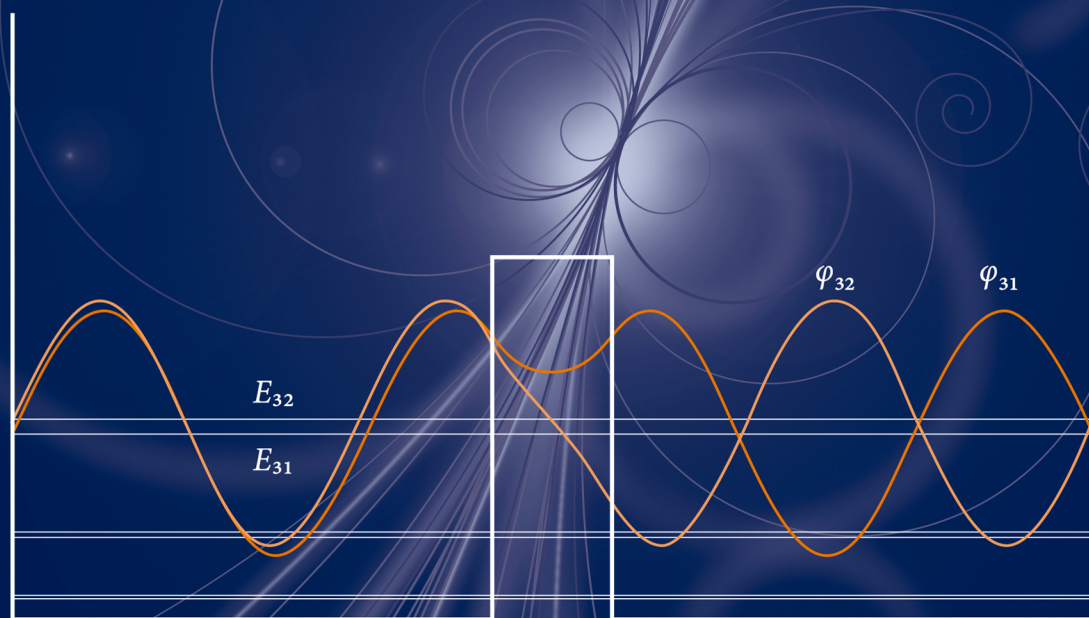


FUNDAMENTOS DE FÍSICA CUÁNTICA

PEDRO PEREYRA PADILLA



EDITORIAL REVERTÉ
UAM

FUNDAMENTOS DE FÍSICA CUÁNTICA

Pedro Pereyra Padilla

Departamento de Ciencias Básicas
División de Ciencias Básicas e Ingeniería
Universidad Autónoma Metropolitana - Unidad Azcapotzalco
Editorial Reverté
2011

UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA
METROPOLITANA
Casa abierta al tiempo 
Azcapotzalco



EDITORIAL
REVERTÉ

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

Dr. Enrique Pablo Alfonso Fernández Fassnacht
RECTOR GENERAL

Mtra. Iris Edith Santacruz Fabila
SECRETARIA GENERAL



UNIDAD AZCAPOTZALCO

Mtra. Gabriela Paloma Ibáñez Villalobos
RECTORA

Ing. Darío Eduardo Guaycochea Guglielmi
SECRETARIO DE UNIDAD

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

Dr. Emilio Sordo Zabay
DIRECTOR

Dr. Gabriel Soto Cortés
SECRETARIO ACADÉMICO

Dr. Luis Noreña Franco
JEFE DEL DEPARTAMENTO DE CIENCIAS BÁSICAS

C.P. Rosa Ma. Benítez Mendoza
JEFA DE LA OFICINA DE PRODUCCIÓN EDITORIAL Y DIFUSIÓN

M. en E. Concepcion Asuar
CORRECCIÓN DE ESTILO

D.C.G. Juan Manuel Galindo Medina
DISEÑO GRÁFICO

Diseño de Cubierta: Gabriela Varela + David Kimura

Fundamentos de Física Cuántica
Primera edición, 2011

D.R. © 2011 Pedro Pereyra Padilla
pereyrapedro@gmail.com

D.R. © 2011 Universidad Autónoma Metropolitana
Universidad Autónoma Metropolitana-Unidad Azcapotzalco
Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas
Del. Azcapotzalco, C. P. 02200, México, DF

D.R. © 2011 Reverté Ediciones S.A. de C.V.
Río Pánuco 141, Col. Cuauhtémoc
Delegación Cuauhtémoc, C.P. 06500, México, D.F.

Edición en papel:

© Editorial Reverté, S. A., 2011
ISBN 978-607-477-515-0 (UAM)
ISBN 978-607-7815-05-1 (Reverté Ediciones)
ISBN 978-84-291-4378-2 (Editorial Reverté)

Edición e-book (PDF):

© Editorial Reverté, S. A., 2021
ISBN 978-84-291-9294-0

A mis hijas

Naira Citlalli
Jaina Erandi Mariana

y a mi hijo

Sebastián Fernando

Prólogo

Diversas razones han concurrido en la decisión de escribir este libro. Para comprender algunas de ellas, recordaré brevemente el contexto y las ideas que prevalecían y prevalecen todavía sobre la enseñanza de la mecánica cuántica. Para resumir, citaré a uno de los grandes de la física, a Freeman Dyson. Hace poco más de 50 años, Freeman Dyson¹ observó que un estudiante de física, después de aprender los trucos del formalismo de la mecánica cuántica y obtener respuestas correctas, comienza a preocuparse porque no entiende qué es lo que está haciendo. El estudiante, continúa Dyson, “no tiene una imagen física clara en su cabeza y trata de encontrar una explicación para cada uno de los procedimientos matemáticos”. Se desanima y, después de algunos meses de trabajo árduo y desagradable, de pronto él dice: “comprendo ahora que no hay nada que deba ser comprendido”. Dyson sugiere que aprendemos a pensar en el lenguaje de la mecánica cuántica y ya no tratamos de explicar en términos de conceptos pre-cuánticos. Cuando me enfrenté a mi primer libro de mecánica cuántica tuve una sensación aún peor. Además de un formalismo matemático abstracto, de las funciones de onda, de los bras y kets, de operadores, etc., encontraba interpretaciones controvertibles, generalmente incompatibles con mi concepción del mundo. Para fortuna mía, Thomas Brody², inició en México un seminario sobre interpretaciones del formalismo matemático de la mecánica cuántica. El propósito final era mostrar que, además del formalismo matemático y el excelente acuerdo con los resultados experimentales, era importante reconocer los alcances y limitaciones de la mecánica cuántica, las diferencias entre las principales corrientes de interpretación y sus implicaciones en la correcta comprensión y aplicación de esta extraordinaria teoría. Por más de dos décadas he impartido, con bastante frecuencia, el curso de Física Cuántica, y he tratado de presentar los fundamentos de esta teoría como un conjunto coherente de fenómenos físicos, utilizando, en lo posible, técnicas matemáticas simples. Resumir esa experiencia, es otra de las razones para escribir este libro. La experiencia docente ha ocurrido paralelamente a mi actividad de investigación en temas afines de la teoría cuántica: principalmente en la aplicación de los métodos de la teoría de la dispersión al estudio del transporte electrónico y de las propiedades de sistemas mesoscópicos y nanoscópicos. Convencido de las ventajas y la sencillez matemática de esos

¹F. J. Dyson, *Innovation in Physics*, *Scientific American*, **199**, 74 (1958).

²T. A. Brody, *The Philosophy Behind Physics*, editado por L. de la Peña y P. E. Hodgson, Springer-Verlag, Berlin-New York, 1993.

métodos en la solución de problemas complejos, fui incorporándolos gradualmente en la solución en un número importante de los ejemplos que se estudian en un curso regular de Física Cuántica. Ésto hace posible no sólo una presentación matemáticamente más simple, permite, como se verá aquí, obtener fácilmente un buen número de resultados físicos y una discusión conceptualmente más rica.

El plan general del libro es semejante al de casi todos los libros de texto dedicados a un primer curso de Física Cuántica no relativista. En los dos primeros capítulos se presenta un resumen de los problemas físicos que marcaron la crisis de las teorías clásicas y las ideas que explicaron, definitiva o temporalmente, esos problemas. Se introduce el postulado de cuantización de la energía de Plank, los de la dualidad onda-partícula de Einstein y De Broglie y la vieja teoría cuántica del átomo. Se concluye estos capítulos con la deducción de la ecuación de Schrödinger que, junto con el formalismo de Heisenberg, Jordan y Born, marca el inicio de la nueva teoría cuántica. Aunque se mantiene una posición definida en la interpretación física, no nos detenemos en temas polémicos, abordados con amplitud en la excelente *Introducción a la mecánica cuántica* de L. de la Peña. En los capítulos 3, 4 y 5, estudiamos con detenimiento las aplicaciones de Schrödinger a sistemas simples como el pozo infinito, el pozo y la barrera rectangulares finitas, y sistemas un poco más complejos como el doble pozo y el sistema periódico unidimensional de Krönig y Penney. Estudiar con mayor amplitud ejemplos que hace 20 años eran de interés puramente académicos, tiene ahora mucha importancia. Esos sistemas están presentes en los dispositivos optoelectrónicos de dimensiones nanoscópicas, crecidos con métodos experimentales de altísima precisión. El capítulo 6 está dedicado al método semiclásico de Wentzel, Kramers y Brillouin (aproximación WKB). En este capítulo como en los precedentes se utiliza ampliamente el método de la matriz de transferencia. El resto del material introduce el formalismo general de la teoría cuántica (operadores, momento angular y espín, representaciones y ecuación de Pauli) y las aplicaciones más emblemáticas de la física cuántica: el oscilador armónico, el átomo de hidrógeno, sus niveles de energía y la estructura fina que, entre 1920 y 1925, puso en crisis a la vieja teoría cuántica de Bohr. Se concluye el libro con un resumen de la teoría de perturbaciones y un capítulo dedicado al problema de la distinguibilidad o no de partículas idénticas. Se analiza la relación entre las simetrías de las funciones de onda y el espín de las partículas y se discuten propiedades fundamentales como la condensación de Bose-Einstein y el principio de exclusión de Pauli.

El objetivo principal del libro es ofrecer una presentación que privilegia la

parte conceptual, una presentación en la que se descubra, con cada uno de los ejemplos estudiados, una característica física nueva que, sumada a otras, da forma a la fenomenología cuántica. El propósito es mostrar al estudiante que la teoría cuántica, más que un conjunto de axiomas y ecuaciones diferenciales, es una teoría física inteligible, con propiedades físicas claras y bien definidas. Propiedades que, de una forma u otra, están presentes no sólo en los sistemas microscópicos, sino también en los macroscópicos. El efecto túnel en las barreras de potencial, la cuantización de la energía en potenciales de confinamiento y la coherencia cuántica, son propiedades que aparecen y reaparecen en el texto, modificados o transformados, y nos permiten entender propiedades tan importantes como la división de los niveles de energía en el pozo doble y la estructura de bandas en los sistemas periódicos. El enfoque que se utiliza en la primera parte del libro, simplifica el tratamiento matemático, hace más ordenados los procedimientos en la solución de la ecuación de Schrödinger, y permite obtener algunos resultados físicos de una forma más directa y sistemática.

El contenido y la profundidad con que se discuten los fundamentos de la teoría cuántica en este libro, lo hacen apropiado para estudiantes de física e ingeniería física. Los estudiantes graduados, interesados en cálculos teóricos y en las propiedades físicas de las estructuras nanoscópicas, encontrarán, en la primera parte del libro, una buena introducción al método de la matriz de transferencia y a la fenomenología cuántica de esos sistemas. En cada capítulo del libro se presentan dos o tres problemas resueltos que, en algunos casos, complementan la discusión de un tema. Las secciones y capítulos marcados con asterisco *, podrían quedar fuera de programa en un sistema trimestral. En este caso, es recomendable que los estudiantes cubran ese material en un curso complementario.

Agradezco a Emilio Sordo y Luis Noreña su amistad y las facilidades que por su intermedio me brinda la Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco; a los estudiantes de ingeniería física en la UAM-Azcapotzalco, especialmente a Fernando Arcenio Zubieta, Michael Morales, María Fernanda Ávila y Víctor Ibarra, su apoyo en la transcripción de mis notas al lenguaje TeX; a los revisores del libro, sus atinados comentarios y sugerencias; a Rosa M. Benitez, Concepción Azuar y Juan Manuel Galindo Medina, la paciencia y calidad de su trabajo. A Jimena Lascurain, de Reverté Ediciones, su interés y amable coordinación editorial. Doy gracias a mis alumnos, colegas y colaboradores, José Luis Cardoso, Alejandro Kunold, Herbert Simanjuntak, Arturo Robledo y Jaime Grabinsky, por su amistad y colaboración. Agradezco a mi esposa Liuddys su apoyo, cariño y comprensión.

Índice general

1. El origen de los conceptos cuánticos	1
1.1. La radiación de cuerpo negro	3
1.2. El efecto fotoeléctrico	8
1.3. El efecto Compton	9
1.4. El átomo de Rutherford y los postulados de Bohr	11
1.5. Sobre la teoría cuántica de la radiación de Einstein	13
1.5.1. La distribución de Planck y el segundo postulado de Bohr	14
1.5.2. El modelo de Einstein del calor específico	15
1.6. Problemas ilustrativos	17
1.7. Problemas	20
2. Difracción, dualidad y ecuación de Schrödinger	23
2.1. Reglas de cuantización de Sommerfeld-Wilson-Ishiwara	23
2.2. La dualidad onda-corpúsculo de De Broglie	25
2.3. La naturaleza dual y los experimentos de difracción	28
2.4. La mecánica cuántica ondulatoria	30
2.5. Problemas ilustrativos	33
2.6. Problemas	35
3. Propiedades de la ecuación estacionaria	37
3.1. La cuantización como un problema de eigenvalores	37
3.2. Degeneración y ortogonalidad de las eigenfunciones	38
3.3. La partícula libre	41
3.4. El pozo infinito	47
3.5. La densidad de corriente en mecánica cuántica	51
3.6. Notación de Dirac y algunas relaciones útiles	54
3.6.1. Algunas propiedades generales de los bras y kets*	55
3.6.2. Algunas relaciones útiles*	56

3.6.3. La representación de momentos*	57
3.7. Problemas ilustrativos	59
3.8. Problemas	63
4. Efecto túnel y otros fenómenos cuánticos	65
4.1. Potencial escalón 1D	66
4.2. Las amplitudes de <i>scattering</i> y la matriz de transferencia	75
4.3. La barrera de potencial rectangular	77
4.3.1. La función de onda en el problema de la barrera	82
4.3.2. Los coeficientes de reflexión y transmisión de la barrera	84
4.4. El pozo de potencial rectangular	87
4.5. Problemas ilustrativos	99
4.6. Problemas	103
5. Coherencia cuántica y bandas de energía	105
5.1. Doble pozo de paredes infinitas	106
5.2. La doble barrera	110
5.3. El doble pozo con paredes finitas	113
5.4. Sistema periódico finito	121
5.5. Problemas ilustrativos	128
5.6. Problemas	134
6. Aproximación WKB*	135
6.1. La aproximación semiclásica de WKB	136
6.2. Región de validez de la aproximación WKB	138
6.2.1. Continuidad y fórmulas de conexión	140
6.2.2. Cuantización de la energía en un pozo de potencial	141
6.3. Matrices de transferencia en la aproximación WKB	144
6.3.1. Matriz de transferencia de un pozo	144
6.3.2. Matriz de transferencia y tunelaje en la barrera	148
6.4. Problemas ilustrativos	152
6.5. Problemas	158
7. Operadores y variables dinámicas	159
7.1. Paquetes de onda y tiempo de tunelaje	160
7.2. Valores esperados de las variables físicas	165
7.3. Hermiticidad	168
7.3.1. Algunas relaciones de conmutación y teoremas importantes	170

7.4.	Desviación, varianza y dispersión de una variable física	173
7.5.	Desigualdad de Heisenberg	175
7.6.	Evolución temporal y representación de Heisenberg*	177
7.7.	La posición y el momento en la representación de momentos . . .	181
7.8.	Problemas ilustrativos	184
7.9.	Problemas	188
8.	El oscilador armónico	189
8.1.	Introducción	189
8.2.	La ecuación estacionaria del oscilador armónico	190
8.2.1.	La solución de la región lejana	191
8.2.2.	La solución polinomial, eigenvalores y eigenfunciones . . .	192
8.3.	Operadores de ascenso y descenso	196
8.4.	Transición dipolar y emisión espontánea	198
8.4.1.	Reglas de selección en la transición dipolar	198
8.4.2.	Tiempo de vida de estados excitados*	200
8.5.	Problemas ilustrativos	203
8.6.	Problemas	209
9.	Momento angular y potencial central	211
9.1.	Introducción	211
9.2.	Momento angular y relaciones de conmutación	211
9.2.1.	Conmutación de los operadores $\hat{L}_i$ con los operadores $\hat{x}_j$.	213
9.2.2.	Conmutación de los operadores $\hat{L}_i$ con los operadores $\hat{p}_j$.	214
9.2.3.	Conmutación entre las componentes $\hat{L}_j$	215
9.3.	Eigenvalores y eigenfunciones de $\hat{L}_z$ y $\hat{L}^2$	216
9.4.	Representaciones matriciales del momento angular*	222
9.4.1.	Representaciones matriciales de $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_z^*$	222
9.4.2.	Representaciones matriciales de $\hat{L}_x$ y $\hat{L}_y^*$	223
9.5.	Potenciales centrales	226
9.6.	Problemas ilustrativos	229
9.7.	Problemas	232
10.	El átomo de hidrógeno	233
10.1.	Introducción	233
10.2.	Los niveles de energía en el átomo de hidrógeno	235
10.2.1.	Soluciones cuando $\rho \rightarrow 0$ y cuando $\rho \rightarrow \infty$	236
10.2.2.	La solución radial R_{nl} y los eigenvalores de la energía . .	237

10.3. Propiedades de las eigenfunciones	239
10.3.1. La configuración electrónica de los átomos	242
10.4. El átomo de hidrógeno en campo magnético*	243
10.5. Efecto Zeeman normal*	246
10.6. Problema ilustrativo	248
10.7. Problemas	249
11. El espín y la ecuación de Pauli*	253
11.1. Introducción	253
11.2. Eigenvalores y representaciones del espín	256
11.2.1. Eigenvalores de $\hat{S}_z$ y $\hat{S}^2$	256
11.2.2. Representaciones del espín y las matrices σ de Pauli . . .	259
11.2.3. La ecuación de Pauli*	261
11.3. La interacción espín-órbita	264
11.4. El momento angular total	265
11.5. Problemas	267
12. Teoría de Perturbaciones*	269
12.1. Perturbaciones independientes del tiempo	270
12.1.1. Perturbación de estados no degenerados	270
12.1.2. Perturbación de estados degenerados	273
12.2. Perturbaciones dependientes del tiempo	275
12.3. La representación de interacción	279
12.4. Problema ilustrativo	282
12.5. Problemas	283
13. Partículas idénticas, bosones y fermiones*	285
13.1. Introducción	285
13.2. Distinguibilidad e indistinguibilidad	285
13.3. Bosones y fermiones	288
13.3.1. Condensación de Bose y el principio de exclusión de Pauli	290
13.3.2. Estadísticas de Bose-Einstein y Fermi-Dirac	292
13.4. Efecto de la estadística en la energía del sistema	296
13.4.1. Estados de espín de dos partículas con espín 1/2	297
13.4.2. Dos electrones en un pozo de potencial	299
13.4.3. El átomo de helio y la energía de intercambio	302
13.5. Problemas ilustrativos	305
13.6. Problemas	310

Apendice A. La reversibilidad temporal	313
Apendice B. Los polinomios de Laguerre	317

Capítulo 1

El origen de los conceptos cuánticos

A fines del siglo XIX, justamente cuando las teorías clásicas habían florecido en formulaciones bellas y elegantes, nuevos retos inquietaron el ambiente científico. La espectroscopía aplicada al análisis de la radiación de átomos y del cuerpo negro acumuló evidencias que no pudieron explicarse con las teorías existentes. La teoría electromagnética, que en las ecuaciones de Maxwell alcanzó su punto culminante, reconocía aún al éter como el medio de propagación de las ondas y el experimento de Michelson y Morley lo negaba. Con el descubrimiento del electrón en 1897, surgió el interés por comprender la estructura atómica. Éstos y otros problemas apuntalaron un periodo de crisis y de creatividad fecunda. Max Planck y Albert Einstein, son símbolos emblemáticos de las dos teorías de la física moderna que nacieron de la crisis: la física cuántica y la teoría de la relatividad. Ambas teorías introdujeron conceptos nuevos que han modificado la física y permeado la cultura moderna, dominada por las comunicaciones y la optoelectrónica.

Para comprender el formalismo de la física cuántica que estudiaremos en este libro, es muy ilustrativo revisar los principales problemas que marcaron la crisis y las ideas y conceptos con que se explicaron. En este capítulo y en el que sigue comentaremos esos problemas. El orden de presentación no será necesariamente el cronológico.

El primer problema cuya solución reveló la necesidad de modificar a fondo las teorías clásicas fue el de la *radiación de cuerpo negro*. Esta forma de radiación es emitida por todos los cuerpos y la intensidad, y distribución de frecuencias, dependen de su temperatura. Antes de la solución propuesta por Max Planck, la descripción de la densidad espectral en la región de bajas frecuencias era satisfactoria; pero en la de altas frecuencias (véase la figura 1.1) era contraria a la observación experimental. Max Planck resolvió este problema con el auxilio de

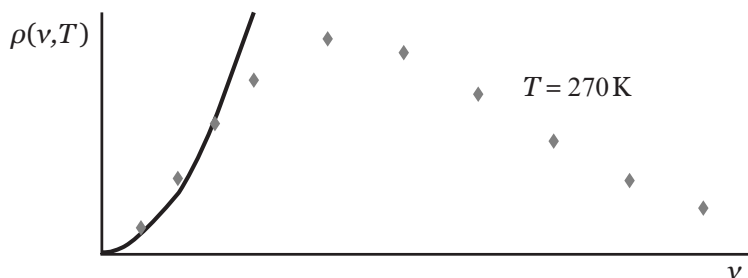


Figura 1.1: La distribución espectral de la densidad de energía de la radiación del cuerpo negro era como muestran los puntos, mientras que la descripción de las teorías clásicas era como indica la línea continua, correcta sólo en la región de bajas frecuencias.

un postulado de cuantización de la energía emitida y absorbida por las paredes del cuerpo negro.

Otro problema que requirió un enfoque nuevo, relacionado con la idea de cuantización, fue el del *efecto fotoeléctrico*. Antes de la explicación que Einstein dio a este problema, no se comprendía por qué la energía de los electrones emitidos por un metal, sobre el que incidía luz, dependía de su frecuencia ν , pero no de su intensidad. Además, no se explicaba por qué la emisión de electrones desaparecía cuando las frecuencias eran menores que cierto valor ν_c , característico de cada metal.

El descubrimiento del electrón, por Joseph J. Thompson en 1897, instaló en el mundo de la física un problema que estuvo latente por mucho tiempo. El problema de las líneas de emisión atómica y su relación con la estructura del átomo. Si el electrón (de carga eléctrica negativa) formaba parte del átomo y éste es evidentemente neutro, se tenía que admitir también la existencia de cargas positivas. Consiguientemente, era pertinente preguntarse ¿Cuáles eran las cargas positivas y qué posiciones tenían en el átomo? ¿Cómo se relacionaba la estructura electrónica de los átomos con las observaciones experimentales de las líneas de emisión que, para cada elemento, tienen un espaciamiento característico?

Años más tarde se observó un efecto interesante, el *efecto Compton* en el que la luz dispersada por una partícula cambia su longitud de onda (es decir, cambia su color) en función del ángulo de dispersión. Mostraremos líneas abajo que el efecto Compton se explica con sencillez, cuando se utilizan las ideas de cuantización, de dualidad y también las de la teoría especial de la relatividad.

En las secciones que siguen comentaremos estos problemas con un poco más

de detalle.

1.1. La radiación de cuerpo negro

Todo cuerpo absorbe y emite radiación de todas las frecuencias en cantidades que dependen de su temperatura. Para analizar esa radiación es conveniente aislarla de la que emiten otros cuerpos. Una forma de conseguir esto es considerar la radiación en el interior de una caja cerrada. Para estudiar esa radiación, se puede hacer un orificio pequeño en una de las paredes de la caja. La radiación en el interior de la caja se denomina radiación de cuerpo negro. De esta radiación se obtuvieron algunos resultados importantes. Entre éstos, una fórmula empírica según la cual la densidad de energía del campo de radiación es proporcional a T^4 , es decir:

$$u = \sigma T^4 \quad \text{con} \quad \sigma = 7.56 \times 10^{-16} \text{ JK}^{-4}/\text{m}^3. \quad (1.1)$$

Se conocía también la forma en que la densidad de energía estaba distribuida como función de las frecuencias; la densidad espectral $\rho(\omega, T)$ de la figura 1.1, que está medida en unidades de energía por unidad de volumen y unidad de frecuencia.

A finales del siglo XIX, se suponía que las teorías fundamentales de la física habían madurado a tal punto que cualquier resultado experimental era explicable y deducible. Se esperaba por esto que la expresión empírica (1.1) y la densidad espectral podrían derivarse de las teorías clásicas. Todos los intentos fracasaron. La línea de razonamiento que se siguió era, como veremos aquí, correcta. La falla tenía una causa sutil distinta que eventualmente cambiaría la física de manera radical. Se sugirió correctamente que si se deducía la densidad espectral $\rho(\omega, T)$, o equivalentemente $\rho(\nu, T)$, entonces el producto

$$du = \rho(\omega, T)d\omega = \rho(\nu, T)d\nu$$

integrado sobre todas las frecuencias, daría la densidad de energía buscada, es decir, que si se obtenía $\rho(\omega, T)$, o equivalentemente $\rho(\nu, T)$, se obtendría también

$$u = \int_0^\infty \rho(\omega, T)d\omega = \int_0^\infty \rho(\nu, T)d\nu. \quad (1.2)$$

El objetivo era entonces determinar $\rho(\omega, T)$. Con este propósito se hicieron muchos intentos y obtuvieron muchos resultados. Unos útiles y válidos; otros no.

Mencionaremos sólo algunos: la ley de Wien, que establece una condición general sobre $\rho(\omega, T)$ y dos resultados que nos permitirán exhibir la naturaleza del problema y ayudarán en la solución dada por Max Planck.

- (i) La ley de desplazamiento de Wien, establece que una condición necesaria para obtener la ley empírica (1.1) es que la función $\rho(\nu, T)$ debe ser tal que se pueda factorizar en la forma

$$\rho(\nu, T) = \nu^3 f(\nu/T), \quad (1.3)$$

siendo $f(\nu/T)$ una función por determinarse.

- (ii) Teniendo en cuenta que la radiación de cuerpo negro es independiente del material en las paredes, se sugirió por facilidad que éstas pueden modelarse como si estuvieran constituidas por osciladores armónicos independientes. Si cada oscilador tiene una frecuencia de oscilación característica ν y éstas tienen una distribución $\rho(\nu)$, es posible obtener, con los métodos de la física clásica, la energía media (por grado de libertad de los osciladores)³

$$\bar{E} = \frac{\pi^2 c^3}{\omega^2} \rho(\omega) = \frac{c^3}{8\pi\nu^2} \rho(\nu). \quad (1.4)$$

- (iii) Utilizando la mecánica estadística clásica se puede mostrar que la energía media de los osciladores, en equilibrio termodinámico a temperatura T , es

$$\bar{E} = k_B T, \quad (1.5)$$

con k_B la constante de Boltzmann.⁴

Combinando estos resultados, la física clásica concluye que

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T. \quad (1.6)$$

Esta expresión, conocida también como la fórmula de Rayleigh-Jeans, predice una distribución espectral que crece cuadráticamente con la frecuencia. Se ve

³ Para la deducción de esta energía media y otras expresiones importantes, se recomienda consultar entre otros los excelentes libros *Lectures on Physics* de Richard P. Feynman, Robert Leighton y Matthew Sands (Addison-Wesley, 1964) e *Introducción a la mecánica cuántica* de L. de la Peña (Fondo de Cultura Económica y UNAM, México, 1991).

⁴ $k_B = 1.38065810 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$

en la figura 1.1 que esta distribución coincide con los resultados experimentales sólo en la región de bajas frecuencias.⁵ Aunque es compatible con la ley de desplazamiento de Wien

$$f(\nu/T) = \frac{4k_B}{c^3} \frac{1}{\nu/T}, \quad (1.7)$$

diverge en la región de altas frecuencias. Consiguientemente, la integral (1.2) diverge también. Esta divergencia se conoce como la “catástrofe ultravioleta”.⁶

En el ocaso del siglo XIX, el 14 de diciembre de 1900, Max Planck presentó en la Sociedad Alemana de Física y publicó en el *Annalen der Physik*,⁷ la primera solución no convencional al problema de la radiación. Observó que *si la absorción y emisión ocurren en porciones discretas de energía*, múltiplos de un quantum E_ν , podía describir los resultados experimentales para todas las frecuencias. El argumento era más o menos el siguiente. Si un oscilador (vibrando con frecuencias ν en un sistema a temperatura T) absorbe y emite energía en múltiplos de su energía de vibración característica E_ν , su propia energía puede expresarse como

$$E = nE_\nu \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.8)$$

En consecuencia la probabilidad de encontrar al oscilador en un estado de energía E , dada por la función de distribución de Boltzmann

$$p(E, T) = \frac{e^{-E/k_B T}}{\int e^{-E/k_B T} dE}, \quad (1.9)$$

toma ahora la forma

$$p(E, T) = \frac{e^{-nE_\nu/k_B T}}{\sum_n e^{-nE_\nu/k_B T}}. \quad (1.10)$$

Esta discretización de la integral, aparentemente intrascendente, representó un cambio fundamental. Con la función de distribución discretizada, la energía media se determina de la siguiente expresión

$$\bar{E} = \frac{\sum_n nE_\nu e^{-nE_\nu/k_B T}}{\sum_n e^{-nE_\nu/k_B T}}. \quad (1.11)$$

⁵ J. W. S. Rayleigh, *Philosophical Magazine*, series 5, 49 (301): 539 (1900); J. H. Jeans, *Phil. Trans. R. Soc. A*, **196** 274: 397 (1901).

⁶ Aparentemente el término fue acuñado por Paul Ehrenfest, años después.

⁷ M. Planck, *Ann. Phys.*, **4**, 553 (1901).

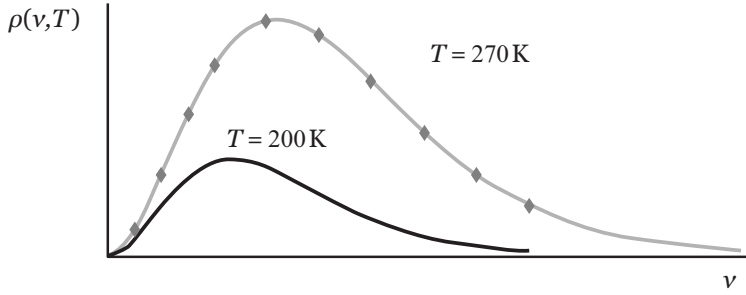


Figura 1.2: La densidad espectral de Planck depende de la frecuencia y la temperatura. Al aumentar la temperatura el espectro se mueve hacia las frecuencias mayores (corrimiento al azul). En esta gráfica se dibuja (ver líneas continuas) para dos temperaturas diferentes. La descripción coincide con los datos experimentales, representados por puntos, en todo el dominio de frecuencias.

Las sumas en el numerador y denominador se evalúan fácilmente. Si recordamos que

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \quad (1.12)$$

y también que

$$\frac{\partial}{\partial x} \sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{x} \sum_{n=0}^{\infty} n x^n = \frac{1}{(1-x)^2}, \quad (1.13)$$

se obtiene sin dificultad la energía media

$$\bar{E} = \frac{E_\nu}{e^{E_\nu/k_B T} - 1}. \quad (1.14)$$

Esta expresión se reduce a $k_B T$ en el límite (continuo) de altas temperaturas, en el que los exponentes $E_\nu/k_B T$ de ν 's sucesivas tienden a cero. Combinando con la energía media de la ecuación (1.4) resulta

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{E_\nu}{e^{E_\nu/k_B T} - 1}. \quad (1.15)$$

Para que esta distribución cumpla con la ley de desplazamiento de Wien, es necesario que la energía característica E_ν , de absorción y emisión mínima, sea

proporcional a la frecuencia ν , es decir que

$$E_\nu = h\nu. \quad (1.16)$$

La constante de proporcionalidad h es la famosa *constante de Planck* cuya trascendencia va mucho más allá de su rol en esta relación de proporcionalidad. Es una de las constantes fundamentales de la física y de las leyes de la naturaleza. La representación más usada es $\hbar = h/2\pi$. La distribución de Planck es entonces

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}, \quad \rho(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}. \quad (1.17)$$

Esta densidad describe los resultados experimentales desde la región de bajas hasta la de altas frecuencias (véase la figura 1.2). Se ve en esta figura que cuando la temperatura aumenta, el espectro se desplaza hacia las frecuencias mayores. Esto se conoce como el corrimiento al azul. Es fácil ver que cuando las frecuencias son bajas y el quantum de energía $h\nu$ es menor que la energía térmica, es decir, cuando $h\nu \ll k_B T$, la densidad espectral de Planck se reduce a la de Rayleigh-Jeans.

Una prueba importante para la densidad espectral de Planck es el cálculo de la densidad de energía del campo de radiación que, con esta función, toma la forma

$$u = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} = \frac{8\pi k_B^4}{c^3 h^3} T^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (1.18)$$

Como la integral en x es un número (se puede mostrar que es igual a $\pi^4/15$), no sólo se tiene la dependencia correcta de la temperatura, se puede además utilizar la densidad de energía empírica de la ecuación (1.1) para obtener la constante de Planck. El valor que resulta es:

$$h = 6.6260755 \times 10^{-34} \text{ Js} = 4.1356692 \times 10^{-15} \text{ eVs}.$$

Como se dijo antes, es común expresar $h\nu$ como $\hbar\omega$ con $\hbar = h/2\pi = 1.054572 \times 10^{-34} \text{ Js}$ y $\omega = 2\pi\nu$. Nótese que las unidades de h son de energía $\times$ tiempo. La pequeñez de h oculta el fenómeno cuántico. En efecto, si las frecuencias de oscilación fueran, digamos, del orden de 10 Hz, las energías absorbidas o emitidas por los osciladores serían, como se dijo antes, múltiplos de $h\nu \approx 10^{-32} \text{ J}$. Ésta es una cantidad de energía muy pequeña. ¿Se pueden apreciar cambios en la

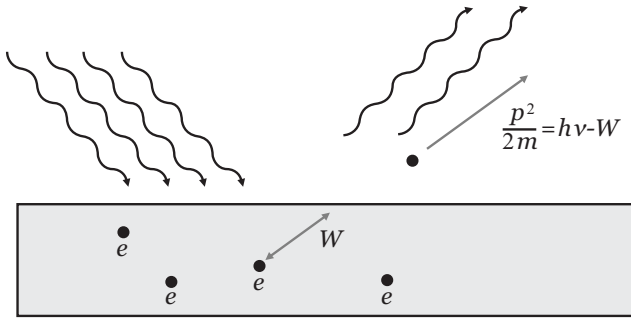


Figura 1.3: La energía $h\nu$ de la radiación que incide en el metal, y absorbe un electrón, se distribuye entre la energía necesaria para liberar al electrón del metal (llamada función trabajo) W y la energía cinética $p^2/2m$ del electrón liberado.

energía de esta magnitud en los sistemas físicos macroscópicos? Supongamos que tenemos un oscilador clásico, constituido por una partícula de masa $m = 1$ g adherida a un resorte de constante $k = 10$ N/m. Si la amplitud de oscilación de la partícula es $x_o = 1$ cm, su energía y frecuencia de oscilación son del orden de $E \simeq 5 \times 10^{-4}$ y $\nu \simeq 10$ Hz. Suponiendo que las energías se pueden medir con una precisión $\Delta E \simeq 10^{-6} E$, el número de *quantums* de energía contenidos en ΔE es $n = \Delta E/h\nu \approx 10^{22}$; un número muy grande. Por lo tanto, la contribución de un quantum es prácticamente imperceptible. Veremos después que este número será considerablemente menor, del orden de 1, cuando las energías y partículas sean de dimensiones atómicas.

1.2. El efecto fotoeléctrico

En 1902 Philipp Lenard hizo notar que “la concepción usual de que la energía de la luz está continuamente distribuida sobre el espacio a través del cual se propaga encuentra serias dificultades cuando se intenta explicar el fenómeno fotoeléctrico”.⁸ La idea de los quantums de energía absorbidos y emitidos, extendida a la radiación en general, permitió a Albert Einstein explicar el efecto fotoeléctrico en términos de una naturaleza “corpúscular” de la luz, es decir, de una naturaleza dual en la que coexisten onda y partícula, y se integran en “la ondícula”.⁹

⁸ En A. Einstein, *Ann. Phys.* **17**,132 (1905).

⁹ Como la llamaba T. Brody.

En 1887, Heinrich Hertz observó que un metal alcalino emite electrones cuando sobre él incide luz. Las características principales de este fenómeno son:

- i) *la velocidad de los electrones emitidos depende solamente de la frecuencia de la luz incidente;*
- ii) *el número de electrones emitidos depende de la intensidad de la radiación incidente;*
- iii) *para cada metal existe una frecuencia de la luz incidente, denominada frecuencia crítica ν_c , tal que, para frecuencias menores que ésta, no hay efecto fotoeléctrico.*

Si los cuantums o corpúsculos de luz tienen energía $h\nu$, ésta se transmite al electrón con el que interactúa el corpúsculo. El electrón utiliza una parte W de esta energía, llamada función trabajo, para liberarse del metal (para cancelar la energía de ligadura) y el resto es su energía cinética. Es decir:

$$\frac{1}{2}m_e v^2 = h\nu - W. \quad (1.19)$$

Cuando la frecuencia de los corpúsculos es tal que $h\nu$ coincide con W , la energía cinética es cero. Ésta es una condición particular que define a la frecuencia crítica $\nu_c = W/h$. La frecuencia crítica es una variable física con un valor distinto para cada metal. Cuando la frecuencia de la radiación es $\nu \geq \nu_c$, cada fotón absorbido en la interacción da lugar a un electron libre, el número de estos electrones depende entonces del número de fotones, es decir, de la intensidad de la radiación. Las tres características del efecto fotoeléctrico se explican de manera simple. Además, según la teoría especial de la relatividad el momento de una partícula sin masa,¹⁰ está dado por la relación

$$p = \frac{E_\nu}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k. \quad (1.20)$$

En algunas situaciones, como en el efecto Compton que discutiremos a continuación, el comportamiento de los corpúsculos de luz se comprende fácilmente si se les asigna un momento $\hbar \mathbf{k}$.

1.3. El efecto Compton

En 1923, A. H. Compton observó que la longitud de onda de rayos X dispersados por electrones en grafito es mayor que la incidente y depende del ángulo de

¹⁰ En la teoría especial de la relatividad se tiene la relación $E^2 = p^2 c^2 + (m_o c^2)^2$ entre la energía E , el momento y la energía en reposo $m_o c^2$. Es claro que si la masa en reposo m_o es cero, queda la relación $E = pc$.

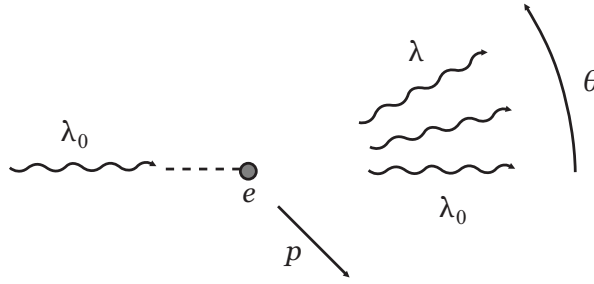


Figura 1.4: En la colisión de la radiación con electrones, el aumento de la longitud de onda λ de la radiación dispersada con el ángulo de dispersión θ , se conoce como el efecto Compton. Este efecto se explica, ver el texto, cuando se concibe a los cuantums de radiación como corpúsculos de energía $h\nu$ y momento $\hbar\mathbf{k}$.

dispersión. Si la interacción electrón-radiación se analiza como la colisión de dos corpúsculos, con energía $E_\nu = \hbar\omega$ y momento $\mathbf{p}_\nu = \hbar\mathbf{k}$, la conservación de estas cantidades físicas se escribe como

$$\hbar\omega_0 + E_0 = \hbar\omega + E; \quad (1.21)$$

$$\hbar\mathbf{k}_0 + \mathbf{p}_0 = \hbar\mathbf{k} + \mathbf{p}; \quad (1.22)$$

con $E = mc^2 = m_0c^2/\sqrt{1-v^2/c^2}$ y $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ la energía y momento del electrón. Después de un poco de algebra se obtiene la relación

$$\omega\omega_0(1 - \cos\theta) = \frac{m_0c^2}{\hbar}(\omega_0 - \omega), \quad (1.23)$$

que se reescribe en la forma

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos\theta) = 2\lambda_c \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (1.24)$$

En la última igualdad se introdujo la longitud de onda de Compton $\lambda_c = h/m_0c$ que define una variable ondulatoria para las partículas con masa, una longitud de onda, que tiende a cero cuando crece la masa. Es evidente de esta ecuación que $\lambda \geq \lambda_0$, y que el aumento en la longitud de onda es máximo cuando $\theta = \pi$,

es decir, cuando la dispersión es para atrás (*backscattering*). El cambio $\Delta\lambda$ en la longitud de onda es del orden de λ_c . Para el electrón es $\approx 2.4 \times 10^{-10}$ cm. El cambio relativo a la longitud de onda incidente, $\Delta\lambda/\lambda_0$, es del orden de λ_c/λ_0 . Este cociente da idea de la posibilidad de observar o no el efecto Compton. Si la radiación incidente es luz visible, el cambio relativo será del orden de 10^{-5} . En cambio, si la radiación incidente tiene longitudes de onda menores (que las de la luz visible), el cambio relativo será mayor que el que experimenta la luz y el efecto Compton se observará fácilmente. Por ejemplo, para rayos X con $\lambda_0 \approx 10^{-9}$ cm, el cambio relativo es del orden de 10^{-1} , que representa un cambio de 10 % de la longitud de onda incidente y, entonces, este efecto es fácilmente observable.

1.4. El átomo de Rutherford y los postulados de Bohr

Para explicar la dispersión de partículas α por átomos, Rutherford, siguiendo aproximadamente el modelo de átomo “saturniano” sugerido en 1904 por Hantarö Nagaoka, propuso que los átomos estaban constituidos por una carga positiva $+Ze$ concentrada en una región muy pequeña, conocida ahora como núcleo, y Z electrones orbitando alrededor. Con este modelo de átomo, Rutherford dedujo la distribución angular de las partículas dispersadas y pudo explicar sus resultados, y los de Geiger de 1910 que coincidían sustancialmente con los suyos. Quedaban aún, sin explicación, las líneas de emisión de los átomos. Según la teoría clásica, un electrón está moviéndose en una órbita circular alrededor del núcleo está sujeto a una fuerza “centrífuga” y una fuerza coulombiana. Si las magnitudes de estas fuerzas son iguales, se puede expresar la energía del electrón como

$$E = -\frac{1}{2}m\omega^2 \left(\frac{Ze^2}{2E} \right)^2. \quad (1.25)$$

y la frecuencia angular del electrón está dada por

$$\omega = \frac{2}{e^2 Z} \sqrt{\frac{2|E|^3}{m}}. \quad (1.26)$$

Aquí m y e son la masa y carga del electrón. Si la energía E es continua, la frecuencia ω también lo es. Sin embargo, los resultados experimentales mostraban que las frecuencias de emisión eran discretas.¹¹ Balmer, en 1885, encontró que

¹¹ Se suponía que la frecuencia de emisión correspondía a la frecuencia de oscilación.

las longitudes de onda de las 4 líneas del espectro del hidrógeno podían obtenerse de la fórmula

$$\frac{1}{\lambda} = \kappa \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{para } n = 3, 4, 5, 6, \dots \quad (1.27)$$

en donde $\kappa = 17\,465 \text{ cm}^{-1}$. Poco después J. R. Rydberg, mostró que todas las series conocidas se obtenían de la fórmula

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad \text{con } n < m. \quad (1.28)$$

La constante $R = 109\,735.83 \text{ cm}^{-1}$ se conoce como la constante de Rydberg.

En ausencia de una explicación rigurosa que explique la estructura discreta del espectro atómico, Niels Bohr, utilizando el modelo de Rutherford para el átomo de hidrógeno, resumido en la ecuación (1.25), y suponiendo una expresión para la energía del electrón, semejante a la sugerida por Planck, de la forma¹²

$$E_n = nh\nu/2, \quad (1.29)$$

con n entero, obtuvo la conocida fórmula para las energías en el átomo de hidrógeno

$$E_n = -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2 n^2}, \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.30)$$

Esta fórmula se deducirá rigurosamente en el capítulo 10, de la teoría cuántica que se desarrolló posteriormente. Con esta expresión para la energía, Bohr pudo dar cuenta de la separación y la regularidad de las líneas en el espectro de emisión del átomo de hidrógeno y de las fórmulas de Balmer y Rydberg. En efecto, la diferencia $E_{n_2} - E_{n_1}$ (asociada a la transición $E_{n_1} \rightarrow E_{n_2}$) conduce a la fórmula de Rydberg. Sin embargo, de la teoría electromagnética, que a principios del siglo XX era una de las teorías más firmemente consolidadas, se sabía que las cargas aceleradas radiaban energía, la energía de frenamiento o *Bremsstrahlung*. En el modelo de Rutherford, los electrones están acelerados y por lo tanto deben perder energía y, eventualmente, colapsar en el núcleo. Pero eso no parecía ocurrir. Dada la coincidencia con la fórmula de Rydberg, y la dificultad de explicar estas contradicciones básicas, Niels Bohr optó por enunciar los siguientes postulados:

I. *Un sistema atómico puede sólo existir en una serie de estados discontinuos.*

¹² N. Bohr, *Philosophical Magazine*, serie 6, vol. 26, 1 (1913).

II. La radiación absorbida o emitida durante una transición entre dos estados estacionarios posee una frecuencia ν dada por

$$h\nu = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right). \quad (1.31)$$

En el modelo de Bohr, permite dar cuenta de los resultados observados pero no explica por qué un electrón acelerado se mantiene en una órbita estable, ni el mecanismo de emisión, ni las leyes que determinan las transiciones de un estado a otro. No obstante estas limitaciones, los postulados y el principio de correspondencia con la descripción clásica en el límite de números cuánticos n grandes (propuesto también por Bohr), se sostuvieron por algunos años, y constituyen lo que después se llamó la vieja teoría cuántica. Hubo, entre tanto, muchos intentos por explicarlos sobre bases más firmes. En esos intentos destacaron dos escuelas fundamentales: la de Arnold Sommerfeld en Munich y, muy especialmente, la de Max Born en Göttingen. Están más allá del propósito de este libro el análisis y referencia detallada a los trabajos de Sommerfeld, Born, van Vleck, Heisenberg, Jordan, Pauli, Dirac, etc. que alcanzaron en el trabajo conjunto de Born, Heisenberg y Jordan su cúspide mayor: la teoría cuántica en su versión matricial. Pocos meses después, siguiendo una línea de pensamiento diferente, mucho más relacionada con los experimentos de difracción de partículas y especialmente con la dualidad onda partícula propuesta por Luis de Broglie (1923-1924) para las partículas con masa como el electrón, Erwin Schrödinger introdujo la versión ondulatoria de la mecánica cuántica. En el siguiente capítulo nos referiremos con mayor detalle a este enfoque alternativo de la teoría cuántica. Para concluir el presente capítulo vamos a resumir las ideas de Einstein publicadas¹³ en el año 1917, en otro de sus trabajos célebres, con título: “*Sobre la teoría cuántica de la radiación*”, en el que, entre otras cosas, deduce la distribución de Planck y la relación (1.31) del segundo postulado de Bohr.

1.5. Sobre la teoría cuántica de la radiación de Einstein

Si los cuantums de energía no sólo se atribuyen al campo de radiación y al proceso de emisión o absorción sino también a los osciladores en equilibrio térmico con

¹³ A. Einstein, *Mitteilungen der Physikalischen Gesellschaft Zürich* **18**, 47 (1916) y *Phys. Zs.* **18**, 121 (1917).

el campo de radiación, es decir, a las moléculas en las paredes del cuerpo negro, es posible razonar de otra forma respecto a los sistemas cuánticos. Resumiremos a continuación las ideas de Einstein.

1.5.1. La distribución de Planck y el segundo postulado de Bohr

Einstein supuso que, si las moléculas sólo pueden existir en un conjunto discreto de estados con energías $E_1, E_2, \dots$ la frecuencia relativa de cada estado, en analogía con la distribución de Boltzmann-Gibbs, estaba dada por

$$f_n = Ce^{-E_n/k_bT}, \quad (1.32)$$

en la que C es una constante de normalización. Una molécula en un estado de energía E_n , en un campo de radiación, absorbe radiación de frecuencia ν_{nm} y pasa a un estado de energía $E_m > E_n$. La probabilidad de que ocurra este proceso en un tiempo dt es

$$dW_n^m = B_n^m \rho dt. \quad (1.33)$$

Aquí ρ es la densidad espectral en la frecuencia ν_{nm} y B_n^m es la probabilidad de transición inducida por el campo, del estado n al m , por unidad de tiempo. Dado que el estado E_n está presente con una frecuencia f_n , la probabilidad de transición del estado n al m será:

$$Ce^{-E_n/k_bT} B_n^m \rho dt; \quad (1.34)$$

Las moléculas pueden también emitir radiación y pasar a un estado de menor energía. Para este proceso Einstein contempló dos contribuciones posibles: la inducida por la interacción con un campo externo, y otra de emisión espontánea que ocurre independientemente de la presencia del campo. Si la probabilidad de transición inducida por el campo, del estado m al n , por unidad de tiempo es B_m^n , la probabilidad de que una molécula emita en un tiempo dt será:

$$dW_m^n = (A_m^n + B_m^n \rho) dt; \quad (1.35)$$

aquí A_m^n es la probabilidad de emisión espontánea por unidad de tiempo. Para que los procesos de absorción y emisión estén en equilibrio se requiere que

$$e^{-E_n/k_bT} B_n^m \rho = e^{-E_m/k_bT} (A_m^n + B_m^n \rho); \quad (1.36)$$

de esta condición resulta la densidad espectral

$$\rho = \frac{A_m^n}{B_m^n} \frac{1}{e^{(E_m - E_n)/k_bT} - 1}. \quad (1.37)$$