B_{21}\epsilon(\nu)]N_2$. Al mismo tiempo, el número de átomos que pasan por unidad de tiempo de E_1 a E_2 es $B_{12}\epsilon(\nu)N_1$. Luego, la variación neta por unidad de tiempo del número de átomos en el nivel E_2 es igual a la ganancia por absorción menos la pérdida por emisión, ambas por unidad de tiempo, o sea

$$\frac{dN_2}{dt} = \underbrace{B_{12}\epsilon(\nu)N_1}_{\text{Absorción}} - \underbrace{[A_{21} + B_{21}\epsilon(\nu)]N_2}_{\text{Emisión}}$$

habiendo una ganancia igual (pero opuesta) en el nivel inferior. Cuando se establece el equilibrio entre los átomos y la radiación, debemos tener $dN_2/dt = 0$, o sea

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

de modo que el número por unidad de tiempo de transiciones por emisión y por absorción entre los dos niveles es el mismo. Si los átomos están en equilibrio térmico y siguen la estadística de Maxwell-Boltzmann (lo cual es una suposición razonable en la mayoría de los casos) se tiene

$$N_1/N_2 = e^{(E_1 - E_2)/kT} = e^{h\nu/kT},$$

por lo que

$$B_{12}E(\nu)e^{h\nu/kT} = A_{21} + B_{21}E(\nu) \quad (13.21)$$

o sea

$$E(\nu) = \frac{A_{21}/B_{12}}{e^{h\nu/kT} - B_{21}/B_{12}}.$$

Comparando esta expresión con la ec. (13.20) que da la densidad de energía de la radiación en equilibrio con la materia, encontramos que

$$\frac{A_{21}}{B_{12}} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \quad \text{y} \quad \frac{B_{21}}{B_{12}} = 1,$$

resultado que Einstein obtuvo por primera vez en 1917. La segunda relación muestra que las probabilidades por unidad de tiempo de emisión y de absorción inducidas son iguales. Este cálculo no nos permite obtener los valores de A_{21} , B_{21} y B_{12} . Para ello es necesario usar técnicas cuánticas.

De la ec. (13.21) con $B_{12} = B_{21}$ se puede obtener el cociente entre la probabilidad A_{21} de emisión espontánea y la probabilidad $B_{21}E(\nu)$ de emisión inducida, cuando la materia está en equilibrio con la radiación; resulta

$$\frac{\text{probabilidad de emisión espontánea}}{\text{probabilidad de emisión inducida}} = \frac{A_{21}}{B_{21}E(\nu)} = e^{h\nu/kT} - 1. \quad (13.22)$$

Luego, si $h\nu \gg kT$, la emisión espontánea es mucho más probable que la inducida, que en consecuencia se puede ignorar. Esto vale para las transiciones electrónicas en átomos y moléculas, y en el caso de transiciones radiativas en núcleos. Pero si $h\nu \ll kT$, como en la región de microondas del espectro, la emisión estimulada o inducida puede ser importante.

La emisión inducida resulta de la acción de la radiación incidente sobre los átomos (o las moléculas) de la sustancia. Por lo tanto, las oscilaciones atómicas forzadas tienen un desfase constante respecto a la radiación incidente. Esto significa que todos los átomos radian en fase por lo que *la emisión inducida es coherente*. Las transiciones espontáneas, por el contrario, se producen al azar, no habiendo correlación entre los instantes en que los átomos efectúan transiciones. En consecuencia, las fases de las radiaciones atómicas están distribuidas al azar. Decimos, entonces, que *la emisión espontánea es incoherente*.

EJEMPLO 13.6. Discusión de los máseres y láseres.

Solución: Como se explicó en el ejemplo precedente, cuando la radiación y la materia están en equilibrio térmico, no hay absorción o emisión netas porque el número total por unidad de tiempo de transiciones por emisión y por absorción es el mismo. Esto está indicado en la fig. 13-7(a). Aunque la probabilidad de transición inducida puede ser menor que la probabilidad de transición espontánea, la absorción se empareja con la emisión debido a la gran población del nivel inferior cuando hay equilibrio térmico. En el caso general de interacción de la radiación con la materia sin que haya necesariamente equilibrio, tenemos

$$\frac{\text{tasa de emisión}}{\text{tasa de absorción}} = \frac{[A_{21} + B_{21}E(\nu)]N_2}{B_{12}E(\nu)N_1} = \left(1 + \frac{A_{21}}{B_{21}E(\nu)}\right) \frac{N_2}{N_1},$$

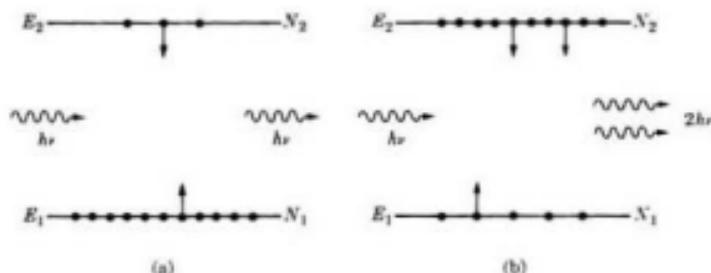


Fig. 13-7. Principio básico de funcionamiento de los láseres y los máseres.

donde $\varkappa(\nu)$ es la distribución de energía en la radiación incidente. Si la diferencia de energía $E_2 - E_1$ es suficientemente pequeña, de modo que $h\nu/kT$ es muy pequeña (como ocurre por ejemplo en la región de microondas a temperatura ambiente), la ec. (13.22) muestra que $A_{21}/B_{21}\varkappa(\nu)$ es despreciable frente a la unidad. En este caso podemos escribir

$$\frac{\text{tasa de emisión}}{\text{tasa de absorción}} \approx \frac{N_2}{N_1}.$$

Si la sustancia está en equilibrio térmico, N_2 es menor que N_1 y la tasa de emisión también es menor que la de absorción. Pero si por algún medio se invierte la población relativa de los niveles excitado y fundamental, de modo que N_2 sea mayor que N_1 , con lo que el cociente N_2/N_1 se hace mayor que 1, la tasa de emisión será mayor que la de absorción. En otras palabras: si una radiación de densidad de energía $\varkappa(\nu)$ atraviesa este sistema, la radiación que sale tiene más fotones de frecuencia ν

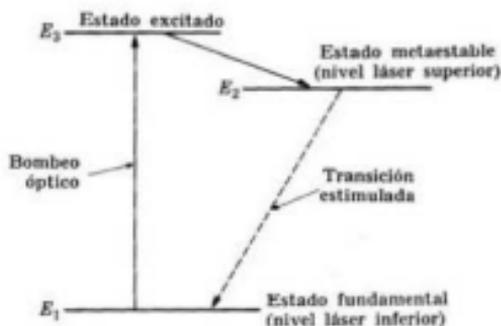


Fig. 13-8. Láser de tres niveles.

que la radiación incidente [fig. 13-7(b)], resultando una "amplificación" de la radiación de esa frecuencia. Por supuesto que esto es válido si $E_2 - E_1 = h\nu$. Como se desexcitan más átomos que los que se excitan, el nivel superior comienza a vaciarse, de modo que la amplificación disminuye hasta que se restablece el equilibrio térmico. Luego, para mantener una amplificación constante hay que retornar constantemente los átomos al nivel superior o sacar átomos del nivel inferior por algún otro medio.

Los dispositivos en que se hace esto se denominan *máseres* y *láseres*. Estas palabras han sido construidas con las siglas de los nombres ingleses de dichos dispositivos: "Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation" (amplificación de microondas por emisión estimulada de radiación) y "Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation" (amplificación de luz por emisión estimulada de radiación); el nombre depende de la región del espectro electromagnético donde actúan.

Se han ideado varios métodos para superpoblar el nivel superior en forma estacionaria. Todos estos métodos implican un gasto de energía y la eficiencia de un máser o de un láser es el cociente entre la energía de salida y la energía de entrada. El *bombeo óptico* es un método típico mediante el cual se suministra energía en grandes cantidades, continuamente o en pulsos para excitar el sistema a estados con mayor energía que el fundamental. Cuando el sistema vuelve al estado fundamental, algunos átomos excitados caen en estados metastables; estos estados pueden llegar a tener una población alta respecto a algún estado inferior, como se muestra en la fig. 13-8. Estimulando la radiación de frecuencia $\nu = (E_2 - E_1)/h$ se obtendrá la amplificación deseada.

Los máseres y los láseres son muy útiles porque producen un haz muy intenso de radiación coherente monocromática. El estudiante debe recordar que cuando varias fuentes radian en fase (coherentemente), la amplitud resultante es la suma de las amplitudes individuales. Si todas las fuentes son idénticas tenemos

$$\text{amplitud coherente resultante} = N \times \text{amplitud de una fuente,}$$

donde N es el número de fuentes. Como la intensidad de la fuente es proporcional al cuadrado de la amplitud, tenemos que

$$\text{intensidad coherente resultante} = N^2 \times \text{intensidad de una fuente.}$$

Si el número de fuentes es grande, la radiación estimulada puede ser muy intensa. Por el contrario, si las fuentes radian incoherentemente las intensidades individuales se combinan linealmente, es decir:

$$\text{intensidad incoherente resultante} = N \times \text{intensidad de una fuente.}$$

En los máseres y láseres, por lo tanto, la radiación monocromática coherente estimulada es muy intensa en comparación con la radiación incoherente espontánea que en estos dispositivos se denomina *ruido*. Es a causa del fuerte predominio de las transiciones inducidas que el ruido es relativamente menor en los máseres y láseres que en los amplificadores y osciladores convencionales. El uso de amplificadores máser se impone cuando es de importancia capital que el nivel de ruido sea muy bajo, como en los trabajos de radioastronomía, las comunicaciones por satélites y la espectrometría de microondas.

13.7 *Capacidad calórica de los sólidos*

Como se explicó en el capítulo 6, los sólidos son ordenamientos regulares de un gran número de átomos (o de moléculas) que se mantienen en sus posiciones fijas de equilibrio por la acción de fuerzas intensas de cohesión resultantes de sus interacciones eléctricas. Los únicos movimientos individuales de los átomos son pequeñas vibraciones alrededor de sus posiciones de equilibrio. Pero el acoplamiento entre átomos es tan fuerte que no se puede poner un átomo en vibración sin perturbar los vecinos y eventualmente todo el sólido. Por lo tanto, debemos considerar excitaciones vibracionales colectivas del sólido, que son similares a las consideradas en el ejemplo 6.2 para una red lineal.

Estas vibraciones colectivas establecen ondas estacionarias en el sólido. Sus frecuencias dependen de la forma y del tamaño del cuerpo y en cierto modo son análogas a las ondas estacionarias en una cavidad. Aunque las frecuencias posibles tienen un espectro discreto, su espaciamiento es muy pequeño si el cuerpo es grande en comparación con las dimensiones atómicas, de modo que se puede suponer que el espectro es continuo. Estas ondas estacionarias son de la misma naturaleza que las ondas elásticas que se propagan en un sólido, por lo que su velocidad de propagación es igual a la de las ondas elásticas y también se denomina *velocidad del sonido*.

Hay dos clases de ondas elásticas en un sólido: longitudinales y transversales. Se propagan con velocidades v_l y v_t respectivamente. Para obtener el número de modos de vibraciones diferentes en el intervalo de frecuencia entre ν y $\nu + d\nu$, que expresamos en la forma $g(\nu) d\nu$, debemos contar separadamente los modos longitudinales y transversales. Para las ondas transversales tenemos entonces, usando la ec. (13.18) con v_t en vez de c ,

$$g(\nu) d\nu = \frac{8\pi V}{v_t^3} \nu^2 d\nu,$$

mientras que para las ondas longitudinales, que tienen un solo grado de libertad, el número de modos es la mitad:

$$g(\nu) d\nu = \frac{4\pi V}{v_l^3} \nu^2 d\nu.$$

En cada expresión usamos las velocidades de propagación v_l y v_t que corresponden respectivamente a las ondas longitudinales y transversales. El número total de modos de vibración en el intervalo de frecuencia $d\nu$ es entonces

$$g(\nu) d\nu = g_l(\nu) d\nu + g_t(\nu) d\nu = 4\pi V \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3} \right) \nu^2 d\nu. \quad (13.23)$$

En un medio continuo no hay límite para el número total de modos de vibración. Pero en un sólido, que tiene una estructura atómica con N átomos, todo modo vibracional se debe describir en términos de las $3N$ coordenadas de posición de los átomos. Esto impone por lo tanto un límite al número *total* de modos independientes de vibración. Esto a su vez impone un límite superior a la frecuencia vibracional porque debemos tener, utilizando la ec. (13.23),

$$3N = \int_0^{\nu_0} g(\nu) d\nu = 4\pi V \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3} \right) \int_0^{\nu_0} \nu^2 d\nu$$

o sea

$$3N = 4\pi V \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3} \right) \frac{\nu_0^3}{3}, \quad (13.24)$$

que determina la frecuencia de corte ν_0 . (En el ejemplo 6.2 se discutió la existencia de una frecuencia de corte en las vibraciones de una red cristalina.) Usando

la ec. (13.24) podemos escribir la ec. (13.23) en la forma

$$g(\nu) d\nu = \frac{9N}{\nu_0^3} \nu^2 d\nu. \quad (13.25)$$

El problema que estamos tratando es muy similar al de las ondas electromagnéticas estacionarias en una cavidad. Este dio lugar al concepto de gas de fotones introducido en la sección 13.6 para analizar la radiación de cuerpo negro. Podemos entonces asociar con los modos vibracionales del sólido, que están necesariamente cuantizados, un *gas de fonones* compuesto de "partículas" o fonones de energía $h\nu$. El concepto de fonón fue introducido en el ejemplo 6.2. Como los fonones son idénticos y como no hay límite para el número de fonones que puede haber en un mismo estado de energía, es de esperar que los fonones en equilibrio térmico sigan la estadística de Bose-Einstein. Además, el número de fonones no es fijo, ya que puede aumentar o disminuir según que se aumente o disminuya la energía de los modos de vibración. Debemos usar entonces la ec. (13.15) haciendo $\alpha = 0$ como en el caso del gas de fotones, y reemplazando g_i por $g(\nu) d\nu$, dado por la ec. (13.25). El número de fonones de energía $E = h\nu$

TABLA 13-3 Temperatura de Debye de algunos sólidos

Sustancia	Θ_D , K	Sustancia	Θ_D , K
Ag	225	Ge	366
Au	165	Na	159
C (diamante)	1860	Ni	456
Cu	339	Pt	229

que hay en el intervalo de frecuencia entre ν y $\nu + d\nu$ y que están en equilibrio térmico con la red del sólido a temperatura T es entonces

$$dn = \frac{g(\nu) d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} = \frac{9N}{\nu_0^3} \frac{\nu^2 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

La energía vibracional total del sólido en el intervalo de frecuencia $d\nu$ es

$$dU = h\nu dn = \frac{9Nh}{\nu_0^3} \frac{\nu^2 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

y la energía vibracional total del sólido es

$$U = \int_0^{\infty} h\nu dn = \frac{9Nh}{\nu_0^3} \int_0^{\infty} \frac{\nu^2 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

Deberíamos agregar a esta energía la energía de punto cero asociada con cada modo de vibración. Sin embargo, esta energía no depende de la temperatura

por lo que no nos interesa aquí. La capacidad calórica a volumen constante del sólido es entonces

$$C_V = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \frac{9N_A h^2}{v_0^3 k T^2} \int_0^{v_0} \frac{v^4 e^{hv/kT}}{(e^{hv/kT} - 1)^2} dv. \quad (13.26)$$

Es conveniente definir la *temperatura de Debye* Θ_D mediante $k\Theta_D = hv_0$ ó

$$\Theta_D = hv_0/k. \quad (13.27)$$

La tabla 13-3 da los valores de Θ_D para algunos sólidos.

Recordando que $kN_A = R$ y haciendo $x = hv/kT$, podemos escribir la ec. (13.26) en la forma simplificada

$$C_V = 9R \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx. \quad (13.28)$$

La fig. 13-9 muestra el gráfico de C_V en función de T/Θ_D . La mayoría de las sustancias siguen la curva teórica con sorprendente regularidad, como se muestra en la figura con los puntos experimentales.

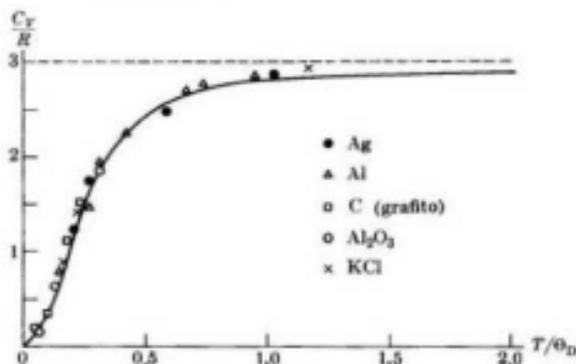


Fig. 13.9. Capacidad calórica de una red cristalina en función de la temperatura.

Se puede ver que a temperaturas del orden de Θ_D o mayores, la capacidad calórica de todas las sustancias alcanza prácticamente el valor $3R$, resultado que se conoce como *ley de Dulong-Petit* debido a que fueron éstos quienes por primera vez lo observaron experimentalmente en el siglo XIX. También está de acuerdo con el principio de equipartición de la energía, porque para $kT \gg hv_0 = k\Theta_D$, la energía vibracional por grado de libertad debe ser $2(\frac{1}{2}kT) = kT$ y $3kT$ para los tres grados de libertad de cada átomo. En consecuencia

$$U = N(3kT) = 3kNT = 3nRT,$$

que corresponde a $C_V = 3R$, de acuerdo con la ley de Dulong-Petit. Es evidente que las sustancias cuya temperatura de Debye es mucho más alta que la temperatura ambiente se apartan sustancialmente de la ley de Dulong-Petit a esta temperatura.

Tenemos que considerar ahora si en el caso especial de los metales debemos tomar en cuenta la energía de los electrones libres de conducción al calcular la capacidad calórica C_V . Debemos recordar que los electrones libres siguen la estadística de Fermi-Dirac y que la equipartición de la energía se les aplica sólo a temperaturas para las cuales $kT \gg \epsilon_F$, donde ϵ_F es la energía de Fermi, o sea $T \gg \epsilon_F/k = \Theta_F$, donde Θ_F es la temperatura de Fermi. Examinando los valores de ϵ_F y de Θ_F dados en la tabla 13-1, vemos que la temperatura de Fermi Θ_F es tan alta que sólo se excitan unos pocos electrones cuando se calienta el metal a las temperaturas usadas en los laboratorios y en la industria. Debemos notar, empero, que a temperaturas muy bajas, cercanas al cero absoluto, cuando C_V también es muy pequeño como se ve en la fig. 13-9, la contribución electrónica a C_V es comparativamente importante. A estas temperaturas, los poquísimos electrones excitados por encima del nivel de Fermi ϵ_F dan a la energía interna una contribución mayor que la energía de las vibraciones colectivas de la red.

13.8 Gas ideal en la estadística cuántica

Todas las partículas siguen la estadística de Fermi-Dirac o la de Bose-Einstein. En consecuencia, aun un gas ideal se debe analizar desde el punto de vista de la estadística cuántica. Consideremos primero un gas ideal compuesto de partículas que siguen la estadística de Bose-Einstein (que es la situación más común porque la mayoría de las moléculas tienen espín entero). El número dn de moléculas cuya energía está entre E y $E + dE$ está dado por la ec. (13.15) reemplazando g_i por

$$g(E) dE = \frac{4\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3} E^{1/2} dE,$$

que es la ec. (10.39). Por lo tanto

$$dn = \frac{4\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3} \frac{E^{1/2} dE}{e^{E/kT} - 1}.$$

Si ponemos $x = E/kT$ y utilizamos la expresión (10.40) de la función de partición de un gas ideal, $Z = V(2\pi mkT)^{3/2}/h^3$, obtenemos la siguiente ecuación para el número total de moléculas:

$$N = \frac{2Z}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{e^{x+\alpha} - 1}. \quad (13.29)$$

Recordando que en la estadística de Bose-Einstein α es positiva, tenemos

$$(e^{x+\alpha} - 1)^{-1} = e^{-x-\alpha}(1 - e^{-x-\alpha})^{-1} = e^{-x}(e^{-\alpha} + e^{-\alpha-x} + \dots),$$

que sustituida en la ec. (13.29) da

$$N = Z\epsilon^\alpha \left(1 + \frac{1}{2^{3/2}} \epsilon^\alpha + \dots \right).$$

En primera aproximación podemos escribir $\epsilon^\alpha = N/Z$, que es el resultado obtenido en la sección 10.3. En segunda aproximación podemos escribir

$$\epsilon^\alpha = \frac{N}{Z} \left(1 + \frac{1}{2^{3/2}} \epsilon^\alpha + \dots \right)^{-1} = \frac{N}{Z} \left(1 - \frac{1}{2^{3/2}} \frac{N}{Z} + \dots \right), \quad (13.30)$$

que nos permite obtener α en función de N y de T . La energía total del gas es

$$\begin{aligned} U &= \int_0^\infty E \, dn = \frac{2ZkT}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} dx}{e^{\alpha+x} - 1} \\ &= \frac{3}{2} kTZ \epsilon^\alpha \left(1 + \frac{1}{2^{5/2}} \epsilon^\alpha + \dots \right). \end{aligned}$$

Introduciendo el valor de ϵ^α dado por la ec. (13.30), obtenemos finalmente

$$U = \frac{3}{2} kNT \left(1 - \frac{1}{2^{5/2}} \frac{N}{Z} - \dots \right). \quad (13.31)$$

Comparando este resultado con el clásico, o de Maxwell-Boltzmann, para el gas ideal, $U = \frac{3}{2} kNT$, vemos que el efecto cuántico de la estadística de Bose-Einstein es disminuir la energía del gas.

Se puede demostrar (ver el ejemplo 13.7) que la presión del gas es

$$p = \frac{kNT}{V} \left(1 - \frac{1}{2^{5/2}} \frac{N}{Z} - \dots \right) \quad (13.32)$$

donde vemos que en la estadística de Bose-Einstein también la presión de un gas ideal es menor que la de un gas ideal clásico (o de Maxwell-Boltzmann).

La desviación del gas ideal cuántico respecto al gas ideal clásico se denomina *degeneración del gas* (esta degeneración no tiene relación alguna con la degeneración de los estados cuánticos). Observando que N/Z es proporcional a $(N/V)T^{-3/2}$, vemos que la degeneración de un gas se hace más importante a baja temperatura y a densidad alta, condiciones que se dan cerca del punto de condensación. Para la mayoría de los gases tenemos que a temperatura y presión normales N/Z es del orden de 10^{-5} , por lo que la degeneración de gases es despreciable; esto demuestra que se puede usar la estadística de Maxwell-Boltzmann con confianza para tratar dichos gases.

El H_2 y el helio son los dos gases más livianos que siguen la estadística de Bose-Einstein. Para el H_2 en el punto de ebullición normal, 20,4 K, el valor de N/Z es $0,84 \times 10^{-2}$ y para el helio a 4,2 K, el valor de N/Z es 0,139. El helio es entonces un gas en el que la degeneración debe producir efectos observables.

De hecho, se atribuye cierto comportamiento peculiar del helio en fase condensada, conocido como He-II, a la degeneración de Bose-Einstein completa.

En el caso de un gas ideal que sigue la estadística de Fermi-Dirac (como el hidrógeno monoatómico), los resultados son muy parecidos. Recordemos, sin embargo, que en la estadística de Fermi-Dirac α puede ser positiva o negativa por lo que se debe tratar separadamente los casos $\alpha > 0$ y $\alpha < 0$. No insistiremos sobre este caso. Señalemos, empero, que si bien la presión de un gas ideal que sigue la estadística de Maxwell-Boltzmann o la de Bose-Einstein es nula en el cero absoluto, la presión de un gas que sigue la estadística de Fermi-Dirac tiende a un valor finito cerca del cero absoluto, o sea que hay una presión de punto cero. La razón de esto es que aun en el cero absoluto, un conjunto de fermiones tiene una energía de punto cero $U = \frac{3}{2}N\epsilon_F$ (ver el ejemplo 13.2). Teniendo en cuenta la ec. (11.37):

$$dU = T dS - p dV,$$

tenemos, cuando la entropía es constante, $dU_S = -p dV_S$. Luego:

$$p = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_S. \quad (13.33)$$

En consecuencia la presión de punto cero de un sistema de fermiones es

$$p = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_S = - \frac{3}{2} N \frac{\partial \epsilon_F}{\partial V}.$$

Pero según la ec. (13.10) se tiene: $\ln \epsilon_F = -\frac{2}{3} \ln V + C$; luego, $\partial \epsilon_F / \partial V = -2\epsilon_F / 3V$. Resulta entonces que

$$p = \frac{2}{5} \frac{N \epsilon_F}{V} \quad (13.34)$$

es la presión de punto cero de un gas de Fermi-Dirac.

EJEMPLO 13.7. Presión de un gas ideal en función de la energía interna y el volumen.

Solución: Recordemos que según la ec. (13.33), se puede calcular la presión de un sistema de partículas mediante $p = -(\partial U / \partial V)_S$, siendo $U = \sum_i n_i E_i$. Ahora bien, en un proceso a entropía constante los números de ocupación n_i deben permanecer constantes, ya que, como se explicó en la sección 11.9, un cambio de entropía (o absorción de calor) está asociado con un cambio de los n_i . Por lo tanto $(\partial U / \partial V)_S = \sum_i n_i (\partial E_i / \partial V)$ y

$$p = - \sum_i n_i \frac{\partial E_i}{\partial V}. \quad (13.35)$$

Suponiendo que el gas ideal está compuesto de partículas independientes contenidas en un recipiente cúbico de lado a , o sea de volumen $V = a^3$, los niveles de energía

están dados por la ec. (2.17):

$$E_i = \frac{\pi^2 h^2}{2ma^2} (N_1^2 + N_2^2 + N_3^2) = \frac{\pi^2 h^2}{2mV^{2/3}} (N_1^2 + N_2^2 + N_3^2),$$

la cual da

$$\frac{\partial E_i}{\partial V} = -\frac{2}{3} \frac{\pi^2 h^2}{2mV^{5/3}} (N_1^2 + N_2^2 + N_3^2) = -\frac{2}{3} \frac{E_i}{V}.$$

Sustituyendo este resultado en la ec. (13.35) encontramos que la presión de un sistema de partículas que no interactúan es

$$p = \frac{2}{3} \sum_i \frac{n_i E_i}{V} = \frac{2}{3} \frac{U}{V}. \quad (13.36)$$

Para un gas ideal que sigue la estadística de Maxwell-Boltzmann tenemos $U = \frac{3}{2} kNT$ por lo que $p = kNT/V$, que está de acuerdo con la ec. (11.16). Para un gas ideal de Bose-Einstein debemos usar la ec. (13.31) para U , obteniendo para p el resultado ya expresado en la ec. (13.32). Para un gas ideal de Fermi-Dirac en el cero absoluto, $U = \frac{3}{5} N \epsilon_F$ y $p = \frac{2}{5} N \epsilon_F / V$, que es el valor dado en la ec. (13.34). A temperaturas diferentes del cero absoluto, la presión depende del signo de α . Para α positiva, lo cual ocurre normalmente a temperaturas muy altas, la presión de un gas ideal de Fermi-Dirac es

$$p = \frac{kNT}{V} \left(1 + \frac{1}{2^{5/2}} \frac{N}{Z} - \dots \right)$$

que es, por lo tanto, ligeramente mayor que la presión del gas ideal clásico. Para α negativa, lo cual ocurre a temperaturas bajas, la presión es

$$p = \frac{2}{5} \frac{N \epsilon_F}{V} \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 - \dots \right].$$

13.9 Comparación de las tres estadísticas

En la sección precedente hemos visto que los efectos cuánticos son relativamente pequeños en los gases ideales a concentración baja y temperatura alta. Compararemos ahora las tres estadísticas para determinar en qué medida dan resultados parecidos. Recordando las ecs. (10.9), (13.5) y (13.14), esto es:

$$\begin{aligned} \text{(a) Maxwell-Boltzmann,} & \quad n_i = g_i e^{-\epsilon_i/kT}, \\ \text{(b) Fermi-Dirac,} & \quad n_i = \frac{g_i}{e^{+\epsilon_i/kT} + 1}, \\ \text{(c) Bose-Einstein,} & \quad n_i = \frac{g_i}{e^{+\epsilon_i/kT} - 1}. \end{aligned}$$

vemos que se puede escribir las tres en la forma

$$\frac{g_i}{n_i} + \delta = e^{+\epsilon_i/kT},$$

donde $\delta = 0$ para la estadística de Maxwell-Boltzmann, -1 para la de Fermi-Dirac y $+1$ para la de Bose-Einstein. Podemos ver claramente que si $g_i/n_i \gg 1$

o sea si $n_i \ll g_i$, es decir, para sistemas enrarecidos, las tres estadísticas dan resultados prácticamente idénticos. Esto ocurre a temperaturas altas (debido al aumento de α con la temperatura). En consecuencia, podemos dejar de lado la mayoría de los efectos cuántico-estadísticos, excepto a temperaturas muy bajas. Esto justifica el empleo de la estadística de Maxwell-Boltzmann en muchos casos.

Bibliografía

1. "Thermodynamics and Quanta in Planck's Work", M. Klein, *Physics Today*, noviembre de 1966, pág. 23
2. "Evolution of Masers and Lasers", B. Lengyel, *Am. J. Phys.* **34**, 903 (1966)
3. "Resource Letter MOP-1 on Masers and on Optical Pumping", H. Moos, *Am. J. Phys.* **32**, 589 (1964)
4. *Statistical Thermodynamics*, E. Schrödinger. Cambridge University Press, Cambridge, 1964, cap. 13
5. *Statistical Physics*, G. Wannier. John Wiley, New York, 1966, parte I
6. *Fundamentals of Statistical Thermodynamics*, R. Sonntag y G. Van Wylen. John Wiley, New York, 1966, caps. 7, 8 y 11
7. *The Feynman Lectures in Physics*, vol. I, R. Feynman, R. Leighton y M. Sands. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1963, caps. 41 y 42

Problemas

13.1 La energía de Fermi varía con la temperatura conforme a la expresión

$$\epsilon_F(T) = \epsilon_F \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{\Theta_F} \right)^2 - \dots \right\}$$

donde ϵ_F es el valor para $T = 0$ dado en la tabla 13-1. Probar que el término de corrección corresponde a una variación de 1 % de la energía de Fermi a una temperatura $T = \sqrt{3} \Theta_F/5\pi$. Estimar esta temperatura para algunos de los metales dados en la tabla 13-1 y sacar como conclusión hasta qué punto se puede suponer que la energía de Fermi permanece constante entre cero y la temperatura ambiente.

13.2 Hallar la velocidad media y la energía media de los electrones a 0 K en un metal que tiene 10^{28} electrones por cm^3 .

13.3 Demostrar que el número de fermiones que tienen una velocidad entre v y $v + dv$ a la temperatura T es

$$dN = \frac{8\pi V m^3}{h^3} \frac{v^2}{e^{(\frac{1}{2}mv^2) - \epsilon_F}/kT} + 1} dv.$$

13.4 Demostrar que el número de fermiones cuya velocidad tiene componentes entre v_x y $v_x + dv_x$, v_y y $v_y + dv_y$, v_z y $v_z + dv_z$ es

$$dN = \frac{2V m^3}{h^3} \frac{dv_x dv_y dv_z}{e^{(\frac{1}{2}mv^2 - \epsilon_F)/kT} + 1}.$$

13.5 Demostrar que el número de fermiones cuya velocidad tiene la componente X entre v_x y $v_x + dv_x$ es

$$dN_x = \frac{4\pi V m^3}{h^3 kT} \ln [e^{(\frac{1}{2}mv^2 - \epsilon_F)/kT} + 1] dx.$$

[Sugerencia: Usar la integral $\int_0^\infty (ae^x + 1)^{-1} dx = \ln(1 + 1/a)$.]

13.6 Usando el resultado del problema 13.5, deducir la ecuación de Richardson (13.11). [Sugerencia: Emplear la aproximación $\ln(1+x) = x$ cuando x es pequeño.]

13.7 Representar la ecuación de Richardson-Dushman para la emisión termiónica en función de $kT/e\phi$. Demostrar que la temperatura para la cual la emisión termiónica es máxima es $T =$

$= e\phi/2k$. Estimar el valor de esta temperatura para algunos de los metales dados en la tabla 13-2.

13.8 Si se usa la estadística de Maxwell-Boltzmann en vez de la de Fermi-Dirac para analizar la densidad de corriente termoiónica, se obtiene la siguiente expresión:

$$j = AT^3 \alpha e^{-e\phi/kT}$$

(a) Deducir esta ecuación. (b) Representar j en función de $kT/e\phi$ y comparar con el gráfico de la ecuación de Richardson-Dushman, suponiendo en ambos casos que $e\phi = 3$ eV. (c) Estimar la temperatura $\Theta = e\phi/k$ para algunos metales y decidir si ambas ecuaciones dan resultados claramente diferenciables a temperatura ambiente.

13.9 Demostrar que la constante A de la ec. (13.11) tiene un valor teórico de $120 \text{ A cm}^{-2} \text{ K}^{-2}$.

13.10 Sabemos por la discusión del escalón de potencial hecha en el capítulo 2, que algunos electrones que llegan a la superficie de un metal deberían ser reflejados dentro del metal aunque su energía fuera mayor que $e\phi$. (a) Modificar la ec. (13.11) para incluir este efecto. Justificar el hecho de que los valores experimentales de A (tabla 13-2) son menores que el valor teórico dado en el problema anterior. (b) Hallar el coeficiente de reflexión en el cesio y en el cromo.

13.11 ¿Para qué valores de la energía E , mayores de $e\phi$, está $n_i = g_i e^{-(E-e\phi)/kT}$ dentro del 10 % de la ec. (13.5)?

13.12 Para las energías indicadas en el problema 13.11 podemos escribir

$$N(E)dE = \frac{8\pi V(2m^0)^3}{h^3} E^2 \alpha e^{-(E-e\phi)/kT}$$

en vez de la ec. (13.9). Demostrar que el número de electrones por unidad de volumen con energías iguales o mayores que un cierto valor E_0 mayor que $e\phi$ es

$$\frac{8\pi V(2m^0)^3}{h^3} e^{e\phi/kT} kT \times \left\{ (\pi kT)^{3/2} \left[\frac{1}{2} - \text{erf} \frac{E_0}{kT} \right] + E_0^2 \alpha e^{-E_0/kT} \right\}$$

[Sugerencia: Referirse al problema 10.21.]

13.13 Utilizando el resultado del problema 13.12 hallar, para un metal con $e\phi = 2,00$ eV y $e\phi = 3,00$ eV, el cociente entre el número de electrones por unidad de volumen que tienen una energía igual o mayor que la energía de arranque a temperatura ambiente y el mismo número a 1000 K. [Sugerencia: Ver el problema 13.11.]

13.14 Hallar el número de fotones por metro cúbico que tienen una frecuencia entre ν_{max} y $1,05\nu_{\text{max}}$ en un campo de radiación de cuerpo negro a 300 K, donde ν_{max} corresponde al máximo de la densidad de energía.

13.15 Suponiendo que los fotones se comportan como osciladores clásicos con una energía media de kT , obtener la distribución de densidad de energía; ésta es la ley de Rayleigh-Jeans mencionada en el problema 1.9. ¿Por qué esta suposición da la misma distribución de energía que la aproximación de baja frecuencia de la ley de radiación de Planck?

13.16 Suponiendo que los fotones obedecen la estadística de Maxwell-Boltzmann, obtener la distribución de densidad de energía. Esta es la ley de Wien mencionada en el problema 1.9. ¿Por qué esta suposición da la misma distribución de energía que la aproximación de alta frecuencia de la ley de radiación de Planck?

13.17 Usando la tabla 13-3, hallar la frecuencia máxima y la longitud de onda mínima de los fonones en el germanio y en el diamante. Comparar con la longitud de onda de los neutrones a temperatura ambiente (300 K).

13.18 Hallar el cociente entre la probabilidad de emisión espontánea y la de emisión inducida a 300 K para (a) la región de microondas, $\nu \approx 10^{10}$ Hz, y (b) la región óptica, $\nu \approx 10^{14}$ Hz.

13.19 Probar que para temperaturas muy bajas respecto a Θ_D , la expresión de Debye para la capacidad calorífica es

$$C_V = \frac{12}{5} R x^3 (T/\Theta_D)^3$$

Se ha verificado experimentalmente que C_V depende de T^3 a temperaturas bajas. [Sugerencia: Hacer $x = \Theta_D/T$ en la ec. (13.28) y notar que el límite superior se puede tomar como infinito.]

13.20 Determinar la temperatura de Debye del níquel y de la plata a partir de los siguientes datos experimentales. Las masas atómicas son 59 y 108 y las densidades son $8,9 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ y $1,05 \times 10^4 \text{ kg m}^{-3}$, respectivamente.

T, K	$C_V, \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$	
	Ni	Ag
2	0,0041	0,00013
4	0,0080	0,0024
6	0,0132	0,0089
8	0,0186	0,0242
10	0,0238	0,0478
12	0,0304	0,0830
14	0,0379	0,134
16	0,0483	0,201

13.21 Empleando el gráfico de la figura 13-9, estimar la capacidad calórica a temperatura ambiente del (a) sodio, (b) oro, (c) cobre y (d) diamante. Comparar con los valores experimentales.

13.22 (a) Considerar un sistema compuesto de N osciladores armónicos de frecuencia ν que siguen la estadística de Maxwell-Boltzmann. Hallar la capacidad calórica del sistema a volumen constante. (b) Einstein usó este modelo como primer intento de aplicar métodos estadísticos para explicar la capacidad calórica de los sólidos. Introduciendo la constante $\Theta_E = h\nu/k$, expresar C_V en función de Θ_E/T . Comparar con la expresión de C_V en la teoría de Debye. Analizar la manera de distinguir las dos teorías. [Nota: La teoría de Einstein fue descartada porque era imposible hallar un valor de Θ_E para cada sustancia que diera resultados acordes con los experimentos tanto a altas como a bajas temperaturas.]

13.23 Demostrar que la capacidad calórica a volumen constante de un gas ideal de Bose-Einstein está dada por

$$C_V = \frac{3}{2}R \left[1 + \frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{N}{Z} \right) + \frac{4}{3^{3/2}} \left(\frac{N}{Z} \right)^2 + \dots \right],$$

donde Z está dada por la ec. (10.38). Estudiar el efecto de la degeneración de gases sobre la capacidad calórica del helio a temperatura ambiente y a 1 atm de presión.

13.24 Demostrar que la capacidad calórica a volumen constante de un gas ideal de Fermi-Dirac está dada por

$$C_V = \frac{3}{2}Rn^2 \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right) \left[1 - \frac{3n^2}{10} \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right].$$

Usando este resultado estimar la capacidad calórica debida a los electrones libres en un metal. Verificar que excepto a temperaturas muy bajas, la capacidad calórica electrónica es despreciable frente a la capacidad calórica de la red, dada por la teoría de Debye.

13.25 Demostrar que la temperatura para la cual las capacidades calóricas de la red y electrónica son iguales es

$$T_e = (5\Theta_E/24\pi^2\Theta_D)^{2/3}.$$

Estimar esta temperatura para algunos metales. Mostrar que para temperaturas menores que T_e la capacidad calórica electrónica es mayor que la de la red, y a la inversa para temperaturas mayores que T_e . [Sugerencia: Usar los resultados de los problemas 13.19 y 13.24.]

13.26 A partir de la expresión dada en el problema 13.24 para la capacidad calórica de un gas ideal de Fermi-Dirac, demostrar que cuando $\epsilon_F/kT \ll 1$, la entropía del gas es

$$S = (NRn^2/2) (kT/\epsilon_F) \times [1 - (n^2/10) (kT/\epsilon_F)^2 + \dots].$$

13.27 Estimar el valor de N/Z para N_s a temperatura y presión normales, donde Z es la función de partición clásica. Determinar el efecto relativo del término de degeneración de gases en la expresión (13.32) de la presión de un gas de Bose-Einstein. Determinar también el efecto sobre la capacidad calórica de este gas (dada en el problema 13.23).

13.28 Estimar la presión de punto cero del gas de electrones en un metal. En vista del valor obtenido, explicar cómo los electrones permanecen dentro del metal.

13.29 Demostrar que en la estadística cuántica la entropía de un sistema de partículas está dada por

$$S = \frac{U}{T} + \alpha kN \\ \pm k \sum_i g_i \ln(1 \pm e^{-\epsilon_i/kT}),$$

donde el signo positivo (negativo) corresponde a la estadística de Fermi-Dirac (Bose-Einstein). Demostrar también que en ambos casos, si α es muy pequeña, la expresión de S se reduce a la ec. (11.28). [Sugerencia: Demostrar primero, usando la ec. (13.3) o la (13.13), que

$$\ln P = \sum_i \pm g_i \left[\left(1 \pm \frac{n_i}{g_i}\right) \ln \left(1 \pm \frac{n_i}{g_i}\right) \right. \\ \left. \pm \left(\frac{n_i}{g_i}\right) \ln \left(\frac{n_i}{g_i}\right) \right].$$

13.30 En la estadística cuántica, la función de partición se define mediante

$$Z_\epsilon = \pm \sum_i g_i \ln(1 \pm e^{-\epsilon_i/kT}),$$

donde el signo positivo (negativo) se refiere a la estadística de Fermi-Dirac

(Bose-Einstein). Demostrar que el número total de partículas, la energía total y la entropía están dados por

$$N = -(\partial Z_\epsilon / \partial \alpha)_T, \\ U = kT^2 (\partial Z_\epsilon / \partial T)_\alpha, \\ S = kT (\partial Z_\epsilon / \partial T)_\alpha + \alpha kN + kZ_\epsilon.$$

[Sugerencia: Con respecto a la última expresión, ver la expresión de S dada en el problema 13.29.]

13.31 Demostrar que cuando α es muy pequeña, $Z_\epsilon = e^{-\alpha} Z$, donde Z_ϵ es la función de partición cuántica definida en el problema 13.30 y Z es la función de partición clásica definida en la ec. (10.22). Demostrar también que la primera relación dada en el problema 13.30 se reduce a una identidad, mientras que la segunda y la tercera se reducen respectivamente a la ec. (10.24) y a la ec. (11.28).

13.32 Demostrar que la función de partición de un gas de fotones es $Z = (8\pi^4 V/45) (kT/hc)^3$. Demostrar luego que la energía total de un gas de fotones es $U = (8\pi^4 V/15) (kT)^4/(hc)^3$ y que la entropía es $S = 4U/3T$. [Sugerencia: Notar que $\int_0^\infty x^3 \ln(1 - e^{-x}) dx = -\pi^4/15$; usar las relaciones dadas en el problema 13.30.]

APENDICES

APENDICE

NOTAS COMPLEMENTARIAS

I. Mecánica relativista

Consideremos dos observadores inerciales O y O' en movimiento relativo. Si \mathbf{v} es la velocidad de O' respecto a O , la velocidad de O respecto a O' es $-\mathbf{v}$. Orientaremos los ejes XYZ y $X'Y'Z'$, fijos respectivamente a O y O' de modo que los ejes X y X' sean paralelos a la velocidad relativa \mathbf{v} y los ejes Y e Y' sean paralelos entre sí. Luego, los ejes Z y Z' también serán paralelos (fig. A-1).

Supongamos que cuando O y O' coinciden se produce una señal luminosa en el origen común. Si c es la velocidad de la luz en el vacío medida por O , después de un tiempo t el observador O ve que el frente de onda de la señal es una esfera de radio r , por lo que cuando la onda llega al punto A debemos tener $r = ct$; pero como

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2,$$

se tiene

$$x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2 = 0. \quad (\text{A.1})$$

Se acepta como principio básico que la velocidad de la luz es la misma para todos los observadores inerciales. El fundamento experimental de esta aserción

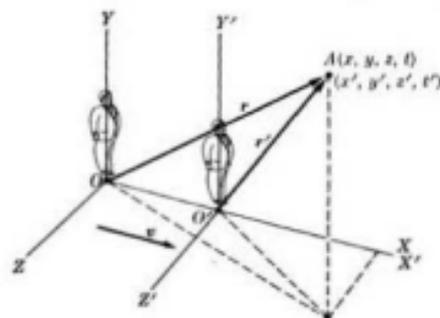


Fig. A-1. Sistemas de referencia en movimiento traslacional relativo uniforme.

está constituido por los experimentos de Michelson y Morley, quienes midieron la velocidad de la luz respecto a la tierra en diversas direcciones y hallaron que el resultado es el mismo independientemente de la dirección de propagación. Por lo tanto, si el observador O' también mide c para la velocidad de la luz en todas direcciones (de modo que para O' el frente de onda de la señal también es una esfera), debe escribir $r' = ct'$ cuando la onda luminosa llega al punto A , o sea

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 - c^2 t'^2 = 0. \quad (\text{A.2})$$

Nótese que el observador O' no sólo mide para el punto A coordenadas espaciales diferentes de las que mide O , sino que también el tiempo de llegada de la señal luminosa a A es diferente del tiempo medido por O . Esto es necesario para que la velocidad de la luz sea la misma para ambos observadores.

La tarea siguiente es obtener una transformación que relacione las cantidades (x, y, z, t) y (x', y', z', t') medidas por O y O' y que dé el desplazamiento espacial y el intervalo de tiempo que separa los dos eventos que son: (1) la emisión de una señal luminosa cuando O y O' coinciden y (2) su llegada a A , satisfaciendo ambos conjuntos de cantidades las ecs. (A.1) y (A.2), respectivamente. La simetría del problema sugiere que $y' = y$ y $z' = z$. Además, como $OO' = vt$ para el observador O , debe ser $x = vt$ para $x' = 0$ (punto O'). Esto sugiere que hagamos $x' = k(x - vt)$, donde k es una constante a determinar. Como t' es diferente de t , también podemos suponer que $t' = a(t - bx)$, donde a y b son constantes a determinar (para la transformación Galileana es $k = a = 1$ y $b = 0$). Haciendo todas estas sustituciones en la ec. (A.2), tenemos

$$k^2(x^2 - 2vxt + v^2t^2) + y^2 + z^2 = c^2 a^2 (t^2 - 2bxt + b^2 x^2),$$

o sea, agrupando términos,

$$(k^2 - b^2 a^2 c^2)x^2 - 2(k^2 v - b a^2 c^2)xt + y^2 + z^2 = (a^2 - k^2 v^2/c^2)c^2 t^2.$$

Esta ecuación debe ser idéntica a la ec. (A.1). En consecuencia

$$k^2 - b^2 a^2 c^2 = 1, \quad k^2 v - b a^2 c^2 = 0, \quad a^2 - k^2 v^2/c^2 = 1.$$

Despejando k , a y b de estas tres ecuaciones, tenemos

$$k = a = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad \text{y} \quad b = v/c^2. \quad (\text{A.3})$$

Por lo tanto, la transformación compatible con la invariancia de la velocidad de la luz es

$$\begin{aligned} x' &= (x - vt)/\sqrt{1 - v^2/c^2}, \\ y' &= y, \\ z' &= z, \\ t' &= (t - vx/c^2)/\sqrt{1 - v^2/c^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Este conjunto de relaciones se denomina *transformación de Lorentz*. Debido a la relación establecida entre las ecs. (A.1) y (A.2), decimos que la transformación de Lorentz deja invariante la forma cuadrática $x^2 + y^2 + z^2 - c^2t^2 = 0$ al pasar al segundo sistema de coordenadas. La transformación de Lorentz se reduce a la de Galileo cuando $v \ll c$.

Si m_0 es la masa de una partícula cuando está en reposo respecto a un observador, el momentum de la partícula cuando se mueve con velocidad \mathbf{v} respecto al observador es

$$\mathbf{p} = km_0\mathbf{v} = \frac{m_0\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = m\mathbf{v}, \quad (\text{A.5})$$

donde

$$m = km_0 = m_0/\sqrt{1 - v^2/c^2} \quad (\text{A.6})$$

es la masa efectiva de la partícula respecto al observador. La expresión (A.5) se reduce a la expresión no relativista del momentum cuando $v \ll c$.

Se define la fuerza que actúa sobre una partícula mediante

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{m_0\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right).$$

Para calcular la energía cinética de una partícula, recordemos que $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ y que $\mathbf{v} \cdot d\mathbf{v} = v dv$. Luego:

$$\begin{aligned} E_k &= \int_0^v \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \int_0^v \frac{d}{dt} \left(\frac{m_0\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right) \cdot d\mathbf{r} \\ &= \int_0^v \mathbf{v} \cdot d \left(\frac{m_0\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right). \end{aligned}$$

Integrando por partes tenemos

$$\begin{aligned} E_k &= \frac{m_0v^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - \int_0^v \frac{m_0v dv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \\ &= \frac{m_0v^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + m_0c^2\sqrt{1 - v^2/c^2} - m_0c^2. \end{aligned}$$

Combinando los dos primeros términos con un denominador común, podemos escribir

$$E_k = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - m_0c^2 = (m - m_0)c^2. \quad (\text{A.7})$$

Podemos decir entonces que como la masa depende de la velocidad conforme a la ec. (A.6), se puede considerar que la ganancia de energía cinética de una partícula es una ganancia de masa $\Delta m = m - m_0$. Podemos extender esta inter-

pretación asociando un cambio de masa Δm con cualquier cambio ΔE de energía de un sistema de partículas. Ambos cambios están relacionados por la expresión

$$\Delta E = (\Delta m)c^2. \quad (\text{A.8})$$

La cantidad m_0c^2 se denomina *energía en reposo* de la partícula y la cantidad

$$E = E_k + m_0c^2 \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = mc^2 \quad (\text{A.9})$$

es la *energía total* de la partícula. La energía total de una partícula tal como se ha definido aquí incluye la energía cinética y la energía en reposo, pero no la energía potencial.

Combinando las ecs. (A.5) y (A.9) vemos que

$$v = \frac{c^2 \mathbf{p}}{E}. \quad (\text{A.10})$$

Utilizando la ec. (A.5) para eliminar v en la ec. (A.10), obtenemos

$$E = c \sqrt{m_0^2 c^2 + p^2}. \quad (\text{A.11})$$

Como $E_k = E - m_0c^2 = c \sqrt{m_0^2 c^2 + p^2} - m_0c^2$, cuando la velocidad es pequeña respecto a c (o cuando p es pequeño respecto a m_0c), tenemos que

$$E_k = \frac{1}{2m_0} p^2 + \frac{3}{8} \frac{p^4}{m_0^3 c^2} + \dots, \quad (\text{A.12})$$

que se reduce a la fórmula no relativista $E_k = p^2/2m_0$ cuando $p \ll m_0c$.

Se presenta un caso especial interesante cuando la partícula tiene masa en reposo nula ($m_0 = 0$), que es el caso del fotón y del neutrino. Entonces la ec. (A.11) se reduce a

$$E = cp \quad \text{ó} \quad p = E/c. \quad (\text{A.13})$$

Sustituyendo este resultado en la ec. (A.10) se obtiene $v = c$. Luego, una partícula con masa en reposo nula sólo se puede mover con la velocidad de la luz y nunca puede estar en reposo en un sistema inercial.

También se puede escribir la ec. (A.11) en la forma

$$p^2 - E^2/c^2 = -m_0^2 c^2.$$

Como \mathbf{p} es una cantidad vectorial de componentes p_x, p_y, p_z respecto a las coordenadas XYZ utilizadas por el observador O , podemos escribir en vez de la ecuación anterior:

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 - E^2/c^2 = -m_0^2 c^2. \quad (\text{A.14})$$

Respecto a otro observador O' que se mueve con velocidad \mathbf{v} respecto a O , debemos tener

$$p_x'^2 + p_y'^2 + p_z'^2 - E'^2/c^2 = -m_0^2 c^2. \quad (\text{A.15})$$

La similitud entre las ecs. (A.14) y (A.15) y las ecs. (A.1) y (A.2) sugiere que hagamos la correspondencia

$$p_x \rightarrow x, \quad p_y \rightarrow y, \quad p_z \rightarrow z, \quad ct \rightarrow E/c$$

en la transformación de Lorentz (A.4) de las coordenadas espaciales y el tiempo para obtener la transformación del momentum y de la energía, es decir:

$$\begin{aligned} p'_x &= (p_x - vE/c^2) / \sqrt{1 - v^2/c^2}, \\ p'_y &= p_y, \\ p'_z &= p_z, \\ E' &= (E - vp_x) / \sqrt{1 - v^2/c^2}. \end{aligned} \tag{A.16}$$

Si tenemos un sistema de partículas que no interactúan, podemos escribir el momentum total del sistema en la forma $\mathbf{P} = \sum_i \mathbf{p}_i$ y la energía total en la forma

$$E = \sum_i m_i c^2 = M c^2,$$

donde $M = \sum_i m_i$. Aunque en la dinámica relativista es imposible definir el centro de masa, podemos definir una velocidad de centro de masa o velocidad \mathbf{v}_c del sistema conforme a la ec. (A.10):

$$\mathbf{v}_c = c^2 \mathbf{P} / E = \mathbf{P} / M. \tag{A.17}$$

En un sistema de referencia que se mueve con velocidad \mathbf{v}_c respecto a O , el momentum total del sistema es cero (el mismo se denomina sistema de referencia C o de momentum cero). Se puede probar este resultado como sigue: supongamos que el observador O' se mueve con velocidad \mathbf{v} respecto a O en dirección paralela a \mathbf{P} . Luego, de acuerdo con nuestra convención en la elección de los ejes de coordenadas, tenemos que $P_x = P$, $P_y = P_z = 0$ y $P'_x = P'$, $P'_y = P'_z = 0$. Luego, la primera relación de la ec. (A.16) da

$$P' = k(P - vE/c^2). \tag{A.18}$$

Si el observador O' está en el sistema de referencia C , debemos tener $P' = 0$. Esto requiere que $v = c^2 P / E$, que es igual a la velocidad v_c definida en la ec. (A.17).

II. Colisiones

En un sistema aislado de partículas (es decir, un sistema de partículas no sujeto a ninguna fuerza o acción externa), el momentum total y la energía total referidos a un sistema de referencia inercial permanecen constantes. Estas dos leyes de conservación no son independientes porque de acuerdo con la transformación de Lorentz (A.16) para la energía y el momentum, la conservación del momentum en todos los sistemas inerciales requiere también la conservación de la energía. Aplicaremos ahora estas leyes de conservación al análisis de colisiones.

Cuando dos partículas se aproximan una a otra, su interacción mutua cambia su movimiento, produciendo un intercambio de momentum y de energía. Decimos entonces que ha habido una *colisión*. En algunas colisiones (como las reacciones nucleares y químicas) las partículas finales no son idénticas a las iniciales. Cuando las partículas iniciales y finales son las mismas, la colisión se denomina *dispersión*.

En general, en un experimento de colisión conocemos en forma precisa el movimiento de las partículas antes de la colisión, ya que el mismo depende de cómo ha sido preparado el experimento. Por ejemplo, una partícula puede ser un protón o un electrón acelerado en un acelerador electrostático y la otra partícula puede ser un átomo que está prácticamente en reposo en el laboratorio. Luego observamos el estado final, es decir el movimiento de las dos partículas en puntos muy lejanos de la región en que colidieron (fig. A-2). Por otra parte, si conocemos las fuerzas que actúan entre las partículas, podemos predecir el estado final en tanto conozcamos el estado inicial. Por lo tanto, el análisis de experimentos de colisión suministra una información valiosa acerca de la interacción entre las partículas que coliden. Esta es una de las razones de por qué los experimentos de colisión interesan tanto al físico.

Como en la colisión sólo intervienen fuerzas internas, se conserva tanto el momentum como la energía. Sea \mathbf{p}_1 y \mathbf{p}_2 el momentum de cada partícula antes de la colisión y \mathbf{p}'_1 y \mathbf{p}'_2 el momentum después de la colisión. La conservación del momentum exige que

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2 \quad (\text{A.19})$$

La conservación de la energía requiere que

$$E_1 + E_2 = E'_1 + E'_2 \quad (\text{A.20})$$

donde cada energía está dada por la ec. (A.11), por lo que podemos escribir

$$c \sqrt{m_1^2 c^2 + p_1^2} + c \sqrt{m_2^2 c^2 + p_2^2} = c \sqrt{m_1'^2 c^2 + p_1'^2} + c \sqrt{m_2'^2 c^2 + p_2'^2} \quad (\text{A.21})$$

Trabajando adecuadamente con las ecs. (A.19) y (A.21) podemos hallar los momentos finales de las partículas en términos de los iniciales. Sin embargo, el trabajo algebraico involucrado es en general bastante complicado.

Recordando que $E = E_k + m_0 c^2$, donde E_k es la energía cinética, podemos escribir en vez de la ec. (A.20):

$$E_{k1} + m_1 c^2 + E_{k2} + m_2 c^2 = E'_{k1} + m_1' c^2 + E'_{k2} + m_2' c^2.$$

Introduzcamos una cantidad Q definida como el cambio de energía cinética durante la colisión

$$Q = (E'_{k1} + E'_{k2}) - (E_{k1} + E_{k2}) = (m_1 + m_2 - m_1' - m_2') c^2. \quad (\text{A.22})$$

Luego, Q es también igual a la variación de energías en reposo durante la colisión. Si $Q = 0$, se conserva la energía cinética en la colisión y la misma se denomina

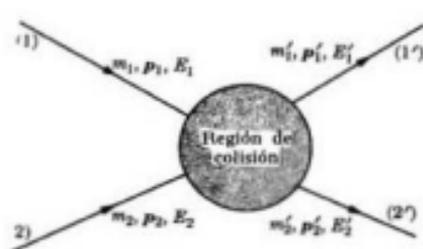


Fig. A-2. En una colisión se conserva el momentum total y la energía total.

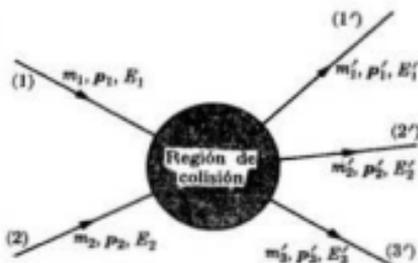


Fig. A-3. El momentum y la energía se conservan aunque no se conserve el número de partículas.

elástica. Cuando $Q < 0$, hay una disminución de energía cinética (o un aumento de masa) y tenemos una *colisión inelástica de primera especie*, también llamada *endoérgica*. Cuando $Q > 0$, hay un aumento de energía cinética de las partículas (o una disminución de masa) y tenemos una *colisión inelástica de segunda especie*, llamada *exoérgica*.

Cuando se producen más de dos partículas en una colisión (fig. A-3) las definiciones anteriores se convierten en

$$Q = (\sum E_k)_{\text{final}} - (\sum E_k)_{\text{inicial}} = [(\sum m_i)_{\text{inicial}} - (\sum m_i)_{\text{final}}]c^2. \quad (\text{A.23})$$

Cuando $Q < 0$, hay un umbral mínimo de energía cinética de las partículas incidentes necesario para que se produzca la colisión. Podemos calcular el umbral de energía cinética en el sistema de referencia L (o de laboratorio) teniendo en cuenta que las partículas que resultan están todas en reposo en el sistema C . En el ejemplo 9.3 obtuvimos la expresión del umbral de energía cinética.

En las reacciones nucleares a energías relativamente bajas, se puede tratar (en general) todas las partículas en forma no relativista, por lo que $E_k = p^2/2m$. Consideremos el caso en que un proyectil de masa en reposo m_1 y momentum p_1 colide con un núcleo, llamado blanco, de masa en reposo m_2 y en reposo en el

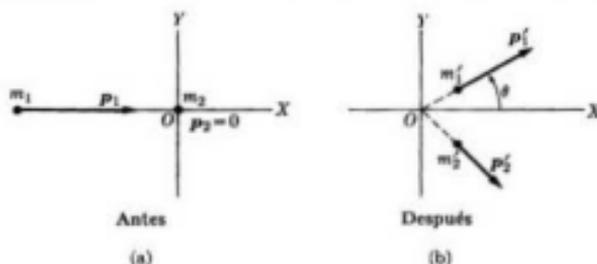


Fig. A-4. Relación entre los momenta en el sistema L antes y después de una colisión.

laboratorio ($\mathbf{p}_2 = 0$), como en la fig. A-4(a). Después de la colisión las partículas resultantes se mueven como en la fig. A-4(b). La conservación del momentum da $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2$ o sea $\mathbf{p}'_2 = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1$. Luego,

$$p_2'^2 = (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1)^2 = p_1^2 + p_1'^2 - 2p_1 p_1' \cos \theta.$$

Utilizando la definición (A.22) de Q , tenemos

$$\begin{aligned} Q &= \frac{p_1'^2}{2m_1'} + \frac{p_2'^2}{2m_2'} - \frac{p_1^2}{2m_1} \\ &= \frac{p_1'^2}{2m_1'} - \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{1}{2m_2'} (p_1^2 + p_1'^2 - 2p_1 p_1' \cos \theta) \end{aligned}$$

o sea

$$Q = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1'} + \frac{1}{m_2'} \right) p_1'^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_2'} - \frac{1}{m_1} \right) p_1^2 - \frac{p_1 p_1'}{m_2'} \cos \theta.$$

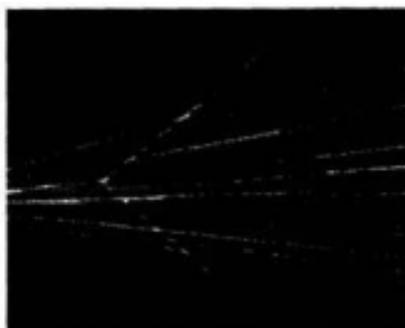
Recordando que $E_k = p^2/2m$, podemos expresar el resultado anterior en la forma

$$Q = E_{k1} \left(1 + \frac{m_1'}{m_2'} \right) - E_{k1} \left(1 - \frac{m_1}{m_2'} \right) - 2 \frac{\sqrt{m_1 m_1' E_{k1} E_{k1}'}}{m_2'} \cos \theta. \quad (\text{A.24})$$

Este resultado, conocido como *ecuación Q*, tiene muchas aplicaciones en la física nuclear. Cuando la colisión es elástica ($Q = 0$) y todas las partículas son idénticas ($m_1 = m_1' = m_2 = m_2'$), la conservación de la energía da $p_1'^2 + p_2'^2 = p_1^2$, mientras que de la conservación del momentum, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2$, obtenemos $p_1'^2 + p_2'^2 + 2\mathbf{p}'_1 \cdot \mathbf{p}'_2 = p_1^2$. Comparando estos resultados encontramos que



(a)



(b)

Fig. A-5. (a) Colisión de dos bolas de billar iguales. (b) Colisión de dos partículas α . En ambos casos una de las partículas estaba inicialmente en reposo en el sistema L ; después de la colisión, sus momenta forman ángulos de 90° en el sistema L . [Parte (a) es cortesía de *PSSC Physics*, D. C. Heath, Boston.]

$\mathbf{p}'_1 \cdot \mathbf{p}'_2 = 0$, o sea que \mathbf{p}'_1 es perpendicular a \mathbf{p}'_2 . Luego, en el sistema L , las dos partículas se mueven en ángulo recto después de la colisión. Esto se puede ver en la fotografía (fig. A-5a), que muestra la colisión de dos bolas de billar, una de las cuales estaba inicialmente en reposo. La fig. A-5(b) muestra la colisión de dos núcleos de helio en una cámara de niebla; el núcleo de helio incidente es una partícula α proveniente de una sustancia radioactiva y el blanco de helio pertenece al gas de la cámara. En ambos casos las dos partículas se mueven en ángulo recto después de la colisión.

Los procesos de captura constituyen otro caso interesante; una partícula de masa m_1 y momentum \mathbf{p}_1 colide con una partícula en reposo de masa m_2 y resulta una sola partícula de masa M . Luego, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_M$ y $Q = E_{kM} - E_{k1}$. Pero

$$E_{kM} = p_M^2/2M = p_1^2/2M = E_{k1}(m_1/M).$$

Por lo tanto

$$Q = -E_{k1}(1 - m_1/M). \quad (\text{A.25})$$

La cantidad $-Q$ es la energía de excitación de la partícula resultante, tal como la energía de excitación del núcleo compuesto en una reacción nuclear. En la mayoría de los casos $M \approx m_1 + m_2$, por lo que

$$Q = -E_{k1} \frac{m_2}{m_1 + m_2}. \quad (\text{A.26})$$

El proceso inverso del de captura, que se denomina explosión, ocurre cuando una partícula explota o se desintegra en dos o más fragmentos. Esto tiene lugar, por ejemplo, cuando explota una granada, cuando una partícula se desintegra en varias otras, o cuando se fisiona un núcleo. Consideraremos el caso en que la partícula, de masa m , está inicialmente en reposo en el sistema L , que coincide entonces con el sistema C . Si la partícula se divide en dos fragmentos de masas m_1 y m_2 , de modo que $Q = (m - m_1 - m_2)c^2$, tenemos, en la aproximación no relativista,

$$0 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \quad \text{y} \quad Q = p_1^2/2m_1 + p_2^2/2m_2.$$

Concluimos de la primera ecuación que $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2$ es decir $p_1 = p_2$. Luego, los dos fragmentos se mueven en direcciones opuestas con igual módulo de sus momenta. La segunda ecuación da entonces

$$Q = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) p_1^2 = \frac{1}{2\mu} p_1^2,$$

donde $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ es la masa reducida de las dos partículas. Luego, $p_1 = p_2 = (2\mu Q)^{1/2}$ y los dos fragmentos se separan con momenta bien definidos. Las energías cinéticas de las partículas también son bien definidas y están dadas por

$$E_{k1} = \frac{p_1^2}{2m_1} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} Q, \quad E_{k2} = \frac{p_2^2}{2m_2} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} Q. \quad (\text{A.27})$$

Si se trata las partículas en forma relativista, el resultado es

$$E_{k1} = \frac{m - m_1 + m_2}{2m} Q, \quad E_{k2} = \frac{m - m_2 + m_1}{2m} Q.$$

Cuando la partícula inicial se divide en más de dos fragmentos, sus momenta y sus energías no tienen valores únicos. Las ecuaciones de conservación son

$$0 = \sum \mathbf{p}_i \quad \text{y} \quad Q = \sum E_{ki},$$

y estas ecuaciones pueden ser satisfechas con varios valores de \mathbf{p}_i . En el caso particular de una explosión o desintegración en tres fragmentos, de modo que

$$0 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3, \quad Q = E_{k1} + E_{k2} + E_{k3}$$

hay una manera gráfica simple de representar la distribución de momentum entre las tres partículas. Dibujamos un triángulo equilátero de altura Q (fig. A-6); las distancias perpendiculares de cualquier punto P a los lados del triángulo dan los valores de la energía de los tres fragmentos en una desintegración determinada. Además, la conservación del momentum requiere que el punto P esté (en el caso no relativista) dentro del círculo de radio $\frac{1}{3}Q$ inscrito en el triángulo (en el caso relativista la curva se aparta ligeramente de una circunferencia).

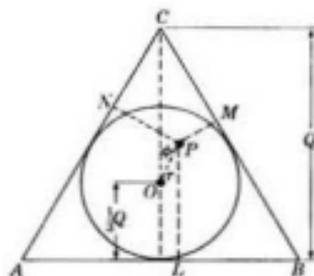


Fig. A-6. Diagrama de Dalitz para la desintegración en tres partículas.

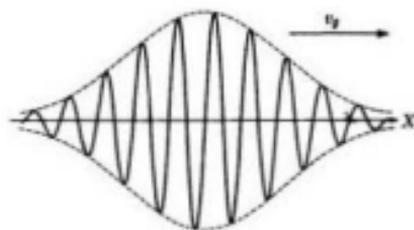


Fig. A-7. Pulso ondulatorio.

Esta representación se denomina *diagrama de Dalitz* y se usa extensamente para determinar si un modo particular de desintegración de una partícula corresponde a una desintegración en tres partículas. Para probar nuestro enunciado, nótese que necesariamente $p_1 + p_2 \geq p_3$ y que se puede expresar las tres energías en la forma

$$E_{k1} = PN = \frac{1}{3}Q + r \cos(\phi - \frac{2}{3}\pi),$$

$$E_{k2} = PM = \frac{1}{3}Q + r \cos(\phi + \frac{2}{3}\pi),$$

$$E_{k3} = PL = \frac{1}{3}Q + r \cos \phi.$$

III. Velocidad de grupo

Consideremos una onda armónica que se puede describir mediante $\xi = A \sin(kx - \omega t)$ o mediante la expresión compleja $\xi = Ae^{i(kx - \omega t)}$. Esta onda tiene frecuencia angular ω y longitud de onda $\lambda = 2\pi/k$. La cantidad $v = \omega/k$ se denomina *velocidad de fase*. Esta no es necesariamente la velocidad que observamos al analizar un movimiento ondulatorio. Si tenemos una onda armónica continua (o como se dice a veces, un tren de ondas de longitud infinita, como en las expresiones dadas anteriormente, la misma tiene una sola longitud de onda y una sola frecuencia. Pero una onda de esta naturaleza no es adecuada para transmitir una señal, porque ésta implica algo que empieza en un cierto instante y termina un cierto tiempo más tarde. Esto significa que la onda debe tener una forma similar a la indicada en la fig. A-7. Una onda de esta forma se denomina *pulso*. En consecuencia, si medimos la velocidad con que se trasmite la señal, estamos implicando esencialmente la velocidad con que viaja este pulso.

A primera vista podríamos decir: bueno, esta velocidad es justamente la velocidad de fase $v = \omega/k$, ya que ésta es la velocidad de propagación de las ondas. Sin embargo, aquí entra un factor importante. La onda o pulso representado en la fig. A-7 *no* es armónico, ya que su amplitud no es constante a lo largo del eje X. Debemos hacer entonces un análisis de Fourier de la onda. Al hacerlo, descubrimos que realmente contiene varias frecuencias y longitudes de onda. Por supuesto que si la velocidad de propagación es independiente de la frecuencia (es decir, si el medio en que se propaga no es dispersivo), todas las componentes de Fourier del pulso viajan con la misma velocidad y estamos en lo cierto al decir que la velocidad del pulso es igual a la velocidad de las ondas. Sin embargo, en un medio dispersivo, cada componente de Fourier tiene su propia velocidad de propagación, por lo que debemos examinar la situación con más cuidado.

Consideraremos para simplificar el caso en que el pulso se puede separar en dos frecuencias ω y ω' que son casi iguales, de modo que $\omega' - \omega$ es muy pequeña. Supondremos también que sus amplitudes son iguales. Luego, usando una onda sinusoidal, tenemos

$$\begin{aligned}\xi &= A \sin(kx - \omega t) + A \sin(k'x - \omega' t) \\ &= A[\sin(kx - \omega t) + \sin(k'x - \omega' t)] \\ &= 2A \cos \frac{1}{2}[(k' - k)x - (\omega' - \omega)t] \sin \frac{1}{2}[(k' + k)x - (\omega' + \omega)t].\end{aligned}$$

Como tanto ω y ω' como k y k' son casi iguales, podemos reemplazar $\frac{1}{2}(\omega' + \omega)$ por ω y $\frac{1}{2}(k' + k)$ por k , de modo que

$$\xi = 2A \cos \frac{1}{2}[(k' - k)x - (\omega' - \omega)t] \sin(kx - \omega t). \quad (\text{A.28})$$

La ec. (A.28) representa un movimiento ondulatorio cuya amplitud está modulada. La modulación está dada por el factor

$$2A \cos \frac{1}{2}[(k' - k)x - (\omega' - \omega)t].$$



Fig. A-8. Velocidad de fase y velocidad de grupo.

Este factor está indicado en la fig. A-8. Por su parte, la amplitud moduladora corresponde a un movimiento ondulatorio que se propaga con velocidad

$$v_g = \frac{\omega' - \omega}{k' - k} = \frac{d\omega}{dk}, \quad (\text{A.29})$$

que se denomina *velocidad de grupo*. Esta es la velocidad con que se propaga la onda de amplitud, representada con líneas de trazos en la fig. A-8. Si recordamos que $\omega = kv$, la ec. (A.29) se convierte en

$$v_g = v + k \frac{dv}{dk}. \quad (\text{A.30})$$

Podemos obtener el mismo resultado representando la onda en notación compleja.

Si la velocidad de fase es independiente de la longitud de onda, $dv/dk = 0$ y $v_g = v$. Por lo tanto, en los medios no dispersivos no hay diferencia entre la velocidad de fase y la de grupo, como vimos anteriormente. Pero en un medio dispersivo la velocidad de grupo puede ser mayor o menor que la de fase. Podemos concluir, entonces, que el máximo del pulso de la fig. A-7 se propaga con la velocidad de grupo v_g . En la mecánica cuántica una partícula localizada en una región Δx está representada por un paquete de ondas y la velocidad de la partícula, que es equivalente a la velocidad de señal, es igual a la velocidad de grupo.

Aunque hemos deducido la ec. (A.30) para el caso de dos frecuencias solamente, vale también para el caso de un pulso que contiene frecuencias en el intervalo entre $\omega - \Delta\omega$ y $\omega + \Delta\omega$. Sin embargo, advertimos al lector que el tema es realmente más complejo que lo que nuestra presentación pueda indicar; una discusión completa del mismo está más allá del objetivo de este libro.

IV. Algunas integrales útiles

En el capítulo 10 apareció una integral de la forma $I = \int_0^\infty e^{-ax^2} dx$. Calcularemos ahora esta integral. Si en vez de la variable x , usamos el símbolo y para la variable de integración, podemos escribir $I = \int_0^\infty e^{-y^2} dy$. Multiplicando estas dos expresiones tenemos

$$I^2 = \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-(x^2+y^2)} dx dy.$$

Se puede considerar que esta integral doble se extiende al primer cuadrante del plano XY. El resultado de la integral doble no se debe alterar si en vez de coordenadas cartesianas (x, y) usamos coordenadas polares (r, θ) . Como $x^2 + y^2 = r^2$, tenemos (reemplazando el elemento de área $dx dy$ por $r dr d\theta$)

$$I^2 = \int_0^{\pi/2} \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr d\theta = \frac{\pi}{2} \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr = \frac{\pi}{4\alpha}.$$

Por lo tanto

$$I = \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \quad (\text{A.31})$$

Por derivaciones sucesivas respecto a α obtenemos

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}, \quad (\text{A.32})$$

$$\int_0^{\infty} x^4 e^{-x^2} dx = \frac{3}{8} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}}, \quad (\text{A.33})$$

y así sucesivamente. Por otra parte, tenemos por integración directa

$$\int_0^{\infty} x e^{-x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \quad (\text{A.34})$$

y por derivación de la ec. (A.34) respecto a α hallamos

$$\int_0^{\infty} x^3 e^{-x^2} dx = \frac{1}{2\alpha^2}. \quad (\text{A.35})$$

V. La fórmula de Stirling

En los capítulos 10 y 13 apareció varias veces la expresión $\ln x!$ (donde x es un entero). Cuando x es muy grande, la siguiente expresión es una aproximación adecuada para $\ln x!$:

$$\ln x! = x \ln x - x, \quad (\text{A.36})$$

que se denomina *fórmula de Stirling*. Se puede probar fácilmente en la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \ln x! &= \ln 1 + \ln 2 + \ln 3 + \dots + \ln(x-1) + \ln x \\ &= \sum_1^x \ln x, \quad \text{sólo si } x \text{ es un entero.} \end{aligned}$$

Pero si x es muy grande, podemos reemplazar la suma por una integral sin mucho error y escribir

$$\ln x! \approx \int_1^x \ln x dx.$$

Integrando por partes con $u = \ln x$ y $dv = x$, obtenemos finalmente

$$\ln |x| = x \ln x - x + 1.$$

Se puede despreciar el 1 frente a x , con lo que resulta la ec. (A.36).

VI. Multiplicadores indeterminados de Lagrange

Es un método que sirve para hallar los puntos críticos de una función de varias variables $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ cuando las variables no son independientes sino que están vinculadas por ciertas relaciones. Supongamos, por ejemplo, que los vínculos están dados por $\phi_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$ y $\phi_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$. Sólo tenemos entonces $n - 2$ variables independientes. Los puntos críticos de $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ son los valores de x_1, x_2, \dots, x_n para los cuales $dF = 0$ para pequeñas variaciones de las variables. Pero

$$dF = \frac{\partial F}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial F}{\partial x_2} dx_2 + \dots + \frac{\partial F}{\partial x_n} dx_n = 0 \quad (\text{A.37})$$

no implica que $\partial F/\partial x_i = 0$ porque las variaciones dx_1, dx_2, \dots, dx_n no son independientes, ya que están restringidas por las condiciones

$$d\phi_1 = \frac{\partial \phi_1}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial \phi_1}{\partial x_2} dx_2 + \dots + \frac{\partial \phi_1}{\partial x_n} dx_n = 0 \quad (\text{A.38})$$

y

$$d\phi_2 = \frac{\partial \phi_2}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial \phi_2}{\partial x_2} dx_2 + \dots + \frac{\partial \phi_2}{\partial x_n} dx_n = 0. \quad (\text{A.39})$$

Multipliquemos las ecs. (A.38) y (A.39) por dos cantidades arbitrarias α y β y sumémoslas a la ec. (A.37). El resultado es

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial F}{\partial x_i} + \alpha \frac{\partial \phi_1}{\partial x_i} + \beta \frac{\partial \phi_2}{\partial x_i} \right) dx_i = 0.$$

Como ahora tenemos $n + 2$ variables con α y β arbitrarias, esta ecuación implica que

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} + \alpha \frac{\partial \phi_1}{\partial x_i} + \beta \frac{\partial \phi_2}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (\text{A.40})$$

Este sistema de n ecuaciones nos permite obtener x_1, x_2, \dots, x_n en un punto crítico de F en función de α y β . Estas se determinan por sustitución en $\phi_1 = 0$ y $\phi_2 = 0$ y luego se calcula x_1, x_2, \dots, x_n . En los ejemplos 10.1, 13.1 y 13.4 usamos este método para obtener la partición más probable de un sistema de partículas sujeto a las condiciones (vínculos) de conservación de las partículas y conservación de la energía.

VII. Detección de partículas

El análisis de procesos en que intervienen partículas fundamentales o núcleos requiere técnicas que no sólo revelen el paso de una partícula por una región, sino que además nos permitan obtener información sobre algunas propiedades cinemáticas. Necesitamos conocer el tiempo de tránsito, la dirección del movimiento, la velocidad, el momentum o la energía y algunas propiedades intrínsecas como la carga, la masa o la dirección del espín de la partícula. Ningún método de detección es por sí solo capaz de dar información sobre todas estas cantidades. En general se emplea una combinación de dispositivos de detección para obtener la información necesaria en un experimento determinado.

Las técnicas de detección dependen de los efectos que produce una partícula cargada al moverse a través de una sustancia. Cuando una partícula cargada atraviesa la materia, da lugar a excitación e ionización de las moléculas del material. Esta ionización es la propiedad en que se basan casi todos los instrumentos utilizados para la detección de partículas cargadas. Se puede usar instrumentos similares para radiaciones sin carga (rayos X y neutrones, por ejemplo), porque por medio de una colisión suministran energía a partículas cargadas, que luego ocasionan ionización. Los diferentes tipos de instrumentos difieren en lo que respecta al material donde se produce la ionización y a la forma en que se observa o mide.

Muchos instrumentos están basados en la producción de ionización en un gas. Es necesario separar y recoger los iones negativos y positivos formados porque si permanecieran uno cerca de otro se recombinarían en un tiempo muy corto y no se podría obtener ningún efecto eléctrico que revelara la presencia de la partícula. La separación y recolección de iones se hace con un campo eléctrico, resultando instrumentos diferentes según que la intensidad del campo sea pequeña, grande o intermedia. También se puede producir ionización en un líquido o en un sólido. Cuando se produce en un gas sobresaturado, en un líquido sobrecalentado o en una emulsión fotográfica, se pueden hacer visibles las trayectorias de las partículas.

Cuando las partículas chocan contra ciertos materiales líquidos o sólidos luminiscentes, parte de la energía utilizada en la ionización y excitación moleculares, se vuelve a emitir como luz visible o ultravioleta. A veces, se puede observar esta luz a simple vista, otras puede ser necesario utilizar dispositivos más sensibles para detectarla. Consideraremos algunos de los métodos de detección comúnmente utilizados; un tratamiento más detallado está más allá de los objetivos de este libro.

A. El método de centelleo. Hacia 1900 se encontró que las partículas α producen luminiscencia en el sulfuro de zinc, el platino-cianuro de bario y el diamante. Esta luminiscencia consiste en un gran número de destellos individuales que es posible ver con una lupa. Experimentos cuidadosos han mostrado que cada partícula α produce un centelleo, por lo que el número de partículas α que incide sobre una pantalla de detección está dado directamente por el número de centelleos que se cuenta. El conteo se puede hacer por medio de un micros-

copio de unos 30 aumentos, pudiéndose obtener una buena precisión aunque con dificultad. Este método es particularmente útil para contar partículas α en presencia de otras radiaciones, porque la pantalla de sulfuro de zinc es bastante insensible a los rayos β y γ . Rutherford lo empleó en 1910 para analizar la dispersión de partículas α por núcleos en hojas delgadas.

El empleo de contadores de centelleo se generalizó abundantemente debido al descubrimiento de nuevas sustancias luminiscentes que también son sensibles a los rayos β y γ , y al desarrollo de tubos fotomultiplicadores altamente eficientes para detectar la luminiscencia. Los nuevos materiales incluyen: *sales inorgánicas*, principalmente halogenuros alcalinos, que contienen pequeñas cantidades de impurezas como activadoras de la luminiscencia (yoduro de sodio o de potasio activado con talio, por ejemplo); *materiales orgánicos cristalinos*, como el naftaleno, el antraceno y el estilbena; y soluciones de compuestos orgánicos como el terpenil disuelto en xileno. El tubo fotomultiplicador, que reemplaza al microscopio y al observador, convierte los centelleos provenientes de la sustancia luminiscente en pulsos eléctricos amplificados que se puede contar o analizar de alguna otra forma por medio de equipos electrónicos apropiados. Los contadores de centelleo mo-

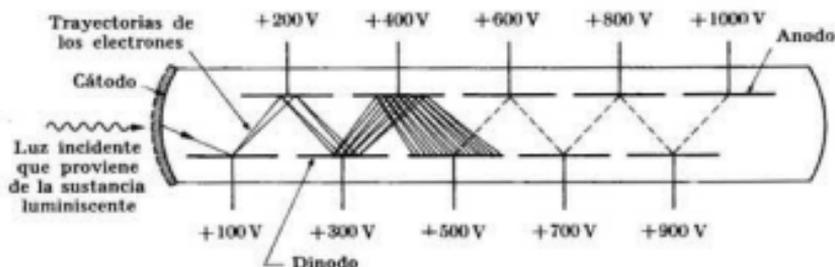


Fig. A-9. Tubo fotomultiplicador (esquemático).

ernos pueden detectar y registrar muchos millones de destellos por segundo y es posible usarlos con radiaciones intensas.

La fig. A-9 muestra un diagrama esquemático de un tubo fotomultiplicador. La luz proveniente de la sustancia luminiscente incide sobre el cátodo (que se hace habitualmente de antimonio y cesio) y expulsa electrones por medio del efecto fotoeléctrico. El tubo tiene varios electrodos denominados *dinodos*, a los cuales se aplica potenciales progresivamente más altos. Los fotoelectrones son acelerados por el campo eléctrico entre el cátodo y el primer dinodo, que está a potencial positivo respecto al del cátodo, y chocan contra el dinodo. Los electrones acelerados suministran a los del dinodo energía suficiente como para que algunos sean expulsados. Puede haber hasta diez electrones secundarios por cada electrón que choca contra el dinodo. El campo eléctrico dirige estos electrones secundarios hacia el segundo dinodo. El proceso se repite y la corriente electrónica se amplifica a medida que los electrones se aceleran de dinodo a dinodo. La corriente de salida, o pulso, en el ánodo puede ser más de un millón de veces mayor que

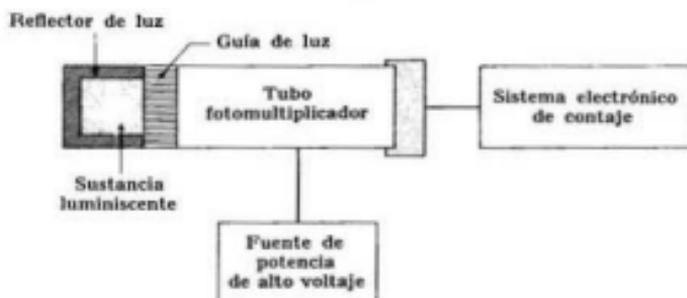


Fig. A-10. Detector de centelleo (esquemático).

la corriente emitida originariamente por el cátodo. Cada partícula incidente sobre la sustancia luminiscente origina, entonces, un pulso que entra en un sistema electrónico donde es amplificado y contado. También se han desarrollado sistemas electrónicos que miden la energía de las partículas incidentes; el instrumento resultante se denomina *espectrómetro de centelleo*. La fig. A-10 muestra un diagrama esquemático de un detector de centelleo.

B. Instrumentos de ionización: cámara de ionización, contador proporcional y contador de Geiger-Müller. El principio en que se basan estos instrumentos es la producción de ionización en un gas y la separación y recolección de los iones por medio de un campo eléctrico. Explicaremos las diferencias entre los tres sistemas con ayuda de la fig. A-11, que muestra una cámara conductora cilíndrica a lo largo de cuyo eje hay un electrodo conductor aislado de ella. La cámara contiene un gas a una presión de una atmósfera o menor. Se mantiene un voltaje V entre la pared y el electrodo central a través de la resistencia R . El electrodo central está a un potencial positivo respecto al de la pared de la cámara.

Supongamos que se produce ionización en el gas debido al pasaje de una partícula cargada. Cada par de iones está formado por un ion positivo y un electrón. Para una ionización inicial determinada, el número de pares de iones recolectado es función del voltaje aplicado. En la fig. A-11(b) las curvas (1) y (2) de recolección total de iones están representadas en función del voltaje aplicado para dos tipos diferentes de radiaciones ionizantes, tal como una partícula alfa y una beta o dos partículas beta de energía diferente. Por conveniencia, se ha usado el logaritmo del número n de pares de iones como ordenada. Si no hay voltaje entre los electrodos, los iones se recombinan y no aparece un pulso en el contador. A medida que aumenta el voltaje, a unos pocos volts digamos, hay competencia entre la pérdida de pares de iones por recombinación y el retiro de iones por recolección en los electrodos, por lo que algunos electrones llegan al electrodo central. A un voltaje V_1 (de 10 volts quizás) la pérdida de iones por recombinación es despreciable y la gran mayoría de los electrones producidos llegan al electrodo central. A medida que V aumenta, n permanece constante hasta que

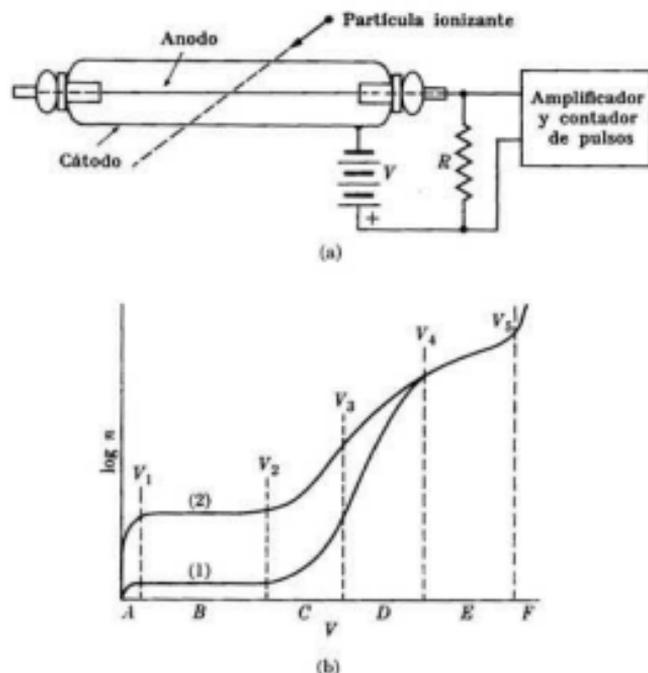


Fig. A-11. (a) Contador a gas con el circuito asociado (esquemático). (b) Número de pares de iones recolectados en el electrodo central en función del voltaje para dos sucesos [curvas (1) y (2)] con números totalmente diferentes de pares de iones primarios producidos.

se alcanza un voltaje V_2 ; este voltaje puede ser de algunas decenas o centenares de volts, según las condiciones del experimento. La región B entre V_1 y V_2 , en la cual el número de pares de iones recolectados es independiente del voltaje aplicado y en la cual la curva es horizontal, se denomina *región de cámara de ionización*.

Cuando se aumenta el voltaje por encima de V_2 , n aumenta debido a un fenómeno llamado *multiplicación gaseosa* o *amplificación gaseosa*. Los electrones liberados en la ionización primaria adquieren antes de llegar al ánodo energía suficiente como para producir una ionización adicional al chocar con las moléculas del gas, y n crece casi exponencialmente con V . Cada electrón inicial produce una pequeña "avalancha" de electrones; la mayoría de estos electrones secundarios se liberan cerca del electrodo central. Este comportamiento de las dos curvas por encima de V_2 , correspondiente a dos ionizaciones iniciales diferentes, es interesante. En un cierto intervalo de voltajes, hasta V_3 , cada electrón actúa independientemente y da su propia avalancha sin ser afectado por la presencia de los otros electrones. Por lo tanto las curvas (1) y (2) siguen paralelas

con una proporción de n constante. Entre V_2 y V_3 , o región *C*, el número de pares de iones recolectados es entonces proporcional a la ionización inicial; ésta es la región de *funcionamiento como contador proporcional*.

Por encima de V_3 , el efecto de multiplicación en el gas continúa aumentando rápidamente y a medida que hay más electrones produciendo avalanchas, éstas comienzan a interactuar entre sí: la carga espacial de los iones positivos de una avalancha inhibe el desarrollo de la avalancha siguiente. La descarga con más electrones iniciales (curva 2) es afectada antes que la de menos electrones iniciales (curva 1) y aumenta menos rápidamente que la segunda; las curvas (1) y (2) se aproximan hasta encontrarse para un voltaje aplicado V_4 . La región *D* entre V_3 y V_4 es la región de *proporcionalidad restringida*. Por encima de V_4 la carga recolectada se hace independiente de la ionización que la inició y las curvas (1) y (2) se superponen. La multiplicación en el gas aumenta el número total de iones hasta un valor que está limitado por las características de la cámara y del circuito externo. La región *E* por encima de V_4 es la región de *funcionamiento como contador Geiger-Müller*. Termina a un voltaje V_5 para el cual la descarga tiende a mantenerse indefinidamente; V_5 marca el final de la escala útil de voltaje: la región *F* que sigue es la de *descarga continuada*. Como resultado del comportamiento de los iones del gas en el campo eléctrico del contador, se ha desarrollado tres instrumentos de detección.

1. La *cámara de ionización*, que funciona a voltajes en la región *B*, está caracterizada por una recolección completa de todos los electrones liberados inicialmente por el pasaje de la partícula, sin amplificación en el gas. Bajo ciertas condiciones dará un pulso proporcional al número de estos electrones. Se utiliza para medir la intensidad de una radiación ionizante midiendo el grado de ionización.

2. El *contador proporcional*, que opera en la región *C* de voltaje, está caracterizado por una multiplicación en el gas independiente del número de electrones iniciales. Por lo tanto, aunque se utiliza la multiplicación en el gas, el pulso siempre es proporcional a la ionización inicial. El empleo de este contador permite tanto el conteo de eventos aislados como la determinación de la energía de las partículas que no producen suficientes iones como para producir un pulso detectable en la región *B*. El contador proporcional tiene, por lo tanto, ventajas para la medición tipo pulso de radiación beta, para lo cual las cámaras de ionización no son lo suficientemente sensibles.

3. El *contador Geiger-Müller*, conocido también como *Geiger* o *contador G-M*, que opera en la región *E* de voltaje, está caracterizado por una extensión de la descarga a todo el contador, resultando un pulso de tamaño independiente de la ionización inicial. Es particularmente útil para contar partículas ionizantes livianas, como las partículas β y los rayos γ . El contador G-M consiste usualmente en un alambre fino (de tungsteno, por ejemplo) montado en el eje de un tubo que contiene un gas a una presión de unos 2 a 10 cm de mercurio. El contador puede ser un tubo de un metal tal como cobre o un cilindro metálico fijo en el interior de un tubo de vidrio; una mezcla apropiada para el gas es 90%

de argón y 10% de alcohol etílico. Se aplica una diferencia de potencial (que puede estar entre 800 y 1200 V) para hacer que el tubo sea negativo respecto al alambre.

En la región Geiger-Müller se produce una descarga continuada por la liberación de electrones secundarios de las paredes del tubo debido a efectos laterales "disparados" por la avalancha inicial de iones. Estos electrones secundarios provienen de lo siguiente: cuando un ion positivo de argón, por ejemplo, se neutraliza en la superficie metálica del cátodo, se libera una cantidad considerable de energía que se puede utilizar para expulsar un electrón de la superficie del cátodo. Al moverse hacia el electrodo central, estos electrones producen nuevas ionizaciones, perpetuando de este modo la descarga. Para preparar el contador para un nuevo evento, es necesario detener o extinguir la descarga. Se puede llevar a cabo esta extinción bajando electrónicamente el voltaje después de cada cuenta. Sin embargo, la extinción se hace habitualmente en el gas mismo. Por ejemplo, si el gas es argón con 10% de alcohol etílico, debido a los intercambios de carga en las colisiones entre iones de argón y moléculas de alcohol, los iones positivos que llegan al cátodo son iones de alcohol, los cuales en general no liberan electrones de la superficie del cátodo; la energía se usa para romper la molécula de alcohol y la descarga se detiene rápidamente después que la avalancha inicial llega a los electrodos. Las moléculas de alcohol absorben los fotones sin liberar electrones.

En los instrumentos eléctricos que hemos discutido, los iones, multiplicados en número o no, se recolectan y producen un pulso de voltaje que puede ser tan pequeño como 10 μ V. Un amplificador electrónico de pulsos acepta estos pequeños voltajes y los amplifica a un nivel usualmente del orden de 5 a 50 V. Luego se debe contar de algún modo los pulsos amplificados de voltaje para poder determinar cuántos se producen en la unidad de tiempo. El número de pulsos indicado en el contador da el número de partículas que han pasado por el espacio entre los electrodos. También hay otros dispositivos electrónicos para medir el tamaño del pulso, lo cual da la energía de la partícula incidente. Así, se desea a menudo no sólo registrar la ocurrencia de un pulso, sino también clasificar los pulsos de acuerdo con su tamaño (por medio de un circuito electrónico discriminador) o clasificarlos conforme a los intervalos de tiempo durante los cuales llegan (por medio de un circuito electrónico de tiempo). El detector es entonces parte de un circuito con instrumental electrónico apropiado.

C. Detección de neutrones. Para detectar neutrones se puede usar la mayoría de los procesos involucrados en la detención de los mismos en la materia, ya que se pone en movimiento a las partículas cargadas, sea como un efecto primario, sea como efecto secundario después de la emisión de un rayo gamma. Los procesos utilizados en la detección de neutrones son:

- (1) reacciones nucleares inducidas por neutrones que dan partículas cargadas como productos de reacción (protones, partículas alfa, etc.),
- (2) fisión inducida en ciertos elementos pesados,

- (3) colisiones elásticas entre neutrones y núcleos, particularmente de hidrógeno, que de esta manera se ponen en movimiento,
- (4) captura de neutrones por ciertos isótopos estables que de esta manera se convierten en radioisótopos que emiten rayos β y γ (método de activación).

El ejemplo clásico de detección de neutrones es el contador de boro para neutrones lentos. Es un contador a gas en el cual la pared interior está forrada de boro o que está lleno de gas BF_3 , preferiblemente enriquecido en ^{10}B . La reacción responsable es $^{10}\text{B}(n, \alpha)^7\text{Li}$. La partícula alfa y el núcleo de retroceso ^7Li tienen alcances cortos por lo que en la mayoría de los sucesos se detienen dentro del gas, convirtiéndose toda la energía liberada en ionización y excitaciones atómicas. Se opera el contador en la región de proporcionalidad, por lo que es razonablemente fácil discriminar entre los sucesos inducidos por neutrones y los debidos al fondo de rayos gamma o cósmicos. Otros ejemplos de reacciones que han sido utilizadas en los detectores de neutrones lentos son $^6\text{Li}(n, t)^4\text{He}$, $^{14}\text{N}(n, p)^{14}\text{C}$ y $^{113}\text{Cd}(n, \gamma)^{114}\text{Cd}$.

También se han utilizado reacciones nucleares en los detectores de neutrones rápidos; sin embargo, la eficiencia no es tan alta como en los contadores de boro para neutrones lentos, ya que ninguna sección eficaz para neutrones rápidos se acerca a la magnitud de la sección eficaz del ^{10}B para neutrones lentos. Como el contador de BF_3 es tan simple y eficiente para neutrones lentos, un modo natural de hacer un detector para neutrones rápidos es rodear un contador de BF_3 con parafina en la cual los neutrones rápidos se frenan por colisiones elásticas difundiendo luego en el contador como neutrones térmicos. El contador completo de neutrones rápidos se puede hacer insensible a neutrones lentos blindándolo con cadmio.

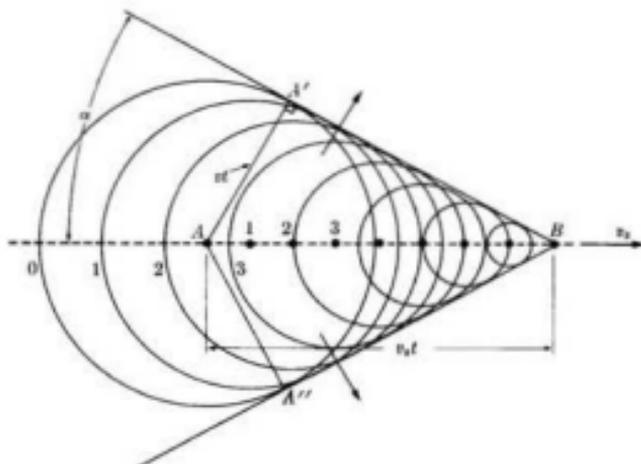


Fig. A-12. Frente de onda luminosa en la radiación de Cerenkov.

D. El contador de Cerenkov. La velocidad de la luz en un sólido o líquido transparente está dada por $v = c/n$, donde n es el índice de refracción. Si una partícula cargada que se mueve en este medio tiene una velocidad mayor que v (mayor que la velocidad de la luz en el medio), los átomos, momentáneamente polarizados eléctricamente por la partícula cargada que pasa cerca, emiten luz. El proceso se debe a que la perturbación del campo eléctrico en el átomo produce un dipolo eléctrico transitorio que entonces da lugar a la emisión de ondas electromagnéticas. La razón de por qué se emite esa luz sólo cuando la velocidad sobrepasa $v = c/n$ es que sólo en este caso puede ser coherente la luz emitida por todos los átomos a lo largo de la trayectoria. La fig. A-12 muestra cómo se puede construir un frente de onda con las ondas elementales emitidas en varios puntos a lo largo de la trayectoria de la partícula. Para una velocidad determinada v_s de la partícula, la luz se emite en un cono cuya semiapertura α está dada por $\sin \alpha = v/v_s = c/nv_s$. Una fracción considerable de la radiación de Cerenkov está en la región visible del espectro, que también corresponde aproximadamente a la región de máxima sensibilidad de los tubos fotomultiplicadores. Se ha construido varios tipos de detectores de Cerenkov en los cuales sólo se registra la luz emitida en una dirección particular. El detector es entonces un dispositivo que puede medir velocidades. Es evidente que sólo se puede emplear para partículas con $v_s > c/n$.

E. La cámara de niebla. Es uno de los instrumentos más importantes para la investigación básica sobre la radiación. Fue utilizado por primera vez en 1912 y se basa en el descubrimiento hecho por C. T. R. Wilson de que los iones hacen de núcleos de condensación de vapor de agua sobresaturado. En una cámara de niebla se expande el gas saturado de vapor, moviendo rápidamente un pistón. La expansión es adiabática y disminuye la temperatura. El enfriamiento es más que suficiente como para compensar el efecto del aumento de volumen y el aire se sobresatura de vapor de agua. Si un rayo ionizante entra en la cámara, los iones formados hacen de puntos de condensación para el vapor y la trayectoria del rayo aparece como una traza delgada de niebla. En la mayoría de las cámaras de expansión la mezcla gas-vapor es aire con agua o argón con alcohol etílico a presión atmosférica.

La fig. A-13 muestra un diagrama simplificado que indica el principio de funcionamiento de la cámara de niebla. Un cilindro *C* está cerrado en un extremo por una ventana *W* de vidrio y en el otro por un pistón de metal. Una pequeña cantidad de agua dentro de la cámara mantiene el aire saturado. Cuando se baja el pistón el aire se sobresatura, como se dijo anteriormente y en presencia de radia-

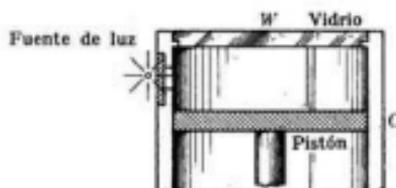


Fig. A-13. La cámara de niebla de Wilson (esquemático).

ción ionizante se forman trazas de niebla. Se puede iluminar las trazas por el costado y observarlas o fotografiarlas a través de la ventana. Luego se puede sacar los iones por medio de un campo eléctrico entre el pistón y el anillo metálico. Se vuelve el pistón a su posición original y la cámara está lista para detectar otra radiación.

La cámara de niebla de Wilson hace que sea posible estudiar las interacciones que tienen lugar entre partículas cargadas y átomos individuales fotografiando las trazas dejadas por las radiaciones ionizantes, lo cual permite analizarlas luego cómodamente. Se han hecho muchas modificaciones a la cámara de niebla original. Por ejemplo, para obtener un gran número de fotografías, se ha introducido dispositivos que permiten repetir automáticamente la expansión y tomar fotografías en forma continua. Si se toma simultáneamente dos fotografías estereoscópicas, es posible reconstruir la trayectoria de la partícula en el espacio.

Cuando se coloca la cámara de niebla entre las piezas polares de un electroimán, es posible distinguir entre partículas cargadas positivas y negativas. Se puede determinar el signo de la carga y el módulo del momentum de la partícula a partir del radio de curvatura de su trayectoria en el campo magnético. Partículas diferentes producen tipos diferentes de trazas. Así, las partículas pesadas y lentas como las partículas α producen trazas anchas y densas que se doblan ocasionalmente a pequeños ángulos, especialmente cerca del final, debido a desviaciones repentinas resultantes de una colisión. Los electrones lentos producen trazas finas, como llenas de gotitas y tortuosas porque sufren muchas dispersiones, mientras que las partículas rápidas, tanto livianas como pesadas producen trayectorias finas y como llenas de gotitas.

F. La cámara de burbujas. Una desventaja de la cámara de niebla para partículas de alta energía es que la densidad del gas no es suficientemente alta como para originar un número apreciable de interacciones dentro de la cámara. Mucho más importante es quizá que la cámara de niebla tiene un tiempo de recuperación muy largo (del orden de decenas de segundos) después de cada expansión. Por lo tanto, en la investigación sobre partículas elementales, la cámara de niebla ha sido reemplazada por la cámara de burbujas, que podríamos decir que es una cámara de niebla inversa. Una cámara de burbujas contiene un líquido a presión y temperatura tales que se encuentra justo por debajo del punto de ebullición. Si se disminuye repentinamente la presión, el líquido queda sobrecalentado y comienzan a formarse burbujas, preferentemente alrededor de iones. En la cámara de burbujas de hidrógeno, el hidrógeno líquido sobrecalentado (~ 20 K) es el medio que atraviesan las partículas. Los iones dejados en la trayectoria de una partícula cargada se convierten en núcleos de evaporación del hidrógeno líquido y se puede ver y fotografiar la traza en forma de cadena de burbujas. Cuando partículas que interactúan fuertemente con protones atraviesan la cámara de burbujas, tienen lugar reacciones y se puede estudiar las trazas tanto de la partícula incidente como de los productos de reacción. Si se coloca la cámara de burbujas en un campo magnético y se toman fotografías, es posible determinar en las mismas la carga y el momentum de las diversas partículas.

G. La cámara de chispas. Es una de las invenciones más recientes en el área de los detectores de alta energía; consiste en una cantidad de placas metálicas aisladas entre sí y con un espaciamiento uniforme lleno de neón que es del orden de unos pocos milímetros. Una de cada dos está a tierra y a la otra se le da un corto pulso de voltaje ($0,5 \mu\text{s}$) de magnitud tal que se produzcan chispas en los lugares en que el gas está ionizado. La cadena de iones dejados por una partícula penetrante inicia esas chispas; una fotografía de las chispas entre todas las placas da una idea de la trayectoria de la partícula.

H. Emulsiones fotográficas. Una partícula ionizante que atraviesa la emulsión de una placa fotográfica deja una traza que contiene una cantidad de granos de bromuro de plata sensibilizados. Se han desarrollado emulsiones fotográficas especiales denominadas emulsiones nucleares. Se distinguen de las emulsiones ópticas por su alto contenido de bromuro de plata (que puede ser hasta cuatro veces mayor que en las placas fotográficas comunes), por el tamaño del grano y por el espesor de la emulsión. Una vez revelada, la placa fotográfica, como la cámara de niebla, registra la trayectoria de la partícula en forma de trazas, de cuyo estudio se puede obtener una cantidad de información. El número de trazas es una medida del número de partículas que entran en la placa y el estudio detallado de las trazas suministra información acerca de la masa, la carga y la energía de las partículas. La emulsión fotográfica tiene sobre la cámara de burbujas la ventaja de que es sólida por lo que las trazas son cortas y que su sensibilidad es continua en vez de estar restringida a cortos intervalos repetidos en forma no muy frecuente. Por otro lado, se puede controlar las diversas cámaras mediante circuitos de coincidencias para registrar sucesos determinados, lo cual no se puede hacer con las emulsiones fotográficas.

TABLAS

**RESPUESTAS A LOS PROBLEMAS
CON NUMERO IMPAR**

INDICE ALFABETICO

FUNCIONES TRIGONOMETRICAS NATURALES

Ang		Sen	Cos	Tg	Ang		Sen	Cos	Tg
Grad	Rad				Grad	Rad			
0°	,000	0,000	1,000	0,000					
1°	,017	,018	1,000	,018	46°	0,803	0,719	0,695	1,036
2°	,035	,035	0,999	,035	47°	,820	,731	,682	1,072
3°	,052	,052	,999	,052	48°	,838	,743	,669	1,111
4°	,070	,070	,998	,070	49°	,855	,755	,656	1,150
5°	,087	,087	,996	,088	50°	,873	,766	,643	1,192
6°	,105	,105	,995	,105	51°	,890	,777	,629	1,235
7°	,122	,122	,993	,123	52°	,908	,788	,616	1,280
8°	,140	,139	,990	,141	53°	,925	,799	,602	1,327
9°	,157	,156	,988	,158	54°	,942	,809	,588	1,376
10°	,175	,174	,985	,176	55°	,960	,819	,574	1,428
11°	,192	,191	,982	,194	56°	,977	,829	,559	1,483
12°	,209	,208	,978	,213	57°	,995	,839	,545	1,540
13°	,227	,225	,974	,231	58°	1,012	,848	,530	1,600
14°	,244	,242	,970	,249	59°	1,030	,857	,515	1,664
15°	,262	,259	,966	,268	60°	1,047	,866	,500	1,732
16°	,279	,276	,961	,287	61°	1,065	,875	,485	1,804
17°	,297	,292	,956	,306	62°	1,082	,883	,470	1,881
18°	,314	,309	,951	,325	63°	1,100	,891	,454	1,963
19°	,332	,326	,946	,344	64°	1,117	,899	,438	2,050
20°	,349	,342	,940	,364	65°	1,134	,906	,423	2,145
21°	,367	,358	,934	,384	66°	1,152	,914	,407	2,246
22°	,384	,375	,927	,404	67°	1,169	,921	,391	2,356
23°	,401	,391	,921	,425	68°	1,187	,927	,375	2,475
24°	,419	,407	,914	,445	69°	1,204	,934	,358	2,605
25°	,436	,423	,906	,466	70°	1,222	,940	,342	2,747
26°	,454	,438	,899	,488	71°	1,239	,946	,326	2,904
27°	,471	,454	,891	,510	72°	1,257	,951	,309	3,078
28°	,489	,470	,883	,532	73°	1,274	,956	,292	3,271
29°	,506	,485	,875	,554	74°	1,292	,961	,276	3,487
30°	,524	,500	,866	,577	75°	1,309	,966	,259	3,732
31°	,541	,515	,857	,601	76°	1,326	,970	,242	4,011
32°	,559	,530	,848	,625	77°	1,344	,974	,225	4,331
33°	,576	,545	,839	,649	78°	1,361	,978	,208	4,705
34°	,593	,559	,829	,675	79°	1,379	,982	,191	5,145
35°	,611	,574	,819	,700	80°	1,396	,985	,174	5,671
36°	,628	,588	,809	,727	81°	1,414	,988	,156	6,314
37°	,646	,602	,799	,754	82°	1,431	,990	,139	7,115
38°	,663	,616	,788	,781	83°	1,449	,993	,122	8,144
39°	,681	,629	,777	,810	84°	1,466	,995	,105	9,514
40°	,698	,643	,766	,839	85°	1,484	,996	,087	11,43
41°	,716	,658	,755	,869	86°	1,501	,998	,070	14,30
42°	,733	,669	,743	,900	87°	1,518	,999	,052	19,08
43°	,751	,682	,731	,933	88°	1,536	,999	,035	28,64
44°	,768	,695	,719	,966	89°	1,553	1,000	,018	57,29
45°	,785	,707	,707	1,000	90°	1,571	1,000	,000	∞

LOGARITMOS COMUNES

N	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	0000	3010	4771	6021	6990	7782	8451	9031	9542
1	0000	0414	0792	1139	1461	1761	2041	2304	2553	2788
2	3010	3222	3424	3617	3802	3979	4150	4314	4472	4624
3	4771	4914	5051	5185	5315	5441	5563	5682	5798	5911
4	6021	6128	6232	6335	6435	6532	6628	6721	6812	6902
5	6990	7076	7160	7243	7324	7404	7482	7559	7634	7709
6	7782	7853	7924	7993	8062	8129	8195	8261	8325	8388
7	8451	8513	8573	8633	8692	8751	8808	8865	8921	8976
8	9031	9085	9138	9191	9243	9294	9345	9395	9445	9494
9	9542	9590	9638	9685	9731	9777	9823	9868	9912	9956
10	0000	0043	0086	0128	0170	0212	0253	0294	0334	0374
11	0414	0453	0492	0531	0569	0607	0645	0682	0719	0755
12	0792	0828	0864	0899	0934	0969	1004	1038	1072	1106
13	1139	1173	1206	1239	1271	1303	1335	1367	1399	1430
14	1461	1492	1523	1553	1584	1614	1644	1673	1703	1732
15	1761	1790	1818	1847	1875	1903	1931	1959	1987	2014
16	2041	2068	2095	2122	2148	2175	2201	2227	2253	2279
17	2304	2330	2355	2380	2405	2430	2455	2480	2504	2529
18	2553	2577	2601	2625	2648	2672	2695	2718	2742	2765
19	2788	2810	2833	2856	2878	2900	2923	2945	2967	2989
20	3010	3032	3054	3075	3096	3118	3139	3160	3181	3201
21	3222	3243	3263	3284	3304	3324	3345	3365	3385	3404
22	3424	3444	3464	3483	3502	3522	3541	3560	3579	3598
23	3617	3636	3655	3674	3692	3711	3729	3747	3766	3784
24	3802	3820	3838	3856	3874	3892	3909	3927	3945	3962
25	3979	3997	4014	4031	4048	4065	4082	4099	4116	4133
26	4150	4166	4183	4200	4216	4232	4249	4265	4281	4298
27	4314	4330	4346	4362	4378	4393	4409	4425	4440	4456
28	4472	4487	4502	4518	4533	4548	4564	4579	4594	4609
29	4624	4639	4654	4669	4683	4698	4713	4728	4742	4757
30	4771	4786	4800	4814	4829	4843	4857	4871	4886	4900
31	4914	4928	4942	4955	4969	4983	4997	5011	5024	5038
32	5051	5065	5079	5092	5105	5119	5132	5145	5159	5172
33	5185	5198	5211	5224	5237	5250	5263	5276	5289	5302
34	5315	5328	5340	5353	5366	5378	5391	5403	5416	5428
35	5441	5453	5465	5478	5490	5502	5514	5527	5539	5551
36	5563	5575	5587	5599	5611	5623	5635	5647	5658	5670
37	5682	5694	5705	5717	5729	5740	5752	5763	5775	5786
38	5798	5809	5821	5832	5843	5855	5866	5877	5888	5899
39	5911	5922	5933	5944	5955	5966	5977	5988	5999	6010
40	6021	6031	6042	6053	6064	6075	6085	6096	6107	6117
41	6128	6138	6149	6160	6170	6180	6191	6201	6212	6222
42	6232	6243	6253	6263	6274	6284	6294	6304	6314	6325
43	6335	6345	6355	6365	6375	6385	6395	6405	6415	6425
44	6435	6444	6454	6464	6474	6484	6493	6503	6513	6522
45	6532	6542	6551	6561	6571	6580	6590	6599	6609	6618
46	6628	6637	6646	6656	6665	6675	6684	6693	6702	6712
47	6721	6730	6739	6749	6758	6767	6776	6785	6794	6803
48	6812	6821	6830	6839	6848	6857	6866	6875	6884	6893
49	6902	6911	6920	6928	6937	6946	6955	6964	6972	6981
50	6990	6998	7007	7016	7024	7033	7042	7050	7059	7067
N	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9

LOGARITMOS COMUNES (continuación)

N	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
50	6990	6998	7007	7016	7024	7033	7042	7050	7059	7067
51	7076	7084	7093	7101	7110	7118	7126	7135	7143	7152
52	7160	7168	7177	7185	7193	7202	7210	7218	7226	7235
53	7243	7251	7259	7267	7275	7284	7292	7300	7308	7316
54	7324	7332	7340	7348	7356	7364	7372	7380	7388	7396
55	7404	7412	7419	7427	7435	7443	7451	7459	7466	7474
56	7482	7490	7497	7505	7513	7520	7528	7536	7543	7551
57	7559	7566	7574	7582	7589	7597	7604	7612	7619	7627
58	7634	7642	7649	7657	7664	7672	7679	7686	7694	7701
59	7709	7716	7723	7731	7738	7745	7752	7760	7767	7774
60	7782	7789	7796	7803	7810	7818	7825	7832	7839	7846
61	7853	7860	7868	7875	7882	7889	7896	7903	7910	7917
62	7924	7931	7938	7945	7952	7959	7966	7973	7980	7987
63	7993	8000	8007	8014	8021	8028	8035	8041	8048	8055
64	8062	8069	8075	8082	8089	8096	8102	8109	8116	8122
65	8129	8136	8142	8149	8156	8162	8169	8176	8182	8189
66	8195	8202	8209	8215	8222	8228	8235	8241	8248	8254
67	8261	8267	8274	8280	8287	8293	8299	8306	8312	8319
68	8325	8331	8338	8344	8351	8357	8363	8370	8376	8382
69	8388	8395	8401	8407	8414	8420	8426	8432	8439	8445
70	8451	8457	8463	8470	8476	8482	8488	8494	8500	8506
71	8513	8519	8525	8531	8537	8543	8549	8555	8561	8567
72	8573	8579	8585	8591	8597	8603	8609	8615	8621	8627
73	8633	8639	8645	8651	8657	8663	8669	8675	8681	8686
74	8692	8698	8704	8710	8716	8722	8727	8733	8739	8745
75	8751	8756	8762	8768	8774	8779	8785	8791	8797	8802
76	8808	8814	8820	8825	8831	8837	8842	8848	8854	8859
77	8865	8871	8876	8882	8887	8893	8899	8904	8910	8915
78	8921	8927	8932	8938	8943	8949	8954	8960	8965	8971
79	8976	8982	8987	8993	8998	9004	9009	9015	9020	9025
80	9031	9036	9042	9047	9053	9058	9063	9069	9074	9079
81	9085	9090	9096	9101	9106	9112	9117	9122	9128	9133
82	9138	9143	9149	9154	9159	9165	9170	9175	9180	9186
83	9191	9196	9201	9206	9212	9217	9222	9227	9232	9238
84	9243	9248	9253	9258	9263	9269	9274	9279	9284	9289
85	9294	9299	9304	9309	9315	9320	9325	9330	9335	9340
86	9345	9350	9355	9360	9365	9370	9375	9380	9385	9390
87	9395	9400	9405	9410	9415	9420	9425	9430	9435	9440
88	9445	9450	9455	9460	9465	9469	9474	9479	9484	9489
89	9494	9499	9504	9509	9513	9518	9523	9528	9533	9538
90	9542	9547	9552	9557	9562	9566	9571	9576	9581	9586
91	9590	9595	9600	9605	9609	9614	9619	9624	9628	9633
92	9638	9643	9647	9652	9657	9661	9666	9671	9675	9680
93	9685	9689	9694	9699	9703	9708	9713	9717	9722	9727
94	9731	9736	9741	9745	9750	9754	9759	9763	9768	9773
95	9777	9782	9786	9791	9795	9800	9805	9809	9814	9818
96	9823	9827	9832	9836	9841	9845	9850	9854	9859	9863
97	9868	9872	9877	9881	9886	9890	9894	9899	9903	9908
98	9912	9917	9921	9926	9930	9934	9939	9943	9948	9952
99	9956	9961	9965	9969	9974	9978	9983	9987	9991	9996
100	0000	0004	0009	0013	0017	0022	0026	0030	0035	0039
N	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9

FUNCIONES EXPONENCIALES

x	e^x	e^{-x}	x	e^x	e^{-x}
0,00	1,0000	1,0000	2,5	12,182	0,0821
0,05	1,0513	0,9512	2,6	13,464	0,0743
0,10	1,1052	0,9048	2,7	14,880	0,0672
0,15	1,1618	0,8607	2,8	16,445	0,0608
0,20	1,2214	0,8187	2,9	18,174	0,0550
0,25	1,2840	0,7788	3,0	20,086	0,0498
0,30	1,3499	0,7408	3,1	22,198	0,0450
0,35	1,4191	0,7047	3,2	24,533	0,0408
0,40	1,4918	0,6703	3,3	27,113	0,0369
0,45	1,5683	0,6376	3,4	29,964	0,0334
0,50	1,6487	0,6065	3,5	33,115	0,0302
0,55	1,7333	0,5769	3,6	36,598	0,0273
0,60	1,8221	0,5488	3,7	40,447	0,0247
0,65	1,9155	0,5220	3,8	44,701	0,0224
0,70	2,0138	0,4966	3,9	49,402	0,0202
0,75	2,1170	0,4724	4,0	54,598	0,0183
0,80	2,2255	0,4493	4,1	60,340	0,0166
0,85	2,3396	0,4274	4,2	66,686	0,0150
0,90	2,4596	0,4066	4,3	73,700	0,0136
0,95	2,5857	0,3867	4,4	81,451	0,0123
1,0	2,7183	0,3679	4,5	90,017	0,0111
1,1	3,0042	0,3329	4,6	99,484	0,0101
1,2	3,3201	0,3012	4,7	109,95	0,0091
1,3	3,6693	0,2725	4,8	121,51	0,0082
1,4	4,0552	0,2466	4,9	134,29	0,0074
1,5	4,4817	0,2231	5	148,41	0,0067
1,6	4,9530	0,2019	6	403,43	0,0025
1,7	5,4739	0,1827	7	1.096,6	0,0009
1,8	6,0496	0,1653	8	2.981,0	0,0003
1,9	6,6859	0,1496	9	8.103,1	0,0001
2,0	7,3891	0,1353	10	22.026	0,00005
2,1	8,1662	0,1225			
2,2	9,0250	0,1108			
2,3	9,9742	0,1003			
2,4	11,023	0,0907			

LISTA DE TABLAS

TABLA	2-1.	Niveles de energía y degeneración en una caja cúbica	71
TABLA	2-2.	Funciones de onda de un oscilador armónico	75
TABLA	2-3.	Niveles de energía vibracional para el movimiento axial del átomo N en la molécula NH ₃ con respecto al estado fundamental	90
TABLA	2-4.	Operadores cuánticos	102
TABLA	3-1.	Constante de Rydberg	116
TABLA	3-2.	Correcciones energéticas cuando se considera el movimiento nuclear	119
TABLA	3-3.	Designación de los estados de momentum angular y degeneración esencial para el movimiento bajo la acción de fuerzas centrales	122
TABLA	3-4.	Funciones angulares correspondientes a L^2 y L_x	128
TABLA	3-5.	Funciones angulares correspondientes a L^2 y L_z^2	128
TABLA	3-6.	Funciones de onda radiales de los átomos hidrogenoides	130
TABLA	3-7.	Designación de estados electrónicos	143
TABLA	4-1.	Configuración electrónica de los átomos	168
TABLA	4-2.	Términos de electrones equivalentes	172
TABLA	4-3.	Posibles valores m y m_z para la configuración np^3	176
TABLA	5-1.	Configuración electrónica de moléculas diatómicas homonucleares	204
TABLA	5-2.	Energías de disociación, longitudes de unión y momentos dipolares eléctricos de algunas moléculas diatómicas	206
TABLA	5-3.	Constantes rotacionales y vibracionales de algunas moléculas diatómicas	221
TABLA	6-1.	Energía de Fermi	258
TABLA	6-2.	Masa efectiva	267
TABLA	6-3.	Discontinuidades de energía	275
TABLA	7-1.	Propiedades de algunos nucleidos	301
TABLA	7-2.	Número de nucleidos estables y de vida larga	326
TABLA	8-1.	Serie del uranio	341
TABLA	8-2.	Valores de Q para la emisión de diferentes partículas nucleares por el ²³⁸ U	351

TABLA 8-3.	Fisionabilidad de núcleos pesados con neutrones térmicos	369
TABLA 8-4.	Umrales de energía para la fotofisión	369
TABLA 8-5.	Propiedades de algunos materiales fisionables por neutrones térmicos	371
TABLA 9-1.	Partículas fundamentales	390
TABLA 9-2.	Modos de desintegración de las partículas	400
TABLA 9-3.	Isospín, extrañeza e hipercarga de los mesones y los bariones	412
TABLA 10-1.	Valores de erf (x)	470
TABLA 12-1.	Constantes de van de Waals	515
TABLA 12-2.	Temperaturas características de rotación y de vibración de moléculas diatómicas	520
TABLA 12-3.	Relación entre las capacidades calóricas de algunos gases	526
TABLA 13-1.	Energía de Fermi y temperatura de Fermi de diversos gases	536
TABLA 13-2.	Valores de la energía de arranque y de la constante termiónica A , obtenidos experimentalmente usando la ec. (13.11)	539
TABLA 13-3.	Temperaturas de Debye de algunos sólidos	550

RESPUESTA A LOS PROBLEMAS CON NUMERO IMPAR

CAPITULO 1

- 1.1 (b) $10 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$, $5 \times 10^4 \text{ eV} = 8,01 \times 10^{-18} \text{ J}$, $1 \text{ MeV} = 1,6 \times 10^{-13} \text{ J}$
(c) $0,004c$, $0,299c$, $0,814c$
- 1.3 $1,78 \times 10^8 \text{ J}$
- 1.7 (a) $\frac{1}{2} \times 10^{-8} \text{ T}$ (b) $1,33 \times 10^{-4} \text{ W m}^{-2}$ (c) $4,22 \times 10^{-16} \text{ J m}^{-2}$
(d) $1,4 \times 10^{-20} \text{ m}^{-2} \text{ kg s}^{-1}$; (e) 167 W
- 1.9 $\kappa(\nu) = (8\pi h\nu^3/c^3) e^{-h\nu/kT}$; $\kappa(\nu) = 8\pi kT\nu^3/c^3$
- 1.11 4100 K ; $0,214 \text{ J m}^{-2}$
- 1.13 (a) $1,70 \times 10^{10} \text{ electrones m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ (b) $3,0 \times 10^{-9} \text{ W m}^{-2}$; (c) $1,76 \times 10^{-19} \text{ J}$
- 1.15 (a) $4,555 \times 10^{14} \text{ Hz}$ (b) $1,88 \text{ eV}$ (c) $4,1274 \times 10^{-15} \text{ J s C}^{-1}$
- 1.17 (a) $1,024 \times 10^{-10} \text{ m}$ (b) $4,71 \times 10^{-17} \text{ J}$, $44,3^\circ$ con respecto a la dirección de incidencia
- 1.19 $166,8 \text{ keV} = 2,67 \times 10^{-14} \text{ J}$, $7,43 \times 10^{-12} \text{ m}$
- 1.23 (a) $5,03 \times 10^{11} \text{ fotones m}^{-2}$ (b) $2080 \text{ fotones m}^{-2}$
- 1.25 (a) $1,24 \times 10^{-9} \text{ m}$ (b) $1,24 \times 10^{-6} \text{ m}$ (c) $1,24 \times 10^{-4} \text{ m}$
- 1.27 (a) $4,892 \text{ eV}$ (b) $6,7064 \text{ eV}$, $4,8922 \text{ eV}$, $3,9614 \text{ eV}$, $2,2723 \text{ eV}$, $2,1465 \text{ eV}$
- 1.29 $2,65 \times 10^{15} \text{ Hz}$, $1,13 \times 10^{-7} \text{ m}$
- 1.31 $3,1 \times 10^{-12} \text{ m}$
- 1.33 $7,5 \times 10^{-3} \text{ eV}$ en exceso de la energía de unión
- 1.37 127
- 1.39 $1,05 \times 10^{-4} \text{ m}$, $2,39 \times 10^{-3} \text{ m}$, $8,77 \times 10^{-2} \text{ m}$
- 1.41 (a) 8 (b) 40 (c) 100
- 1.43 $7,98 \text{ cm}$, $8,06 \text{ cm}$
- 1.47 $5^\circ 47'$
- 1.49 (a) para el protón: $3,9 \text{ m}$, para un electrón: $7,3 \times 10^8 \text{ m}$
(b) con precisión ilimitada en ambos casos
- 1.53 $1,03 \times 10^8 \text{ Hz}$ ó $4,26 \times 10^{-6} \text{ eV}$; $5,15 \times 10^{14} \text{ Hz}$ ó $2,13 \text{ MeV}$
- 1.55 (a) $\Delta E_x = -4E_x/A$

CAPITULO 2

- 2.3 La diferencia de energía entre los niveles (a) aumenta (b) disminuye
- 2.5 $3,8 \times 10^8 \text{ MeV}$; $E_{\text{grav}} = 6,34 \times 10^{-27} \text{ eV}$, $E_{\text{conf}} = 1,44 \times 10^4 \text{ MeV}$
- 2.13 (a) $(m\sigma^2/2n\hbar^3) dE$ (b) $(\sigma^2 p/2\pi\hbar^3) dp$
- 2.15 (a) $8,27 + 10^{-18} \text{ eV}$ (b) $2,48 \times 10^{-18} \text{ eV}$ (c) $1,34 \times 10^{-3} \text{ eV}$
- 2.21 $22,7 \text{ MeV}$

- 2.23 (a) $B = [-A(\alpha^2 + k^2) \sinh \alpha a]/R$, $C = A(k^2 - ik\alpha)e^{-\alpha a}/R$,
 $D = -A(k^2 + ik\alpha)e^{\alpha a}/R$, $A' = -2A(ik\alpha)e^{-ik\alpha}/R$,
 donde $R = (\alpha^2 - k^2) \sinh \alpha a - 2iak \cosh \alpha a$
- (b) $B = -iA(k^2/k^2 - 1) \sin k'a/R'$, $C = -A(k'/k + 1)e^{-ik'a}/R'$
 $D = -A(k'/k - 1)e^{ik'a}/R'$, $A' = -2A(k'/k)e^{-ik'a}/R'$,
 donde $R' = i(k^2/k^2 + 1) \sin k'a - 2(k'/k) \cos k'a$
- 2.25 $E < E_0$: $\psi_1 = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}$, $\psi_2 = Ce^{i\alpha x} + De^{-i\alpha x}$, $\psi_3 = Ee^{i\alpha x} + Fe^{-i\alpha x}$,
 $\psi_4 = Ge^{-i\alpha x}$;
 $E_0 < E < E'_0$: ψ_1 y ψ_2 como antes, $\psi_3 = Ee^{i\alpha x} + Fe^{-i\alpha x}$, ψ_4 como antes;
 $E > E'_0$: ψ_1 como antes, $\psi_2 = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$, $\psi_3 = Ee^{i\alpha x} + Fe^{-i\alpha x}$, ψ_4
 como antes
- 2.27 $E < E_0$: $\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, $\psi_2 = Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x}$, $\psi_3 = Ee^{ikx} + Fe^{-ikx}$,
 $\psi_4 = Ge^{-\alpha x} + He^{\alpha x}$, $\psi_5 = Ie^{ikx}$;
 $E > E_0$: ψ_1 , ψ_2 , y ψ_3 como antes, $\psi_4 = Ce^{i\alpha x} + De^{-i\alpha x}$, $\psi_5 = Ge^{i\alpha x} + He^{-i\alpha x}$.
- 2.29 (a) $(-N^2/2m)d^2\psi/dx^2 - \zeta x\psi = E\psi$ (b) No
- 2.31 (d) $-E_0 + N(\alpha E_0/2m)^{1/3}$
- 2.39 Para d^2/dx^2 : (a) Sí, ik (b) Sí, α (c) No. Para d^3/dx^3 : (a) Sí, $-k^2$ (b) Sí, α^3
 (c) Sí, $-k^2$
- 2.41 Para $n = 0$: $0, \hbar/2m\omega, 0, \frac{1}{2}\hbar\hbar\omega$; para $n = 1$: $0, \hbar/6m\omega, 0, \frac{1}{2}\hbar\hbar\omega$
- 2.43 $L_x = -i\hbar(y\partial/\partial z - z\partial/\partial y)$; $L_y = -i\hbar(z\partial/\partial x - x\partial/\partial z)$; $L_z = -i\hbar(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x)$
- 2.45 $\sqrt{\hbar/2m\omega}$, $0, -i\sqrt{\hbar/2m\omega}$, 0
- 2.47 $\Delta n = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots$

CAPÍTULO 3

- 3.1 $\omega = 4,134 \times 10^{14}/n^2 \text{ s}^{-1}$; $E_p = -4,36 \times 10^{-18}/n^2 \text{ J}$; $E_k = 2,18 \times 10^{-18}/n^2 \text{ J}$
- 3.3 (a) $8,22 \times 10^6$ órbitas (b) $1,95 \times 10^4$ órbitas
- 3.5 $\Delta\lambda_{H-\beta} = 1,78 \text{ \AA}$, $\Delta\lambda_{H-\gamma} = 2,38 \text{ \AA}$
- 3.9 (a) $6,58 \times 10^{13}/n^2 \text{ Hz}$ (b) $6,58 \times 10^{13}(n - \frac{1}{2})/[n(n - 1)]^2 \text{ Hz}$
- 3.17 $L_x = -i\hbar[-\sin \phi \partial/\partial \theta - (\cot \theta \cos \phi) \partial/\partial \phi]$;
 $L_y = -i\hbar[\cos \phi \partial/\partial \theta - (\cot \theta \sin \phi) \partial/\partial \phi]$
- 3.29 $2\alpha_0$
- 3.33 $\Delta E_p = \frac{1}{2}A$; $\Delta E_0 = \frac{1}{2}A$, $\frac{5}{16}A$; $\Delta E_l = \frac{1}{2}A$, $\frac{5}{16}A$, $\frac{3}{16}A$,
 donde $A = 2|E_n|Z^2\alpha^2/n$
- 3.35 Sí ($\Delta\lambda = 8,2 \times 10^{-11} \text{ m}$)
- 3.37 $2,41 \times 10^{-22} \text{ N}$; $0,042 \text{ mm}$ 3.39 $2,8 \times 10^6 \text{ Hz}$

CAPÍTULO 4

- 4.1 $-57,8 \text{ eV}$, $-55,9 \text{ eV}$, $-55,2 \text{ eV}$; respecto al ion He^+ ($-54,4 \text{ eV}$) son
 $-3,4 \text{ eV}$, $-1,5 \text{ eV}$, $-0,8 \text{ eV}$

$$4.3 \quad \psi_{n^2, m^2} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} \psi_{1sX-(1)} & \psi_{1sX-(2)} & \psi_{1sX-(3)} \\ \psi_{2sX-(1)} & \psi_{2sX-(2)} & \psi_{2sX-(3)} \\ \psi_{3sX-(1)} & \psi_{3sX-(2)} & \psi_{3sX-(3)} \end{vmatrix}$$

$$4.5 \quad \psi_{np^3} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} \psi_{pX-(1)} & \psi_{pX-(2)} & \psi_{pX-(3)} \\ \psi_{p(+1)X-(1)} & \psi_{p(+1)X-(2)} & \psi_{p(+1)X-(3)} \\ \psi_{p(0)X-(1)} & \psi_{p(0)X-(2)} & \psi_{p(0)X-(3)} \end{vmatrix}$$

- 4.7 Ver la tabla 4-1 para valores.
- 4.11 (a) ^3S (b) ^3P , ^3D , ^3S (c) ^3S , ^3D , ^3P , ^3P (d) ^3P (e) ^3P , ^3D , ^3F , ^3G , ^3H , ^3S , ^3P , ^3F , ^3G (f) ^3S , ^3P , ^3D , ^3F , ^3G , ^3S , ^3P , ^3D , ^3F , ^3G
- 4.15 0, 0, 0; $\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{2}$; 0, 1, 1; 1, 1, 2; 1, 3, 4; 2, 2, 1; 0, 2, 2; $\frac{1}{2}$, 3, $\frac{1}{2}$
- 4.19 Calcio: $\frac{1}{2}$; aluminio: $\frac{1}{2}$
- 4.21 6439 Å y (6439 \pm 0,26) Å
- 4.25 8,58 Å
- 4.27 Litio: 2s, — 5,315 eV; 2p, — 3,54 eV; 3s, — 2,01 eV
Sodio: 3s, — 5,120 eV; 3p, — 3,028 eV; 4s, — 1,967 eV (3d a — 1,52 eV)
- 4.29 Aluminio: 1,9 keV, 115 eV; oxígeno, 1,1 keV, 46 eV
- 4.31 Aluminio: 8,40 Å, 1470 eV; potasio: 3,59 Å, 3452 eV; hierro: 1,74 Å, 7121 eV; níquel: 1,55 Å, 7965 eV; cinc: 1,34 Å, 9221 eV; molibdeno: 0,664 Å, 18 700 eV; plata: 0,525 Å, 23 600 eV
- 4.33 (b) 8,3 keV, 1,495 Å

CAPÍTULO 5

- 5.1 (a) — 16,25 eV (b) 10,95 eV (c) 15,43 eV
- 5.3 61,06 kcal mol⁻¹
- 5.7 (b) $(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^4(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^4(\sigma_{2p})^2(\sigma_{3s})^2$
 $(\sigma_{3s})^2(\sigma_{3p})^2(\pi_{3p})^4(\pi_{3p})^2$; $^3\Sigma_g^-$
- 5.9 (a) Li⁺H⁻ (b) H⁺I⁻
- 5.11 5,45 eV
- 5.13 8,37 eV; 6,45 eV
- 5.23 5,06 $\times 10^{-28}$ m C; 0,33
- 5.25 17,7 Å
- 5.27 2,83 Å
- 5.29 Para H³⁵Cl: (a) 21,5015 cm⁻¹ (b) 2,6658 $\times 10^{-8}$ eV, 7,9974 $\times 10^{-4}$ eV
(c) 6,450 $\times 10^{11}$ Hz (4,651 $\times 10^{-4}$ m), 12,900 $\times 10^{11}$ Hz (2,326 $\times 10^{-4}$ m)
(d) 21,50 cm⁻¹
- 5.31 (a) $E_{rot} = [l(l+1) + \frac{1}{2}m^2]h^2/2I$, (b) $E_{rot} = [l(l+1) - \frac{1}{2}m^2]h^2/2I$
- 5.35 1,906 $\times 10^9$ N m⁻¹
- 5.37 5,162 $\times 10^9$ N m⁻¹; 0,1861 eV

CAPÍTULO 6

- 6.1 3,686 eV
- 6.3 6,371 eV molécula⁻¹
- 6.5 3 $\times 10^{12}$ Hz
- 6.9 6,934 $\times 10^8$ kg s⁻²; 4,885 $\times 10^{16}$ s⁻¹; 6,026 $\times 10^{16}$ s⁻¹
- 6.11 4,560 $\times 10^{28}$ átomos m⁻³; 8,498 $\times 10^{28}$ átomos m⁻³; 1,660 $\times 10^{29}$ átomos m⁻³
- 6.13 3,151 eV; 4,445 eV
- 6.17 $m_i^* = \hbar/2\alpha_i$ y $\partial^2 x_i/\partial t^2 = 2F\alpha_i/\hbar^2$, donde i representa respectivamente x , y , z
- 6.21 (a) $n\pi/2a$ (b) $\hbar^2/(2\beta a^2 \cos ka)$
- 6.23 4,811 $\times 10^{-12}$ m
- 6.25 Aproximadamente 1 átomo en 10^8
- 6.27 3,63 $\times 10^{-24}$ s; 1,39 $\times 10^8$ m s⁻¹; 1,98 $\times 10^9$ m⁻¹; 5,05 $\times 10^{-8}$ m
- 6.29 10α 6.33 1,057 $\times 10^{-19}$ m³ C⁻¹; 62,1° 6.35 1,65 micrones

CAPITULO 7

- 7.5 $3,62 \times 10^{-12}$ m; $6,90 \times 10^{-12}$ m; $8,28 \times 10^{-12}$ m
 7.7 ^{28}Si , ^{29}Si , ^{30}Si
 7.13 0,85 MeV; 0,76 MeV, sí
 7.15 ^7Li : 39,24 MeV, 5,61 MeV nucleón $^{-1}$; ^{16}O : 127,62 MeV, 7,98 MeV nucleón $^{-1}$;
 ^{56}Fe : 499,90 MeV, 8,77 MeV nucleón $^{-1}$; ^{138}La : 1417,97 MeV, 8,06 MeV nucleón $^{-1}$
 7.17 $^{13}(\text{Al})$; $^{28}(\text{Ni})$; $^{36}(\text{Kr})$; $^{52}(\text{Te})$; $^{72}(\text{Hf})$
 7.19 $5,062 \times 10^{-2}$ uma
 7.21 1,0078217 uma, 2,014100 uma, 15,99492 uma
 7.27 $2,16 \times 10^{-12}$ m
 7.29 $3,62 \times 10^4$ partículas s^{-1}
 7.31 $2,80 \times 10^{-12}$ m
 7.33 0,150 b
 7.35 (a) ^1H : $(1s_{1/2})_p(1s_{1/2})_n$; ^2H : $(1s_{1/2})_p(1s_{1/2})_n$; ^3He : $(1s_{1/2})_p(1s_{1/2})_n$;
 ^4He : $(1s_{1/2})_p(1s_{1/2})_n$; ^{12}C : $(1s_{1/2}^2 1p_{3/2}^2)_p(1s_{1/2}^2 1p_{3/2}^2)_n$;
 ^{13}C : $(1s_{1/2}^2 1p_{3/2}^2)_p(1s_{1/2}^2 1p_{3/2}^2)_n$ (b) 0 ó 1; $\frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}$; 0; 0; $\frac{1}{2}$
 7.37 $A = 50$, 222 keV; $A = 100$, 74 keV; $A = 150$, 38,2 keV.

CAPITULO 8

- 8.1 (a) $7,86 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ (b) $5,27 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$; 112 a (d) $1,32 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$
 8.9 28 mg 8.13 m_e
 8.17 $Q_{\beta^+} = 0,64 \text{ MeV}$; $Q_{\beta^-} = 0,565 \text{ MeV}$; $Q_{\alpha} = 1,66 \text{ MeV}$
 8.19 18,63 keV
 8.23 (a) ^{23}Na (b) ^{32}P (c) ^{32}P (d) γ (e) ^2H (f) ^{114}In (g) ^{64}Cu (h) γ
 8.27 $^{13}\text{C}(p, \gamma)^{14}\text{N}$; $^{13}\text{C}(d, \gamma)^{14}\text{N}$; $^{13}\text{C}(d, p)^{13}\text{C}$; $^{13}\text{C}(d, n)^{13}\text{C}$; $^{13}\text{C}(d, \alpha)^{10}\text{B}$; $^{13}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$
 8.29 (a) 27,98245 uma (b) 23,98676 uma (c) 27,98192 uma (d) 24,98585 uma
 8.31 (a) 1,535 MeV (b) 2,34 MeV
 8.33 Una línea recta
 8.35 (a) $1,74 \times 10^{14}$ átomos (b) 22 b
 8.37 $1,806 \times 10^{-4}$ 8.39 2,77 cm
 8.41 188 MeV 8.43 $1,2 \times 10^{-6} \text{ kg s}^{-1}$; 2,6 a
 8.45 ^{232}Th : 4,95 MeV; ^{230}Th : 6,11 MeV; ^{238}U : 5,85 MeV; ^{234}U : 5,26 MeV;
 ^{238}Pu : 6,45 MeV; ^{239}Pu : 5,41 MeV
 8.47 7,28 MeV; $2,92 \times 10^{10} \text{ W}$
 8.49 $1,28 \times 10^{11} \text{ a}$

CAPITULO 9

- 9.1 (a) 3,7 (b) $5,26 \times 10^8$
 9.3 (a) 2,53 keV (b) $2,85 \times 10^{-12} \text{ m}$ (c) ^{112}Ag
 9.5 Masa en reposo: 502 MeV; E_x : 680 MeV
 9.7 7480 MeV
 9.9 Para la fig. 9-10: 1840 MeV; para la fig. 9-11: 1810 MeV
 9.15 (a) 0,511 MeV (b) hacia delante: 1,44 MeV, hacia atrás: 0,58 MeV
 9.17 (a) 8,3 GeV (b) 68 GeV

9.19 143,8 MeV

9.21 (a) $\mathcal{Q}_n = 1, \mathcal{Q}_p = \frac{1}{2}, \mathcal{Q}_\Lambda = 0, \mathcal{Q}_K = \frac{1}{2}$ (b) $\mathcal{Q}_n = 1, \mathcal{Q}_p = \frac{1}{2}, \mathcal{Q}_\Lambda = 0, \mathcal{Q}_K = 0$, no puede ocurrir debido a la falta de conservación de $\mathcal{Q}, \mathcal{Q}_n$, y \mathcal{C} .

9.23 (a) $p + p \rightarrow p + \Lambda + K$

$$\begin{array}{ccccc} \mathcal{Q}_n: & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \mathcal{Q}: & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \mathcal{C}: & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{array}$$

$\mathcal{Q}_n, \mathcal{Q}$, y \mathcal{C} se conservan

9.25 $\mathcal{Q}_n, \mathcal{Q}$, y \mathcal{C} se conservan; 2710 MeV

9.33 \mathcal{C} permanece invariante; \mathcal{B} pasa a $-\mathcal{B}$.

CAPITULO 10

10.1 0,206; 1,014

10.3 3480 K

10.5 (b) $U = -\mu_B^2 \partial N \operatorname{tgh}(\mu_B^2/kT)$ (c) cuando $T \rightarrow 0, Z \rightarrow 2$ y $M \rightarrow -\mu_B^2 \partial n/kT$; cuando $T \rightarrow \infty, Z \rightarrow \infty$ y $M \rightarrow -\mu_B n$

10.9 $U = -\mu_B^2 \partial g[(f + \frac{1}{2}) \operatorname{coth}(f + \frac{1}{2})x - \frac{1}{2} \operatorname{coth} \frac{1}{2}x]$

10.11 $(E_2/E_1)^{n_2/n_1} e^{(E_2 - E_1)/kT}$ (a) $6,3 \times 10^{-8}$ (b) 0,395 (c) 2,54

10.13 (a) $4,8 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}, 4,4 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}, 3,9 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ (b) $2,25 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}, 3,9 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}, 7,12 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}, 2,25 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$

10.15 (a) $1,11 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ (b) $5,16 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ (c) $2,16 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$

10.17 (a) 0,166 (b) 0,163

10.23 (a) 42% (b) 8% (c) 43,8% (d) 6,2%

10.27 (a) 0% (b) 35% (c) 93%

10.31 (b) $\lambda = h/(2mkT)^{1/2} = 1,81 \times 10^{-10} \text{ m}$

CAPITULO 11

11.1 (a) $8,1 \times 10^8 \text{ J}$ (b) $1,62 \times 10^8 \text{ J}$

11.3 (a) 60 J (b) libera 70 J (c) $Q_{ad} = 50 \text{ J}, Q_{ab} = 10 \text{ J}$

11.7 (a) $Q = a(T_2 - T_1) + b(T_1^2 - T_2^2) + c\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$

$$(b) \bar{C}_p = a + b(T_2 + T_1) - c/T_1 T_2$$

$$(c) \Delta S = a \ln(T_2/T_1) + 2b(T_2 - T_1) - c/T_1 T_2$$

$$(d) 24,0 \times 10^8 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}, 23,6 \times 10^8 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

11.15 $S_{\text{int}} = -kN \left[\frac{\epsilon}{kT} \operatorname{tgh}(\epsilon/kT) - \ln 2 \cosh(\epsilon/kT) \right];$

$$C_{V \text{ int}} = kN \ln 2 \cosh(\epsilon/kT)$$

11.19 (b) 224,5 cal K⁻¹

11.21 (a) $T = (\partial H/\partial S)_p, V = (\partial H/\partial p)_S$ (b) $p = -(\partial F/\partial V)_T, S = -(\partial F/\partial T)_p$

$$(c) V = (\partial G/\partial p)_T, S = -(\partial G/\partial T)_p$$

11.23 Todas son extensivas excepto p, T y $(\partial H/\partial S)_p$, que son intensivas

11.27 $\Delta S = L/T = 5,28 \text{ cal K}^{-1} \text{ mol}^{-1}; H = L = 1440 \text{ cal mol}^{-1};$

$$\Delta U = \Delta H - p\Delta V = 1440,05 \text{ cal mol}^{-1}$$

11.33 $3,49 \times 10^8 \text{ J}; 3,49 \times 10^8 \text{ J}; 0; 0; 11,6 \text{ J K}^{-1}$

CAPITULO 12

- 12.1 $W = nRT \ln(V_2/V_1) - n^2(RTb - a) \left[\frac{1}{V_2} - \frac{1}{V_1} \right] + \dots; 1427,3 \text{ J}$
- 12.5 (a) $\kappa_T = 1/p$ (b) $\kappa_T = V^2(V - nb)^2 / \{nRTV^2 - 2n^2a(V - nb)^2\}$
- 12.7 (a) $p^{b^2-1} \gamma T = C$ (b) $TV^{\gamma-1} = C$
- 12.13 (b) $T_1 V_1^{\gamma-1} = T_2 V_2^{\gamma-1}$, $T_2 = 212 \text{ K}$, $T_3 = 88,5 \text{ K}$ (c) $3,25 \times 10^4 \text{ J}$
- 12.15 (b) $W_{12} = 16,90 \times 10^4 \text{ J}$; $W_{23} = 0$; $W_{31} = -13,02 \times 10^4 \text{ J}$; $W_T = 3,88 \times 10^4 \text{ J}$,
 $\Delta S_{12} = 5,39 \times 10^3 \text{ J K}^{-1}$, $\Delta S_{23} = -5,39 \times 10^3 \text{ J K}^{-1}$; $\Delta S_{31} = 0$; $\Delta S_T = 0$
- 12.17 $T = \Theta_r$, $l = 0$: 36,9%, $l = 1$: 43,2%; $T = 2\Theta_r$, $l = 0$: 30,2%, $l = 1$: 55,3%
- 12.19 $1,2 \times 10^6$ moléculas de H_2 , $2,65 \times 10^{21}$ moléculas de Cl_2

CAPITULO 13

- 13.11 2,20 kT 13.15 $n(v) = (8\pi v^2/c^3)kT$ 13.27 $2,09 \times 10^{-7}$

INDICE ALFABETICO

- Absoluta, temperatura, 455, 494
 Absorción, coeficiente de, lineal, 33
 espectro de, 22
 resonante, 48
 umbral de, 184
 Abundancia relativa, 379
 Aceptador, 275
 Acoplamiento, i - j , 164
 L-S, 171
 Actinio, serie del, 341
 Actividad de la sustancia, 343
 Acústica, rama, 250
 Adiabática, compresión, 529
 desmagnetización, 499
 transformación, 487, 497
 Agua (H_2O), molécula de, 210
 niveles vibracionales de la, 228
 Aislador, 270
 Alcance, 76, 384
 Alfa, desintegración, 346
 partícula, 341
 Amoníaco (NH_3), molécula de, 210
 niveles de energía, tabla de, 90
 funciones de onda del movimiento de
 inversión de la, 88
 Análisis de Fourier, 40
 Ancho energético, 46
 Anderson, C. (1905-), 392
 Aniquilación, de un par de electrones,
 393
 protón-antiprotón, 393
 Antineutrino, 354
 Antipartícula, 392
 Antiprotón, 397
 Anti-Stokes, línea, 229
 Apareamiento, efecto de, 299
 energía de, 307, 326
 Aproximación de enlace apretado, 269
 Armónicos esféricos, 127
 Atmósfera, 477
 Atomo intersticial, 247
 Atomo méscico, 424, 439
 Auger, efecto, 185
 Autoconsistente, campo, 447
 Balmer, J. (1825-1898), 121
 Balmer, fórmula de, 120
 Banda, de conducción, 255
 de valencia, 255, 273
 Barión, 391
 Bariónico, número cuántico, 411
 Barn, 302
 Barrera, penetración de una, 83
 de potencial, 83
 Benceno (C_6H_6), molécula de, 219, 287
 Bergmann, serie de, 178
 Berilio, niveles de energía del, 182
 Beta, desintegración, 351
 partícula, 340
 Bethe, ciclo de, 377
 Bióxido de carbono (CO_2), molécula de,
 227
 Bloch, teorema de, 261, 269
 Bohr, N. (1885-1962), 23, 121
 Bohr, fórmula de, 23
 magnetón de, 138
 radio de, 118
 Boltzmann, L. (1844-1906), 11, 448, 495
 Boltzmann, constante de, 456
 Bombeo óptico, 548
 Born, M. (1882-), 248
 Bose, S. (1894-), 540
 Bose-Einstein, ley de distribución de,
 531
 Bosón, 531, 540
 débil, 434
 de masa nula, 391
 Boyle, ley de, 477
 temperatura de, 528

- Brackett, serie de, 121
 Bragg, condición de, 37
 dispersión de, 263
 Bremsstrahlung, 6
 Brillouin, zonas de, 263
 Burbujas, cámara de, 585
- Cadena, reacción en, 373
 Calcio, niveles de energía del, 180
 Calor, 476, 478
 de fusión, 504
 de vaporización, 504
 Caloría, 478
 Cámara, de burbujas, 585
 de chispas, 585
 de ionización, 377, 580
 de niebla, 377, 584
 Cambio de fase, 503
 calor molar de, 504
 Camino óctuple, 434
 Campo, electromagnético, 4
 emisión electrónica de, 87
 de materia, 34
 amplitud del, 56
 Capacidad calorífica de los gases, a presión constante, 486, 517
 a volumen constante, 486, 517
 Capacidad calorífica de los sólidos, 548
 Capas, modelo de, 321
 a partículas independientes, 326
 Captura, electrónica, 353
 neutrónica, 362
 radiativa, 32
 Carbono, ciclo del, 367
 niveles de energía del, 174
 Carga, colisión con intercambio de, 191, 195
 conjugación de, 421
 reflexión de la, 417
 Carnot, ciclo de, 498, 508
 teorema de, 499
 Carozo, 178
 Centro de color, 286
 Centro de masa, sistema de referencia de, o sistema C, 30, 569
 Centros F, 285
 Cíclica, transformación, 480
 Ciclo, 480
 de Bethe o del carbono, 377
 de Carnot, 498, 508
 de Critchfield o protón-protón, 377
 del nitrógeno, 387
 CLAO (combinación lineal de orbitales atómicos), 193
 Clapeyron, ecuación de, 503
- Cloruro de hidrógeno (HCl), molécula de, 223, 226
 Cloruro de sodio (NaCl), molécula de, 207
 Cociente de las capacidades caloríficas, 517
 Coeficiente de expansión cúbica, 501, 527
 Coeficiente de reflexión en un escalón de potencial, 66
 Colectiva, rotación, 329
 vibración, 329
 en un sólido, 548
 Colisión inelástica, 27, 569
 Compresibilidad adiabática, 529
 Compton, A. (1892-1962), 15
 Compton, efecto, 16
 longitud de onda, 16
 Condon, E. (1902-), 233
 Conducción, banda de, 255
 Conductividad, 275
 intrínseca, 275
 Conductor, 271
 Configuración, 164
 Conjugación de carga, 421
 Conjugadas, moléculas, 216
 Conmutador, 110
 Conservación, de los bariones, 411
 de la carga, 416
 de la energía, 416
 de la extrañeza, 414
 de la paridad, 418
 de las partículas, 66
 del isospín, 411
 de los leptones, 410
 del momento, 415
 angular, 415
 Contacto, diferencia de potencial de, 540
 Contador, de centelleo, 579
 de Cherenkov, 584
 de Geiger-Müller, 581
 proporcional, 581
 Continuo, espectro de energía, 25
 Correspondencia, principio de, 126
 Corrimiento, Doppler electromagnético, 48, 53
 Lamb, 147
 Coulombiana, dispersión, 319
 excitación, 29, 331
 integral, 163
 Covalente, enlace, 206
 sólido, 239
 CP, operación, 422
 CPT, operación, 423
 Cristal iónico, 242
 Critchfield, ciclo de, 377

- Cuantización, de la energía, 68
 espacial, 123
 Cuerpo negro, radiación de, 8, 544
 Curie, P. (1859-1906) y M. (1867-1934), 343
 Curie, 343
- Chadwick, J. (1891-), 365
 Cherenkov, contador de, 584
 Chispas, cámara de, 585
- Dador, 275
 Dalitz, diagrama de, 572
 Davisson, C. (1881-1958), 37
 de Broglie, L. (1892-), 34
 de Broglie, longitud de onda de, 34
 Debye, 206
 Debye-Scherrer, diagramas de, 36
 Debye, temperatura de, 550
 Defasaje, 82, 317
 Degeneración, esencial, 123
 de gases, 553
 de intercambio, 157
 Desdoblamiento hiperfino, 335
 Desintegración, constante de, 341
 espontánea, 398
 modos de, de las partículas inestables, 397
 probabilidad de, 343
 Detector de centelleo, 579
 Deuterio, 376
 Deuterón, 304, 310
 Diamante, 241
 Dieterici, ecuación de, 516
 Diferencia de potencial de contacto, 539
 Difusa, serie, 179
 Difusión, 488
 Dipolo eléctrico, 6
 magnético, 299
 Dislocación de arista, 247
 Disociación, 31
 energía de, 79, 209, 224
 Dispersión, 361
 amplitud de, 314, 337
 de Bragg, 263
 coherente o de Rayleigh, 229
 coulombiana, 319
 elástica e inelástica, 361
 neutrón-protón, 313
 de Raman, 230
 s, 318
 Doblete, 91, 144
 Doppler, corrimiento, electromagnético, 48, 53
- Drude-Lorentz, teoría de, 280
 Dulong-Petit, ley de, 551
- Ecuación de estado, 481
 de Dieterici, 516
 de Klein-Gordon, 153
 de un gas ideal, 507
 de un gas real, 509
 de un sistema, 507
 de van der Waals, 528
 Ecuación Q, 569
 Efecto, de apareamiento, 299
 Auger, 185
 Compton, 16
 fotoeléctrico, 12, 538
 atómico, 31
 Hall, 290
 Joule, 281
 Mössbauer, 48
 Raman, 229
 Zeeman, 137
 Zener, 266
 Eficiencia de una máquina térmica, 499
 Efusión, 465
 Einstein, A. (1879-1955), 13, 546
 Elástica, dispersión, 361
 Electrón, 390
 Electrón-positrón, par, 33
 Electrones, gas de, 535
 libres, modelo de, 256
 producción de pares de, 393
 Elemental, partícula, 392
 Elementos de matriz, 105
 Emisión, de campo, 87
 espectro de, 23
 espontánea, 99
 estimulada, 99, 546
 termiónica, 539
 Emitividad de radiación, 11
 Emulsión fotográfica, 586
 Energía, de arranque, 13, 259, 538
 ancho de, 149
 de apareamiento, 308, 326
 banda de, 255, 272
 cinética interna, 475
 conservación de la, 417
 corrección relativista de la, 135
 cuantización de la, 67
 densidad de, monocromática, 7
 de disociación, 79
 equipartición de la, 525
 de Fermi, 258, 534
 filtro de, 38
 interna, 474
 total, 475

- Energía, de ionización, 31, 79
 de los elementos, 165
 libre, de Gibbs, 503
 de Helmholtz, 501, 503
 de ligadura, 79
 más probable, 467
 nivel de, 23, 68
 química, 478
 potencial interna, 474
 de punto cero, 69, 76
 en reposo, 567
 vibracional de punto cero, 208, 224
- Enlace, covalente, 206
 iónico, 206
 π y σ , 213
- Enlace hidrógeno, sólidos con, 243
- Enlace apretado, aproximación de, 269
- Entalpía, 486, 516
- Entropía, 494
 de un gas ideal, 488
- Equilibrio, estadístico, 447
 partición de, 457
 térmico, 460
- Equipartición de la energía, 524
- Espacio, de fase, 44
 de isospín, 412
- Espectro, de absorción, 22
 de bandas, 226
 continuo y discreto, 24, 79
 de emisión, 23
 de líneas, 120
 de rayos X, 22, 182
- Espectrómetro de centelleo, 579
- Espesor medio, 53
- Espín, del electrón, 140
 funciones de onda de, 160
 isobárico o isotópico, 412
 nuclear, 298
 razón giromagnética de, 299
- Espontánea, desintegración, 398
 emisión, 99
 fisión, 370
 transición radiativa, 545
- Estacionario, estado, 23, 95
- Estadística, de Bose-Einstein, 531
 de Fermi-Dirac, 531, 534
 de Maxwell-Boltzmann, 448
- Estado, ecuación de, 481
 estacionario, 22, 95
 excitado y fundamental, 22
 ligado y no ligado, 116
 metaestable, 125
 molecular, 201
 probabilidad de, 531
- Estrella, gigante roja, 382
 de primera generación, 382
- Estrella, de la secuencia principal, 382
 de segunda generación, 382
- Estructura fina, 162
 constante de, 136
- Etano (H_3C-CH_3), molécula de, 214
- Etileno ($H_2C=CH_2$), molécula de, 214
- Excitación, coulombiana, 29
 energía de, 27
- Excitaciones colectivas, 319
- Exclusión, principio de, 164
- Expansión libre, 491
- Expansión, relación de, 477
- Extrañeza, 412
- Fase, cambio de, 503
 espacio de, 44
- Fenómenos de transporte, 489
- Fermi, E. (1901-1954), 344, 531
- Fermi-Dirac, ley de distribución de, 531
- Fermi, energía de, 258, 533
 temperatura de, 534
 velocidad de, 283
- Fermión, 168, 389, 521
- Fisión, 306, 369
 espontánea, 370
- Fonón, 252
- Fonones, gas de, 550
- Fosforescencia, 287
- Fotoeléctrico, efecto, 12, 538
 atómico, 31
- Fotofisión, 369
- Fotoionización, 32
- Fotón, 18, 389
 espín del, 393
 virtual, 433
- Fotones, gas de, 543
- Fotonuclear, reacción, 33, 361
- Fourier, análisis de, 40
- Franck, J. (1882-), 27, 233
- Franck-Condon, principio de, 233
- Función error, 470
- Función de onda, 55
 angular, 128
 antiligante y ligante, 193
 en forma de determinante, 166
 molecular, 201
 normalización y ortogonalidad de la, 69
 paridad de la, 130
- Función de partición, 450
 de un gas ideal, 461
 gran, 510
- Función propia, 100
- Fundamental, partícula, 356, 389
- Fusión, 394
- Fusión, calor de, 503

- Gamma, rayos, 331, 340
 Gases, constante de los, 463
 degeneración de, 553
 Gas, de electrones, 535
 de fonones, 550
 de fotones, 543
 Gas ideal, distribución de energía en un, 463
 entropía de un, 488
 monoatómico, función de partición de un, 461
 Gas real, ecuación de estado de un, 509, 513
 gran función de partición de un, 510, 513
 Geiger-Müller, contador de, 581
 Gell-Mann, M. (1929-), 434
 Gerade, 201
 Germer, L. (1896-), 37
 Gibbs, J. (1839-1903), 448
 Gibbs, energía libre de, 503
 Gigante roja, 382
 Grados de libertad, 525
 Grafto, 246
 Gran función de partición, 510
 de un gas real, 510, 513
 Gravitón, 389
 Grupo, velocidad de, 263, 573
- Hadrones, 412
 Hall, efecto, 290
 Hamiltoniano, 101
 Heisenberg, W. (1901-), 40
 Heisenberg, principio de indeterminación de, 40
 Helicidad, 393
 Helio II, 554
 Helio, combustión del, 381
 niveles de energía del, 161
 Helmholtz, energía libre de, 501, 503
 Hermite, polinomios de, 107
 Hermitiana, 100
 Hertz, G. (1887-), 27
 Hertz, H. (1857-1894), 12
 Hibridización de funciones de onda, 212
 Hidrógeno, átomo de, 113
 espectro del, 119
 funciones de onda radiales del, 130
 niveles de energía del, 118
 Hidrógeno (H^+), ion de la molécula de, 191
 Hidrógeno (H_2), molécula de, 202
 Hielo, 244
 Hipercarga, 414
 Hipérfino, desdoblamiento, 335
- Hueco, 267
 Hund, regla de, 169, 172
- Imperfecciones, 247, 282
 Impurezas, 247
 Indeterminación, principio de, de Heisenberg, 40
 Inelástica, dispersión, 361
 Intensidad del campo de materia, 56
 Interacción, débil, 356
 electromagnética, 4
 espín-órbita, 145, 322
 fuerte, 293
 nuclear, 293, 310
 residual, 326
 rotación-vibración, 229
 Intercambio, degeneración de, 157
 integral de, 163
 Intersticial, átomo, 247
 Inversión del tiempo, 423
 Ion, 113
 Iónico, cristal, 242
 enlace, 206
 Ionización, cámara de, 580
 energía de, 32, 79
 de los elementos, 164
 potencial, 31
 Ionosfera, 32
 Irreversible, transformación, 483
 Isobárica, transformación, 486
 Isobárico, espín, 412
 Isóbaro, 293
 Isóbaros nucleónicos, 435
 Isoentrópica, transformación, 478
 Isomérica, transición, 334
 Isomerismo, islas de, 334
 Isómero, 334
 Isospín, 412
 conservación del, 411
 espacio de, 412
 rotación de, 417
 Isotérmica, transformación, 487, 498
 Isotérmico, módulo volumétrico, 502
 Isótono, 293
 Isotópico, espín, 412
 Isótopo, 293
- Joule, efecto de, 281
- Kaón, 400
 Kelvin, 456, 508
 Kernel, 171

- Kilocaloría por mole, 235
 Klein-Gordon, ecuación de, 153
- Laboratorio, sistema de referencia de,
 o sistema *L*, 29
 Laguerre, polinomio de, asociado, 151
 Lamb, corrimiento, 147
 Landé, factor de, 148
 Langevin, fórmula de, 459
 Láser, 548
 Laue, diagrama de manchas de, 37
 Lee, T. (1926-), 417
 Legendre, polinomio de, 150
 Leptón, 390
 Leptónico, número cuántico, 410
 Ley de distribución, de Bose-Einstein,
 540
 de Fermi-Dirac, 531
 de Maxwell-Boltzmann, 448, 457
 Líneas, espectro de, 120
 Lorentz, transformación de, 565
 Luminiscencia, 286
 Lyman, serie de, 121
- Macroscópica, sección eficaz, 33, 362
 de dispersión, 282
 Madelung, constante de, 248
 Magnetón, de Bohr, 138
 nuclear, 299
 Masa, atómica, 296
 unidad de, 296
 defecto de, 385
 efectiva, 266
 reducida, 116
 Máser, 548
 Mésico, número, 113, 293
 Mathiessen, regla de, 283
 Máximo traslape, principio de, 209
 Maxwell, J. (1831-1879), 448
 Maxwell-Boltzmann, ley de distribución
 de, 448, 457
 Maxwell, relaciones de, 503
 fórmula de, para un gas ideal, 463
 Medida, transformación de, 417
 Mésico, átomo, 424, 439
 Mesón, 391
 Metaestable, estado, 125
 Metal, 245, 271
 Metano (CH_4), molécula de, 212
 Moderador, 373
 Modos normales de vibración, 227
 Módulo volumétrico, 297, 528
 isotérmico, 502
- Mole, 464
 Molécula, 189
 acetileno, 216
 agua, 211
 amoníaco, 211
 benceno, 221
 butadieno, 217
 caroteno beta, 236
 cloruro de sodio, 205
 conjugada, 216
 etano, 214
 etileno, 213
 heteronuclear, 205
 hidrógeno, 202
 homonuclear, 201
 metano, 222
 oxígeno, 205
 Molecular, rotación, 221
 sólido, 244
 vibración, 223
 Momento cuadrupolar eléctrico, 300, 336
 Momento dipolar, eléctrico, 6
 magnético, 299, 328
 de espín, 140
 orbital, 137
 Momentum angular, conservación del,
 415
 cuantización del, 123
 de espín, 140
 nuclear, 298
 total, 140, 170
 Morse, potencial de, 207
 Moseley, H. (1887-1915), 188
 Mössbauer, R. (1929-), 48
 Mössbauer, efecto, 48
 Movimiento oscilatorio térmico, 382
 Multiplete, 171, 411
 Multiplicadores indeterminados de La-
 grange, 453, 576
 Multiplicidad, 162, 172
 Multipolar, transición, 332
 Muonio, 439
- Ne'eman, Y. (1925-), 434
 Neutrino, 354
 experimento de detección del, de
 Cowan-Reines, 356
 Neutrón, 390
 descubrimiento del, 366
 Neutrones, detección de, 582
 difracción de, 37
 térmicos, 37
 Neutrónica, captura, 322, 363
 Niebla, cámara de, 377, 584
 Nitrógeno, ciclo del, 387

- Normalización, 58, 59
 Nuclear, energía de ligadura, 304
 espín, 298
 interacción, 293
 magnetón, 299
 momento dipolar magnético, 328
 momentum angular, 298
 radio, 297
 razón giromagnética, 299
 reacción, 358
 Q de una, 361, 385
 reactor, 373
 Nucleido, 293
 Núcleo, compuesto, 360
 residual, 340
 Nucleón, 293
 Núcleos reflejados, 308
 Número, atómico, 113, 293
 cuántico, bariónico, 411
 leptónico, 410
 mágico, 322
 másico, 113, 293
 de onda, 61, 119

 Ohm, ley de, 278
 OM (orbital molecular), 193
 Omega menos, el experimento, 436
 Onda parcial, 315
 Operadores, 100
 cuánticos, tabla de, 102
 Orbital, atómico, 159
 molecular, 193, 201
 Orbitales, funciones de onda, 159
 Órbitas penetrantes, 130
 Ortogonales, 100
 Ortohelio, 161
 Ortohidrógeno, 233
 Oscilador armónico cuántico, 74
 Oxígeno (O₂), molécula de, 205
 Oxígeno, niveles de energía del, 175

 Paquete de ondas, 39, 60
 Parahelio, 161
 Parahidrógeno, 233
 Paramagnetismo de espín o de Pauli, 259
 Parámetro de impacto, 315
 Pares, producción de, 33, 395
 Paridad, 91, 303, 324, 417
 no conservación de la, 418
 operación de, 420
 Partición, de equilibrio, 457
 más probable, 447
 función de, 451
 de un gas ideal, 464

 Partición, función de, gran, 510
 Partículas, fundamentales o elementales,
 345, 389
 idénticas, 448, 531
 virtuales, 433
 Partículas independientes, modelo de,
 156
 Paschen, serie de, 121
 Pauli, W. (1900-1958), 165
 Permitividad eléctrica, 289
 Pfund, serie de, 121
 Pion, 390, 401
 Planck, M. (1858-1947), 8
 Planck, ley de radiación de, 9, 544
 Plasma, 375
 p-n, unión, 276
 Polinomio, de Hermite, 107
 de Laguerre asociado, 151
 de Legendre, 150
 Positrón, 33, 351, 390
 Positronio, 395
 Potencial, barrera de, 83
 caja de, 66
 bidimensional, 107
 escalón de, 61
 de Morse, 207
 pared de, 65
 pozo de, 76
 de Yukawa, 310
 Presión, 477
 de punto cero, 554
 Primera ley de la termodinámica, 479
 Principal, serie, 181
 Principio, de equipartición de la energía,
 524
 de exclusión, 164
 de indeterminación, 40
 de máximo traslape, 209
 Principios de la mecánica cuántica, 102
 Probabilidad, 57
 densidad de, 57
 de distribución, 446
 de estado, 531
 intrínseca, 438, 531
 de transición, 44, 97
 espontánea, 547
 por emisión inducida, 546
 radiativa, 332
 Producción, asociada, 414
 de pares, 395
 Protón, 390
 Protón-protón, ciclo, 377
 Punto cero, energía de, 69, 74
 presión de, 554
 Punto clásico de retorno, 78
 p-V, diagrama, 484

- Q** de una reacción nuclear, 361, 385
Quark, 432
- Radiación**, de cuerpo negro, 8, 531
 electromagnética, 5
 emitividad de la, 11
 ley de, de Planck, 9, 544
 sincrotrónica, 5
- Radial**, ecuación de Schrödinger, 135
 función de onda, 130
- Radiativa**, captura, 32
 transición, inducida y espontánea, 544
- Radiativas**, transiciones, en sólidos, 283
- Rama acústica**, 250
- Raman**, C. (1888-), 229
 Raman, efecto, 229
- Rayleigh-Jeans**, ley de, 49, 557
- Rayos**, cósmicos, 405
 gamma, 331, 340
 X, característicos, 182
 difracción de, 37
 emisión de, en sólidos, 284
- Razón giromagnética**, 140
 de espín, 299
 nuclear, 300
- Reacción**, en cadena, 373
 fotonuclear, 361
 nuclear, 359
 Q de una, 361, 385
 de stripping, 360
- Reactor**, de fusión, 375
 nuclear, 373
- Red cristalina**, 241
- Red**, momentum en la, 264
 vibraciones de la, 250
- Refrigerante**, 374
- Regla de selección**, 97, 124
 para una transición dipolar eléctrica,
 174
- Relajamiento**, tiempo de, 279
- Resistividad**, 279
 residual, 283
- Resonancia**, 22, 362, 389, 427
- Richardson-Dushman**, ecuación de, 539,
 556
- Rotación**, energía cinética de, 222
 molecular, 221
 temperatura característica de, 518
- Ruido**, 548
- Russell-Saunders**, acoplamiento, 171
- Rutherford**, E. (1871-1937), 320
- Rydberg**, constante de, 115
- Sackur-Tetrode**, ecuación de, 491
- Saturación**, 306
- Schmidt**, líneas de, 328
- Schrödinger**, E. (1887-1961), 58
- Schrödinger**, ecuación de, 58
 dependiente del tiempo, 93
 radial, 135
 relativista, 153
- Sección eficaz**, 361
 diferencial, 315
 de dispersión, coulombiana, 319
 macroscópica, 282
 macroscópica total y parcial, 34,
 362
 por centro, 283
 total, 317
- Segunda ley de la termodinámica**,
 487
- Selector de velocidades**, 466
- Semiconductor**, 270
 tipo n y tipo p, 275
- Semimetal**, 273
- Serie definida**, 181
- Serie**, del hidrógeno, 121
 radioactivas, 341
- Singlete**, 159
- Sistema de referencia**, de centro de masa
 o sistema C, 29, 567
 de laboratorio o sistema L, 28, 29
- Slater**, J. (1900-), 177
- Sodio**, estructura fina del, 179
- Sólido**, covalente, 239
 con enlace hidrógeno, 243
 iónico, 241
 molecular, 244
- Sonido**, velocidad del, 549
- Stefan**, J. (1835-1893), 11
- Stefan-Boltzmann**, ley de, 11, 504
- Stern-Gerlach**, experimento de, 140
- Stirling**, fórmula de, 440, 575
- Stokes**, línea de, 229
- Stripping**, reacción de, 360
- Superposición**, integral de, 198
- Tabla**, relación entre las capacidades
 calóricas, 526
 configuraciones electrónicas de los
 átomos, 168
 configuraciones electrónicas de molé-
 culas diatómicas homonucleares, 204
 constante de Rydberg, 116
 constantes rotacionales y vibraciona-
 les de moléculas diatómicas, 221
 constante termiónica, 539
 constantes de van der Waals, 515
 corrección energética por el movi-
 miento nuclear, 119

- Tabla, degeneración esencial, 122
 designación de estados electrónicos, 143
 designación de estados de momentum angular, 122
 energía de arranque, 539
 energías de disociación de moléculas diatómicas, 206
 espaciamientos de energía, 275
 energía de Fermi, 258, 537
 extrañeza de los mesones y los bariones, 410
 fisiónabilidad de núcleos pesados, 369
 función error, 470
 funciones de onda angulares, 128
 funciones de onda de un oscilador armónico, 75
 funciones de onda radiales, 130
 hipercarga e isospin de los mesones y los bariones, 411
 longitudes de unión en moléculas diatómicas, 206
 masas efectivas, 267
 modos de desintegración de las partículas, 400
 momentos dipolares eléctricos de moléculas diatómicas, 206
 niveles de energía y degeneración en una caja cúbica, 71
 niveles vibracionales de energía de la molécula de NH_3 , 90
 nucleidos estables y de vida larga, 326
 operadores cuánticos, 102
 partículas fundamentales, 390
 propiedades de los materiales fisiónables, 371
 propiedades de los nucleidos, 301
 serie del uranio, 341
 temperatura característica de rotación, 520
 temperatura característica de vibración, 520
 temperaturas de Debye, 550
 temperatura de Fermi, 536
 términos de electrones equivalentes, 172
 umbrales de fotofisión, 369
 valores de Q para diversas desintegraciones del ^{235}U , 351
- Temperatura, 507
 absoluta, 456, 494
 negativa, 495
 de Boyle, 528
 característica, de rotación, 518
 de vibración, 521
- Temperatura de Debye, 550
 de Fermi, 534
 medición de la 507
 termodinámica, 509
- Térmico, movimiento oscilatorio, 382
- Término, 172
 del estado fundamental molecular, 209
- Términos de electrones equivalentes, tabla de, 172
- Termodinámica, 474
 ley cero de la, 460
 primera ley de la, 479
 segunda ley de la, 487
- Termodinámica, superficie, 481
 temperatura, 509
- Terminológica, emisión, 539
- Termómetro, 507
 de gas, 508
- Thomson, G. (1892-), 36
- Tiempo, inversión del, 423
 de relajamiento, 279
 traslación del, 417
- Torio, serie del, 341
- Trabajo, 475
 externo, 479
- Trampa, 286
- Transformación, adiabática, 487, 497
 cíclica, 480
 irreversible, 483
 isobárica, 486
 isocórica, 485
 isoentrópica, 475
 isotérmica, 487, 498
 de Lorentz, 565
 de medida, 417
 reversible, 482
- Transiciones, dipolares eléctricas, 97
 electrónicas en moléculas, 232
 isoméricas, 334
 multipolares, 332
 radiativas, 532
 en sólidos, 285
 vibración-rotación, 225
 espontánea, 533
- Transición, probabilidad de, 44, 97
- Traslape, principio de máximo, 209
- Tritio, 376
- Umbral de energía, 404
 cinética, 28
- Ungerade, 201
- Unidad de masa atómica, 296
- Unificado, modelo, del núcleo, 327

- Unión p-n, 276
 Uranio, serie del, 340
- Valencia, banda de, 255, 273
 electrón de, 178
 Valor medio, 103
 Valor propio, 100
 van der Waals, constantes de, 515
 fuerza de, 245
 Variables extensivas e intensivas, 502
 Vectores axiales y polares, 418
 Velocidad, del centro de masa, 30
 de fase, 39, 573
 de Fermi, 283
 de grupo, 39, 263, 573
 del sonido, 549
 más probable, 467
 media, 467
 media cuadrática, 467
 Velocidades, selector de, 466
 Vibracional, energía de punto cero, 208, 224
 estado nuclear excitado, 330
 Vibración, colectiva de un sólido, 548
 de la red, 249
 modos normales de, 227
- Vibración, molecular, 223
 temperatura característica de, 521
 Vibración-rotación, transiciones, 225
 Vida, 46
 promedio de, 99
 Vida media, 341
 Viriales, coeficientes, 509
- Wien, W. (1864-1928), 10
 Wien, ley de desplazamiento de, 11
 Weiszäcker, fórmula de, para las energías de unión nucleares, 306
 W, partícula, 390
 Wu, C. (1913-), 420
- Yang, C. (1922-), 418
 Yukawa, H. (1907-), 310, 401
 Yukawa, potencial de, 310
 Yang, Ch. (1922-), 418
- Zeeman, P. (1865-1943), 137
 Zeeman, efecto, 137
 Zener, efecto, 266

Tabla A-3 Unidades y Símbolos

Magnitud	Símbolo	Nombre de la unidad*	Relación con las unidades fundamentales	
			MKSC	MKSA
Longitud	l, s	meter		m
Masa	m	kilogram		kg
Tiempo	t	second		s
Velocidad	v			$m\ s^{-1}$
Aceleración	a			$m\ s^{-2}$
Velocidad angular	ω			s^{-1}
Frecuencia angular	ω			s^{-1}
Frecuencia	ν	hertz (Hz)		s^{-1}
Momentum	p			$m\ kg\ s^{-1}$
Fuerza	F	newton (N)		$m\ kg\ s^{-2}$
Momentum angular	L			$m^2\ kg\ s^{-1}$
Torque	τ			$m^2\ kg\ s^{-2}$
Trabajo	W	joule (J)		$m^2\ kg\ s^{-2}$
Potencia	P	watt (W)		$m^2\ kg\ s^{-2}$
Energía	E_k, E_p, U, E	joule (J)		$m^2\ kg\ s^{-2}$
Temperatura	T	K		$m^2\ kg\ s^{-2}/partícula$
Coefficiente de difusión	D			$m^2\ s^{-1}$
Coefficiente de conductividad térmica	K			$m\ kg\ s^{-2}\ K^{-1}$
Coefficiente de viscosidad	η			$m^{-1}\ kg\ s^{-1}$
Módulo de Young	Y			$m^{-1}\ kg\ s^{-2}$
Módulo volumétrico	κ			$m^{-1}\ kg\ s^{-2}$
Módulo de corte	G			$m^{-1}\ kg\ s^{-2}$
Momento de inercia	I			$m^2\ kg$
Campo gravitacional	g			$m\ s^{-2}$
Potencial gravitacional	V_g			$m^2\ s^{-2}$
Carga	q, Q	coulomb	C	A s
Corriente eléctrica	I	ampère	$s^{-1}\ C$	A
Campo eléctrico	e		$m\ kg\ s^{-2}\ C^{-1}$	$m\ kg\ s^{-2}\ A^{-1}$
Potencial eléctrico	V	volt (V)	$m^2\ kg\ s^{-2}\ C^{-1}$	$m^2\ kg\ s^{-2}\ A^{-1}$
Densidad de corriente	j		$m^{-2}\ s^{-1}\ C$	$m^{-2}\ A$
Resistencia eléctrica	R	ohm (Ω)	$m^2\ kg\ s^{-1}\ C^{-2}$	$m^2\ kg\ s^{-2}\ A^{-2}$
Inductancia	L	henry (H)	$m^2\ kg\ C^{-2}$	$m^2\ kg\ s^{-2}\ A^{-2}$
Permitividad eléctrica	ϵ_0		$m^{-3}\ kg^{-1}\ s^4\ C^2$	$m^{-2}\ kg^{-1}\ s^4\ A^2$
Polarización	\mathcal{P}		$m^{-2}\ C$	$m^{-2}\ s\ A$
Desplazamiento eléctrico	\mathcal{D}		$m^{-2}\ C$	$m^{-2}\ s\ A$
Campo magnético	\mathcal{H}	tesla (T)	$kg\ s^{-1}\ C^{-1}$	$kg\ s^{-2}\ A^{-1}$
Permeabilidad magnética	μ_0		$m\ kg\ C^{-2}$	$m\ kg\ s^{-2}\ A^{-2}$
Magnetización	\mathcal{M}		$m^{-1}\ s^{-1}\ C$	$m^{-1}\ A$
Campo magnetizante	\mathcal{H}		$m^{-1}\ s^{-1}\ C$	$m^{-1}\ A$
Flujo magnético	Φ, \mathcal{W}	weber (Wb)	$m^2\ kg\ s^{-1}\ C^{-1}$	$m^2\ kg\ s^{-2}\ A^{-1}$
Momento eléctrico dipolar	p		$m\ C$	$m\ s\ A$
Momento eléctrico cuadrípolar	Q		$m^3\ C$	$m^3\ s\ A$
Momento magnético dipolar	M		$m^2\ s^{-1}\ C$	$m^2\ A$
Momento magnético cuadrípolar	Q		$m^3\ s^{-1}\ C$	$m^3\ A$
Capacitancia	C	farad (F)	$m^{-2}\ kg^{-1}\ s^4\ C^2$	$m^{-2}\ kg^{-1}\ s^4\ A^2$

* Nomenclatura internacional.

Tabla A-1 Factores de conversión

Tiempo:

1 s = 1,667 × 10⁻³ min = 2,778 × 10⁻⁴ h
 = 3,169 × 10⁻⁸ año
 1 min = 60 s = 1,667 × 10⁻³ h
 = 1,901 × 10⁻⁷ año
 1 h = 3600 s = 60 min = 1,141 × 10⁻⁴ año
 1 año = 3,156 × 10⁷ s = 5,259 × 10⁶ min
 = 8,766 × 10⁶ h

Longitud:

1 m = 10² cm = 39,37 pulg = 6,214 × 10⁻⁴ mi.
 1 mi = 5280 pie = 1,609 km
 1 pulg = 2,540 cm
 1 Å (angstrom) = 10⁻⁸ cm = 10⁻¹⁰ m
 = 10⁻⁴ μ (micrón)
 1 μ (micrón) = 10⁻⁶ m
 1 UA (unidad astronómica) = 1,496 × 10¹¹ m
 1 año luz = 9,46 × 10¹⁶ m
 1 parsec = 3,084 × 10¹⁶ m

Angulo:

1 radián = 57,3°
 1° = 1,74 × 10⁻² rad
 1' = 2,91 × 10⁻⁴ rad
 1" = 4,85 × 10⁻⁶ rad

Area:

1 m² = 10⁴ cm² = 1,55 × 10⁻⁴ pulg²
 = 10,76 pie²
 1 pulg² = 6,452 cm²
 1 pie² = 144 pulg² = 9,29 × 10⁻² m²

Volumen:

1 m³ = 10⁶ cm³ = 10³ litros
 = 35,3 pie³ = 6,1 × 10⁴ pulg³
 1 pie³ = 2,83 × 10⁻² m³ = 28,32 litros
 1 pulg³ = 16,39 cm³

Velocidad:

1 m s⁻¹ = 10² cm s⁻¹ = 3,281 pie s⁻¹
 1 pie s⁻¹ = 30,48 cm s⁻¹
 1 km min⁻¹ = 60 km h⁻¹ = 16,67 m s⁻¹

Aceleración:

1 m s⁻² = 10² cm s⁻² = 3,281 pie s⁻²
 1 pie s⁻² = 30,48 cm s⁻²

Masa:

1 kg = 10³ g = 2,205 lb
 1 lb = 453,6 g = 0,4536 kg
 1 uma = 1,6604 × 10⁻²⁷ kg

Fuerza:

1 N = 10⁵ dina = 0,2248 lbf = 0,102 kgf
 1 dina = 10⁻⁵ N = 2,248 × 10⁻⁶ lbf
 1 lbf = 4,448 N = 4,448 × 10⁵ dina
 1 kgf = 9,81 N

Presión:

1 N m⁻² = 9,265 × 10⁻⁴ atm
 = 1,450 × 10⁻⁴ lbf pulg⁻²
 = 10 dina cm⁻²
 1 atm = 14,7 lbf pulg⁻² = 1,013 × 10⁵ N m⁻²
 1 bar = 10⁵ dina cm⁻²

Energía:

1 J = 10⁷ ergs = 0,239 cal
 = 6,242 × 10¹⁸ eV
 1 eV = 10⁻⁴ MeV = 1,00 × 10⁻¹² erg
 = 1,07 × 10⁻⁹ uma
 1 cal = 4,186 J = 2,613 × 10¹⁸ eV
 = 2,807 × 10¹⁰ uma
 1 uma = 1,492 × 10⁻¹⁸ J
 = 3,564 × 10⁻¹² cal = 931,0 MeV

Temperatura:

K = 273,1 + °C
 °C = $\frac{5}{9}$ (°F - 32)
 °F = $\frac{9}{5}$ °C + 32

Potencia:

1 W = 1,341 × 10⁻³ hp
 1 hp = 745,7 W

Carga eléctrica:*

1 C = 3 × 10⁹ stC
 1 stC = $\frac{1}{3}$ × 10⁻⁹ C

Corriente:*

1 A = 3 × 10⁹ stA
 1 stA = $\frac{1}{3}$ × 10⁻⁹ A
 1 μA = 10⁻⁶ A, 1 mA = 10⁻³ A

Campo eléctrico:*

1 N C⁻¹ = 1 V m⁻¹ = 10⁻³ V cm⁻¹
 = $\frac{1}{3}$ × 10⁻⁴ stV cm⁻¹

Potencial eléctrico:*

1 V = $\frac{1}{3}$ × 10⁻³ stV
 1 stV = 3 × 10³ V

Resistencia:

1 Ω = 10⁹ μΩ
 1 MΩ = 10⁶ Ω

Capacitancia:*

1 F = 9 × 10¹¹ stF
 1 stF = $\frac{1}{9}$ × 10⁻¹¹ F
 1 μF = 10⁻⁶ F, 1 pF = 10⁻¹² F

Campo magnético:

1 T = 10⁴ gauss, 1 gauss = 10⁻⁴ T

Flujo magnético:

1 Wb = 10⁸ maxwell, 1 maxwell = 10⁻⁸ Wb

Campo magnetizante:

1 A m⁻¹ = 4π × 10⁻³ oersted
 1 oersted = 1/4π × 10³ A m⁻¹

* En todos los casos, 3 significa solamente 2,998 y 9 significa 8,9.